

RIJKSINSTITUUT VOOR VOLKSGEZONDHEID EN MILIEUHYGIËNE

BILTHOVEN

Rapport nr. 719101 014

**Onderzoek van de gevoeligheid van modelmatig
berekende persistentie van chemicaliën in het milieu.**

P.A.van der Burg¹⁾

maart 1994

**1) Universiteit van Amsterdam (UvA), vakgroep Milieu- en Toxicologische
Chemie (MTC)**

Dit onderzoek werd verricht in opdracht en ten laste van het Directoraat-Generaal Milieubeheer, Directie Stoffen, Veiligheid, Straling van het ministerie voor Volkshuisvesting, Ruimtelijke Ordening en Milieubeheer, in het kader van het project 719101.

Daarnaast is dit onderzoek ook verricht in opdracht van de Universiteit van Amsterdam, vakgroep Milieu- en Toxicologische Chemie, in het kader van een afstudeeropdracht.

Woord vooraf

Dit rapport is uitgevoerd in het kader van een afstudeerstage aan de Universiteit van Amsterdam (UvA), vakgroep Milieu- en Toxicologische Chemie (MTC). Het in dit rapport beschreven gevoeligheidsonderzoek maakt deel uit van het MTC-project "Ontwikkeling van een QSAR systeem voor de voorspelling van de eliminatie van chemicaliën in het milieu" en het RIVM-project "Ecorouting".

Het onderzoek werd in de periode 27 september 1993 tot 1 maart 1994 uitgevoerd op het Laboratorium voor ecotoxicologie, afdeling milieuchemie/coördinatie en integratie van het Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiëne (RIVM) te Bilthoven.

De begeleiding vanuit het RIVM is verzorgd door Dr. Ir. D. van de Meent

De begeleiding vanuit de UvA is verzorgd door Drs. C.L. Cheung

De eindverantwoordelijkheid vanuit de UvA lag bij Prof. Dr. H.A.J. Govers

Bij deze wil ik het RIVM bedanken voor het feit dat zij deze stageplaats beschikbaar hebben gesteld. Daarnaast wil ik vele personen, zowel binnen als buiten het RIVM, bedanken voor hun bijdrage (op welke wijze dan ook) die ze hebben geleverd aan dit onderzoek. Ik denk hierbij vooral aan Dik van de Meent, Marc van den Hoop en Henri den Hollander.

Verzendlijst

- 1 Directoraat-Generaal Milieubeheer, Directie Stoffen, Veiligheid, Straling
- 2 Plv. Directeur-Generaal Milieubeheer, Dr. Ir. B.C.J. Zoeteman
- 3 Prof. Dr. C. v. Leeuwen, DGM
- 4 Prof. Dr. H.A.J. Govers, Universiteit van Amsterdam, vakgroep Milieu- en Toxicologische Chemie
- 5 Drs. C.L. Cheung, Universiteit van Amsterdam, vakgroep Milieu- en Toxicologische Chemie
- 6 Secretariaat vakgroep Milieu- en Toxicologische Chemie, Universiteit van Amsterdam
- 7-11 Leden begeleidingscommissie project "Ontwikkeling van een QSAR systeem voor de voorspelling van de eliminatie van chemicaliën in het milieu", d.t.v. drs. C.L. Cheung, Universiteit van Amsterdam, vakgroep Milieu- en Toxicologische Chemie
- 12 Dr. J. Hermens, RITOX
- 13 Drs. E.M.J. Verbruggen, RITOX
- 14 Depôt van Nederlandse publicaties en Nederlandse bibliografiën
- 15 Directie RIVM
- 16 Sectordirecteur Stoffen en Risico's, Dr. Ir. G. de Mik
- 17 Hoofd Laboratorium voor Ecotoxicologie, Prof. Dr. H.A.M. de Kruijf
- 18 Hoofd Afdeling Voorlichting en Public Relations, Mw. Drs. J.A.M. Lijdsman-Schijvenaars
- 19 Dr. J. Struijs, RIVM-ECO, afdeling milieuchemie
- 20 Dr. W. Slooff, RIVM-ECO, afdeling Coördinatie en Integratie
- 21 Dr. Ir. D. van de Meent, RIVM-ECO, afdeling Coördinatie en Integratie
- 22-24 Auteur
- 25 Projectarchief
- 26 Bureau projecten- en rapportregistratie
- 27 Bibliotheek RIVM
- 28 Bibliotheek RIVM, depôt ECO
- 29-35 Bureau rapportenbeheer

Inhoud

Woord vooraf	ii
Verzendlijst	iii
Inhoud	iv
Summary	vi
Samenvatting	vii
1 Inleiding	1
2 Theorie	3
2.1 Algemeen Simplebox	3
2.2 Opbouw van Simplebox	3
2.3 Belangrijke processen	7
2.3.1 Algemeen	7
2.3.2 Degradatie	7
2.3.3 Vervluchtiging	12
2.3.4 Atmosferische depositie	16
2.3.5 Sedimentatie	21
2.3.6 Accumulatie	23
2.4 Uitbreiding Simplebox tot het multi-schalen model 3scalbox	26
3 Methodiek	27
3.1 Algemeen	27
3.2 Programma opbouw 3scalbox	27
3.3 Modelberekeningen	28

4 Resultaten en discussie	31
4.1 Gevoeligheidsoppervlakken	31
4.2 Interpretatie van het gevoeligheidsoppervlak bij $t_{1/2} = 1000$ dagen	34
4.3 Extrapolatie naar andere halfwaardetijden	39
5 Conclusies	41
6 Aanbevelingen	42
7 Geraadpleegde literatuur	43
Appendix A Automatiserings macro	45
Appendix B Invoergegevens 3scalbox	47
Appendix C Voorbeeld steady state resultatentabel 3scalbox	51
Appendix D Persistenties in tabelvorm	52

Abstract

The purpose of this study is, to find out the sensibility of the Simplebox model for the value of abiotic degradation constants. The 3scale version of Simplebox was used for this sensitivity test. 3scalbox is a spreadsheetmodel, programmed in Microsoft Excel. The basis of this model is the fugacitymodel of Mackay. This multicompartimental and 0-dimensional model has been developed at the RIVM to predict the influence of partition properties and degradation data on the persistence of a chemical.

Chemical properties taken for this test were the octanol-water partitioncoefficient (K_{ow}), the vapor pressure and the pseudo first order degradation constant of a hypothetical chemical in water. In case of the K_{ow} , a range of 10^3 to $10^{7.7}$ was chosen, for the vapor pressure that was a range of 10^{-7} to 10^5 Pa and for the halflife in water it was a range of 10^{-1} to 10^5 days.

Samenvatting

Het doel van dit onderzoek is om te weten hoe gevoelig het Simplebox model is voor de waarde van abiotische degradatie constanten. Voor dit gevoeligheidsonderzoek werd de drie schalen versie 3scalbox van Simplebox gebruikt. 3scalbox is een spreadsheetmodel wat geprogrammeerd is in Microsoft® Excel. Bij dit model staat het fugaciteitsmodel van Mackay als basis. Dit multicompartimentale en 0-dimensionale model is bij het RIVM ontwikkeld om te kunnen voorspellen wat de invloed is van partitie eigenschappen en afbraakgegevens op de persistentie van een stof.

Als stofeigenschappen in dit onderzoek werden de octanol-water partitiecoëfficiënt (K_{ow}), de dampdruk en de pseudo eerste orde afbraakconstante van een hypothetische stof in water genomen. In het geval van de K_{ow} is gekozen voor een range van 10^3 tot $10^{7.7}$, voor de dampdruk een range van 10^{-7} tot 10^5 Pa en voor de halfwaardetijd in water een range van 10^{-1} tot 10^5 dagen.

De noodzakelijke (level 4) modelberekeningen hadden zo veel rekentijd nodig, dat ten behoeve van dit gevoeligheidsonderzoek een automatiseringsmacro is geschreven.

De resultaten van deze modelberekeningen zijn grafisch weergegeven in 3D-oppervlakte figuren. Deze verkregen gevoeligheidsoppervlakten zijn met behulp van het degradatieproces en de transportprocessen vervluchtiging, atmosferische depositie, sedimentatie en accumulatie geïnterpreteerd. Bij een lage halfwaardetijd (10^{-1} dag) blijkt dat de persistentie nihil is tot een K_{ow} van 10^7 (onafhankelijk van de dampdruk). Bij een K_{ow} groter dan 10^7 zal de sedimentatie echter sterk gaan toenemen, waardoor de persistentie sterk toeneemt. Als nu de halfwaardetijd voor de afbraak in water groter wordt, zal de afbraak langzamer gaan verlopen waardoor er relatief meer tijd voor de chemische stof vrij komt om zich via transport naar andere compartimenten te verplaatsen. Kortom, de vervluchtiging, de atmosferische depositie en accumulatie worden belangrijker. Afhankelijk van de octanol-water partitiecoëfficiënt (K_{ow}) en de dampdruk zal één of meer van deze processen gaan toenemen, waardoor de persistentie zal toe- of afnemen.

1 Inleiding

In een milieu-toxicologisch onderzoek aan chemische verbindingen is het vrijwel altijd noodzakelijk om van de desbetreffende verbinding een aantal gegevens te verkrijgen, om uiteindelijk een uitspraak te kunnen doen over b.v. de toxiciteit, afbreekbaarheid, accumulatiegedrag of de persistentie. Om deze reden tracht men een aantal van deze gegevens te voorspellen op grond van haar fysisch-chemische parameters. Zo'n verband tussen een struktureigenschap of een fysische/chemische parameter en een activiteit heet een QSAR (Quantitatieve Strukture Activity Relationship). QSAR's worden ondermeer gebruikt om de afbraakconstanten van een (organische) stof te voorspellen. Deze afbraakconstanten kunnen als invoer dienen voor het Simplebox model [1]. Dit model is bij het RIVM ontwikkeld om te voorspellen wat de invloed is van partitie eigenschappen en afbraakgegevens op de persistentie van een stof die vrijkomt in het milieu. Het is aldus van belang om te weten of het model gevoelig is voor de waarde van de afbraakconstanten.

Het in dit gevoeligheidsonderzoek gebruikte 3scalbox model is een drie schalen versie van Simplebox. De modelberekeningen geven een indicatie over het lot van een chemische stof in elk van de milieucompartimenten bodem, water en lucht.

De concentratie van een chemische stof in een bepaald milieu-compartiment laat zich beschrijven door een massabalans. Deze massabalans is geformuleerd als functie van processnelheden. Indien men dus deze processnelheden kan schatten, beschikt men over een methode waarmee men de concentratie na een bepaalde tijd kan schatten. Indien men deze concentratie kan schatten, is het tevens mogelijk om de persistentie na bepaalde tijd te bepalen.

Het is dan mogelijk om de persistentie in het milieu uit te drukken als functie van bepaalde stofeigenschappen. Als stofeigenschappen in dit onderzoek worden de octanol-water partitiecoëfficiënt (K_{ow}), de dampdruk en de pseudo eerste orde afbraakconstante van een hypothetische stof in water genomen.

De persistentie is hier als volgt gedefinieerd :

$$\text{Persistentie}(\%) = \frac{\text{hoeveelheid stof 5 jaar na de emissiestop}}{\text{totale aanwezige hoeveelheid stof bij emissiestop}} * 100 \quad (1)$$

Deze persistentie wordt verkregen als resultaat van de modelberekening, en geldt voor alle drie de schalen afzonderlijk, alsmede voor het totaal over de drie schalen. Voor een aantal pseudo eerste orde afbraakconstanten is het verband tussen de persistentie en de eerder genoemde stofeigenschappen met behulp van een gevoeligheidsoppervlak weergegeven.

2 Theorie

2.1 Algemeen Simplebox

Simplebox is een model, dat ontworpen is voor het uitvoeren van milieuchemische boxmodel berekeningen. Dit model, gebaseerd op het zogenaamde "Mackay-type", is multi-compartimentaal en 0-dimensionaal (zonder plaatscoördinaten in de x, y en z richting). Dit type model gaat er vanuit dat de verschillende milieucompartmenten (lucht, water, biota, sediment en bodem) homogeen zijn. De berekeningen geven een indicatie over het lot van een chemische stof in het totale milieu. Tevens kunnen ze worden gebruikt als middel om de persistentie in het milieu en eventuele dispersie uit te drukken als afgeleide stofeigenschap.

2.2 Opbouw van Simplebox

Voor elk compartiment in Simplebox wordt een massabalans vergelijking geschreven die weergeeft met welke snelheid de concentratie van de te modelleren chemische stof in de desbetreffende box toe- of afneemt. De algemene vorm van zo'n massabalans is :

$$V_i \cdot \frac{\delta C_i}{\delta t} = EMIS_i + IMP_i - EXP_i - DEGRAD_i - LEACH_i - BURIAL_i + \sum ADV_{ij} + \sum DIFF_{ij}$$

waarin :	V_i	=	volume compartiment i [m^3]
	C_i	=	concentratie in compartiment i [$mol \cdot m^{-3}$]
	t	=	tijd [s]
	$EMIS_i$	=	emissie naar het compartiment i [$mol \cdot s^{-1}$]
	IMP_i	=	import naar compartiment i [$mol \cdot s^{-1}$]
	EXP_i	=	export van compartiment i [$mol \cdot s^{-1}$]
	$DEGRAD_i$	=	degradatie in compartiment i [$mol \cdot s^{-1}$]
	$LEACH_i$	=	uitlogen vanuit compartiment i [$mol \cdot s^{-1}$]
	$BURIAL_i$	=	sediment begraving vanuit compartiment i [$mol \cdot s^{-1}$]
	ADV_{ij}	=	advectief transport vanuit compartiment i naar compartiment j [$mol \cdot s^{-1}$]
	$DIFF_{ij}$	=	diffusief transport vanuit compartiment i naar compartiment j [$mol \cdot s^{-1}$]

Elk van deze termen kunnen, indien van toepassing, uitgeschreven worden als functie van de concentratie. De term $DEGRAD_i$ wordt bijvoorbeeld uitgeschreven als :

$$DEGRAD_i = V_i * DEGRD_i * C_i \quad (3)$$

waarin :	DEDRAD _i	=	degradatie in compartiment i [mol.s ⁻¹]
	V _i	=	volume compartiment i [m ³]
	DEGRD _i	=	degradatiesnelheids constante in compartiment i [s ⁻¹]
	C _i	=	concentratie in compartiment i [mol.m ⁻³]

Voor elk van de n compartimenten wordt dus zo'n massabalans verkregen. Al deze massabalansen tezamen vormen bij de steady state, waarbij per definitie de concentratie in de tijd constant is, een stelsel van n lineaire vergelijkingen met n onbekenden (de concentraties in de compartimenten). Dit stelsel van lineaire vergelijkingen wordt opgelost volgens volledig spreadsheet georiënteerde rekenprocedures (level 3 berekening). Deze stationaire concentratie wordt pas bereikt na verloop van een insteltijd, die voor elk milieucompartiment verschillend is.

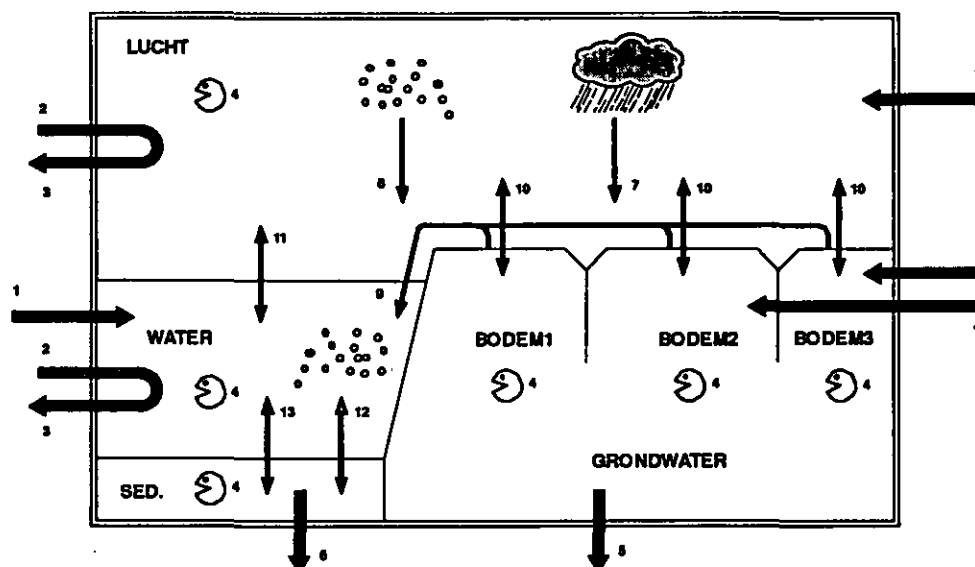
Typische emissiesituaties zijn die, waarbij een stof nu en dan, gedurende kortere of langere tijd, regelmatig of niet, wordt geproduceerd en tenslotte geëmitteerd. Bij dit gevoeligheids-onderzoek, waar emissie naar het water compartiment plaatsvindt, is gekozen voor de aanname dat de emissie zodanig over de tijd is 'uitgesmeerd' dat deze kan worden gezien als continu. Hierbij wordt een emissietijdsduur van 50 jaar gehanteerd.

Bij de concentratieschatting wordt rekening gehouden met de invloed van verdunning, verfluchtiging, sedimentatie/resuspensie en omzetting. De Simplebox berekening geeft tevens de stationaire stofstromen aan, welke inzicht geven over het te verwachten lot in het milieu. Ook geven de berekende fluxen aan in welke mate de stof in de nabijheid van de emissiebron in het milieu zal worden afgebroken, in welke mate de stof zich (met lucht, oppervlaktewater of grondwater) zal verspreiden buiten de onmiddellijke omgeving van de bron, en in welke mate de stof zich zal ophopen in sediment en bodem.

In de niet-stationaire toestand, waarin dus de concentraties wel in de tijd veranderen, verkrijgt men een minder eenvoudig op te lossen stelsel van differentiaalvergelijkingen. Oplossen hiervan levert voor elke compartiment een concentratie-tijd profiel op, en kan alleen worden uitgevoerd, naast de eerder genoemde spreadsheet toepassing, met behulp van een extern integratieprogramma (level 4 berekening).

Bij zeer persistente stoffen (halfwaardetijd enige jaren) zal het concentratie-tijd profiel zich langzaam tot zeer langzaam opbouwen.

In afbeelding 2.1 is schematisch weergegeven welke processen van invloed zijn op de geëmitteerde stof.



Afbeelding 2.1 : Compartimenten en processen in Simplebox.

Verklaring van de in afbeelding 2.1 aangegeven processen :

1 = Directe emissie.

2 = Import van buiten het systeem (of van een andere schaal binnen het systeem).

Van buiten de grenzen wordt verse lucht en vers oppervlaktewater aangevoerd, met eventueel daarin de te modelleren stof.

3 = Export naar buiten het systeem (of na een andere schaal binnen het systeem).

De juist geëmitteerde stof wordt hierdoor meegevoerd naar buiten, zonder dat hij daadwerkelijk verdwijnt uit het milieu.

4 = Afbraak.

Omzetting van de chemische stof in andere (schadelijke of niet-schadelijke) producten ten gevolge van biologische en/of niet-biologische processen in water, sediment, bodem en lucht. Dit is de enige echte vorm van verwijdering van de stof uit het milieu.

5 = Uitloggen uit de bovenste bodem laag naar het diepe grondwater.

Dit is ook een vorm van verwijdering, waarbij transport plaatsvindt over de grenzen van het gemodelleerde deel van het milieu.

6 = Begraving van oud sediment onder vers sedimentarend slib.

Eigenlijk is dit geen echte stofstroom, omdat immers het oude sediment op zijn plaats blijft. Voortdurende verversing van de toplaag van het sediment leidt er echter toe dat de bovenlaag van vroeger de onderlaag van de toekomst is. 'Begraven' is daarom op te vatten als een vorm van verwijdering van de chemische stof uit de bovenlaag van het sediment. De stof wordt 'getransporteerd' naar diepere sedimentlagen en verdwijnt hierdoor over de grens van het gemodelleerde milieu.

7 = Natte depositie met regen.

Door depositie van regendruppels wordt de chemische stof meegevoerd vanuit de lucht naar bodem en oppervlaktewater.

8 = Droge depositie met aerosol.

Door depositie van aerosol deeltjes wordt de chemische stof meegevoerd.

Aangenomen wordt dat er in de lucht voortdurend thermodynamisch evenwicht heerst tussen de gasfase en de aerosol- en regendruppel fase.

9 = Run-off. Afvloeien van het water wat zich bevindt aan het oppervlak van het bodem compartiment naar het water compartiment.

10 = Lucht-bodem uitwisseling door gasabsorptie en vervluchtiging.

11 = Lucht-water uitwisseling door gasabsorptie en vervluchtiging.

12 = Sedimentatie en resuspensie.

Transport van deeltjes over het sediment-water grensvlak door enerzijds sedimentatie en anderzijds resuspensie.

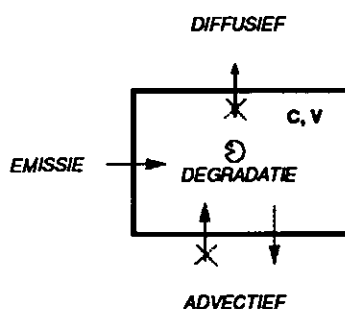
13 = Sediment-water uitwisseling door directe sorptie en desorptie.

Adsorptie vanuit de waterfase aan het sediment, en biosorptie door aquatische organismen. Hier wordt ook evenwicht aangenomen.

2.3 Belangrijke processen

2.3.1 Algemeen

Als intercompartimentale stofoverdrachtsprocessen bevat Simplebox advectieve en diffusieve processen. Advectieve processen zijn één-richtingsprocessen, waarbij er stoftransport optreedt in de richting waarin het meegevoerde medium zich verplaatst. Voorbeelden hiervan zijn atmosferische depositie, sedimentatie, resuspensie en uitlogen. Diffusieve processen zijn twee-richtingsprocessen, waarbij de stoftransport in de richting gaat waar de fugaciteit het laagst is. Een voorbeeld hiervan is vervluchtiging/gasabsorptie. De concentratie van een chemische stof in het milieu wordt tevens beïnvloed door chemische en/of biologische omzettingsprocessen (degradatie).



Afbeelding 2.2 : Transport- en omzettingsprocessen.

Bij de behandeling van de belangrijkste processen wordt, zoals in bovenstaande figuur al is aangegeven, de aanname gedaan dat de ingaande diffusieve en advectieve processen verwaarloosbaar zijn ten opzichte van de uitgaande processen. De (default) waarden die ingevuld zijn bij de schatting van de proces parameters zijn te vinden in appendix B.

2.3.2 Degradatie

De afbreekbaarheid van een chemische stof is, naast de toxiciteit, een van de belangrijkste factoren die het milieurisico bepalen. Men noemt een stof afbreekbaar wanneer ze in een gegeven medium door micro-organismen of door fysisch/chemische processen omgezet kan worden. Een stof wordt persistent genoemd als deze zeer moeilijk of in het geheel niet afbreekbaar is, een voorbeeld van een zeer persistente stof is hexachloorbenzeen.

De massabalans, met betrekking tot de degradatie, luidt voor de compartimenten lucht, water, sediment en bodem :

$$V_i * \frac{\delta C_i}{\delta t} = EMIS_i - V_i * DEGRD_i * C_i - \quad (4)$$

waarin : V_i = volume compartiment lucht, water, sediment of bodem [m^3]
 C_i = concentratie in compartiment lucht, water, sediment of bodem [$mol.m^{-3}$]
 t = tijd [dag]
 $EMIS_i$ = emissie naar compartiment lucht, water, sediment of bodem [$mol.dag^{-1}$]
 $DEGRD_i$ = degradatie snelheidsconstante in compartiment lucht, water, sediment of bodem [dag^{-1}]

Degradatie in lucht :

De degradatie constante in het lucht compartiment wordt in simplebox als volgt geschat :

$$DEGRD_{lucht} = k_{OH\cdot} * (1 - FRass_{aerosol}) \quad (5)$$

waarin : $DEGRD_{lucht}$ = degradatie snelheidsconstante in lucht [dag^{-1}].
 $k_{OH\cdot}$ = snelheidsconstante van de reactie met OH radicalen [dag^{-1}].
 $FRass_{aerosol}$ = gewichtsfractie chemische stof in de lucht die geadsorbeerd is aan aerosol deeltjes [-].

Het belangrijkste afbraakproces van organische stoffen in de lucht is de pseudo eerste orde reactie met OH radicalen.

$$k_{OH\cdot} = \frac{\ln 2}{160} \quad (6)$$

waarin : $k_{OH\cdot}$ = snelheidsconstante reactie met OH radicalen [dag^{-1}].
 160 = maximum halfwaarde tijd voor degradatie in lucht door OH van een chemische stof [1]

De fractie van een chemische stof in de lucht dat geadsorbeerd is aan de aerosol deeltjes wordt weergegeven door de vergelijking van Junge [5] :

$$FR_{aerosol} = \frac{(c\theta)}{dampdruk + (c\theta)} \quad (7)$$

waarin : $FR_{aerosol}$ = gewichtsfractie chemische stof in de lucht dat geadsorbeerd is aan aerosol deeltjes [-].

c = constante, afhankelijk van het molecuulgewicht, oppervlakteconcentratie en het verschil tussen desorptie- en verdampingswarmte. Uit [5] blijkt dat een waarde voor c van $2 \cdot 10^1$ Pa.cm een goede afschatting geeft.

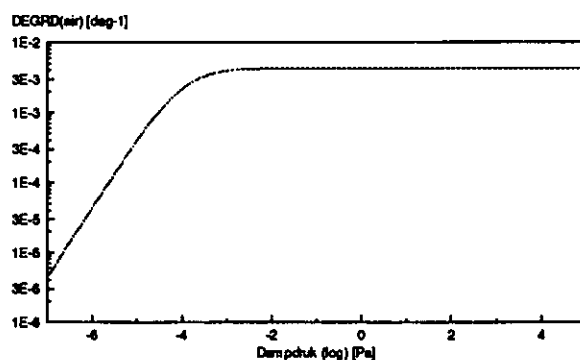
θ = aerosol oppervlak, dat vooral afhangt van meteorologische omstandigheden [5].

De waarde voor θ ligt in de orde van 10^{-5} à 10^{-6} cm².cm⁻³ lucht.

$c\theta$ = gekozen voor 10^{-4} Pa (zie ook [1]).

Formule (5) beschrijft alleen reversibele ofwel fysische adsorptie aan het aerosol oppervlak, hetgeen betekent dat sterke specifieke ofwel chemische adsorptie buiten beschouwing wordt gelaten. Veel van de organische stoffen in het milieu zijn weinig reactief waardoor deze benadering als inschatting een redelijke indruk geeft. In het geval dat de dampdruk kleiner is dan 10^{-6} Pa, zal de chemische stof onder nederlandse atmosferische condities vrijwel volledig gebonden zijn aan de aerosoldeeltjes. Voor een dampdruk groter dan 10^{-3} Pa zal de chemische stof als gas voorkomen, behalve wanneer dus specifieke adsorptie een belangrijke rol speelt.

Zoals blijkt uit formule (5) is de degradatie in het lucht compartiment afhankelijk van de dampdruk. Deze relatie is grafisch weergegeven in afbeelding 2.3



Afbeelding 2.3 : Degradatie in de lucht vs. dampdruk.

Bij toenemende dampdruk neemt de fractie stof dat geadsorbeerd zit aan de aerosol deeltjes af. Hierdoor vindt het afbraakproces bij toenemende dampdruk steeds sneller plaats. Bij een dampdruk groter dan 10^{-3} Pa is al het aanwezige stof als gas aanwezig in de lucht, waardoor de afbraaksnelheid maximaal is (zie formule 5).

Degradatie in water :

De degradatie in het water compartiment wordt als volgt geschat :

$$DEGRD_{water} = kdeg_{testwater} * FRdisslvd_{water} \quad (8)$$

waarin : $DEGRD_{water}$ = degradatie snelheids constante in water [dag^{-1}].
 $kdeg_{testwater}$ = snelheidsconstante degradatie van een testwater [dag^{-1}].
 $FRdisslvd_{water}$ = fractie chemische stof dat opgelost zit in het water [-].

Om deze indicatie te geven maakt men gebruik (via extrapolatie) van de resultaten van een standaard screenings test voor (bio)degradeerbaarheid van een testwater [1]. De snelheidsconstante van de eerste orde degradatie in het testwater luidt :

$$kdeg_{testwater} = \frac{\ln 2}{halflife_{testwater}} \quad (9)$$

waarin : $kdeg_{testwater}$ = snelheidsconstante degradatie van het testwater [dag^{-1}].
 $halflife_{testwater}$ = halfwaardetijd van het testwater [dag].

Tevens hangt de degradatie constante af van de fractie chemische stof die aanwezig is in de waterfase, welke als volgt wordt geschat :

$$FRdisslvd_{water} = \frac{1}{1 + Kp_{susp} * SUSP_{water}} \quad (10)$$

waarin : $FRdisslvd_{water}$ = fractie chemische stof dat opgelost is in het water [-].
 Kp_{susp} = gesuspendeerde deeltjes-water partiticoëfficiënt [$l_{water} \cdot kg^{-1}_{susp}$].
 $SUSP_{water}$ = concentratie gesuspendeerde chemische stof in het water [$kg \cdot m^{-3}$].

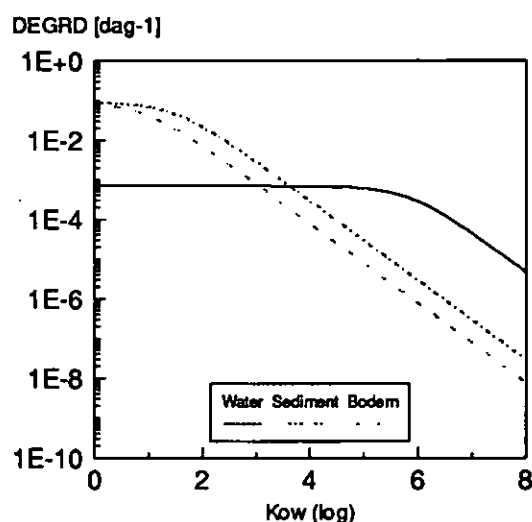
De gesuspendeerde deeltjes-water partiticoëfficiënt wordt als volgt geschat :

$$Kp_{susp} = Kow * Corg_{susp} \quad (11)$$

waarin : Kp_{susp} = gesuspendeerde deeltjes-water partiticoëfficiënt [$l_{water} \cdot kg^{-1}_{susp}$].
 Kow = octanol-water partiticoëfficiënt [-].
 $Corg_{susp}$ = organisch koolstofgehalte in de gesuspendeerde deeltjes [-].

In het Simplebox model wordt aangenomen dat degradatie alleen kan plaatsvinden in de waterfase. De degradatie constante voor het sediment en bodem compartiment worden dan ook op dezelfde wijze geschat als hierboven, alleen moet $FR_{disslvd_{water}}$ respectievelijk vervangen worden door $FR_{disslvd_{sediment}}$ en $FR_{disslvd_{bodem}}$.

Het blijkt dus dat de degradatie snelheidsconstante in zowel water, sediment(water) als in bodem(water) afhankelijk zijn van de K_{ow} . Dit verband is voor alle drie de snelheidsconstanten grafisch weergegeven in afbeelding 2.4



Afbeelding 2.4 : Degradatie in water, sediment en bodem vs. K_{ow}

De degradatie in water, sediment en bodem wordt bepaald door de fractie stof die opgelost zit in respectievelijk het water, het sediment en de bodem (zie formule 8). Deze fractie neemt bij het sediment en de bodem al zeer snel af bij toenemende K_{ow} , waardoor dus ook de degradatie in het sediment en de bodem afneemt. Aangezien de fractie die opgelost is in het water tot een K_{ow} van 10^5 maximaal blijft, neemt de afbraakconstante in water pas af na een K_{ow} van 10^5 .

2.3.3 Vervluchtiging

Vervluchtiging kan plaatsvinden vanuit het water- en bodem compartiment naar het lucht compartiment.

De massabalans, met betrekking tot de vervluchtiging, luidt voor het water compartiment:

$$V_i * \frac{\delta C_i}{\delta t} = EMIS_i - VOLAT_i * C_i - \quad (12)$$

waarin : V_i = volume compartiment water of bodem [m^3]
 C_i = concentratie in compartiment water of bodem [$mol.m^{-3}$]
 t = tijd [s]
 $EMIS_i$ = emissie naar compartiment water of bodem [$mol.s^{-1}$]
 $VOLAT_i$ = vervluchtigings coëfficiënt vanuit het compartiment water of bodem [$mol.s^{-1}$]

De waarde voor de vervluchtigingscoëfficiënt vanuit het water compartiment wordt als volgt geschat :

$$VOLAT_{water} = \frac{kaw_{lucht} * kaw_{water}}{kaw_{lucht} + \frac{kaw_{water}}{K_{lucht-water}}} * FRdisslvd_{water} \quad (13)$$

waarin : $VOLAT_{water}$ = vervluchtigingscoëfficiënt vanuit het water compartiment [$m_{water}.s^{-1}$].
 kaw_{lucht} = partiële massa transport coëfficiënt van lucht [$m.s^{-1}$].
 kaw_{water} = partiële massa transport coëfficiënt van water [$m.s^{-1}$].
 $K_{lucht-water}$ = lucht-water verdelingscoëfficiënt [-].
 $FRdisslvd_{water}$ = fractie chemische stof dat opgelost zit in het water [-].

De vervluchtiging van een chemische stof uit de waterfase wordt beschreven volgens het filmmodel van Liss & Slater [3,7] waarin :

- de luchtfase in contact is met de waterfase.
- beide fasen volledig gemengd , waardoor eventuele concentratie verschillen binnen één fase afwezig zijn.
- het lucht-water scheidingsvlak aan weerszijden begrensd wordt door een stagnante grenslaag die uit een lucht- en een waterfilm bestaat.
- diffusief transport in deze grenslaag optreedt t.g.v. een gradiënt die veroorzaakt wordt door een concentratieverschil tussen de lucht- en waterfase.

Als maat voor de lucht-water verdelingscoëfficiënt wordt veelal de Henry constante H [$\text{Pa} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$] gebruikt.

$$H = \frac{\text{dampdruk}}{\text{oplosbaarheid}} = \frac{[\text{Pa}]}{[\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}]} \quad (14)$$

Hierbij wordt wel de aanname gedaan dat het een niet ionogene zuivere organische stof betreft. Indien men de vervluchtiging uit de waterfase indeelt naar de waarde van de Henry coëfficiënt [$\text{Pa} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$], verkrijgt men grof gezien de volgende indeling :

- $H < 0.001$: De chemische stof verdampt langzamer dan het water.
---> vervluchtiging treedt niet op
- $0.001 < H < 0.1$: De chemische stof verdampt langzaam, de weerstand van de lucht-fase is groter dan die van de waterfase.
---> vervluchtiging treedt op, hetzij weinig
- $0.1 < H < 1$: de weerstanden in beide fasen beïnvloeden de verdampingssnelheid.
---> vervluchtiging is een belangrijk transportproces
- $H > 1$: de weerstand van de waterfase is groter dan die van de luchtfase.
---> de chemische stof is vluchtig tot zeer vluchtig

De oplosbaarheid van een stof in water wordt als volgt geschat :

$$\text{Oplosbaarheid} = 10^{(-1,214 \cdot \log(kow) + 0,85)} \quad (15)$$

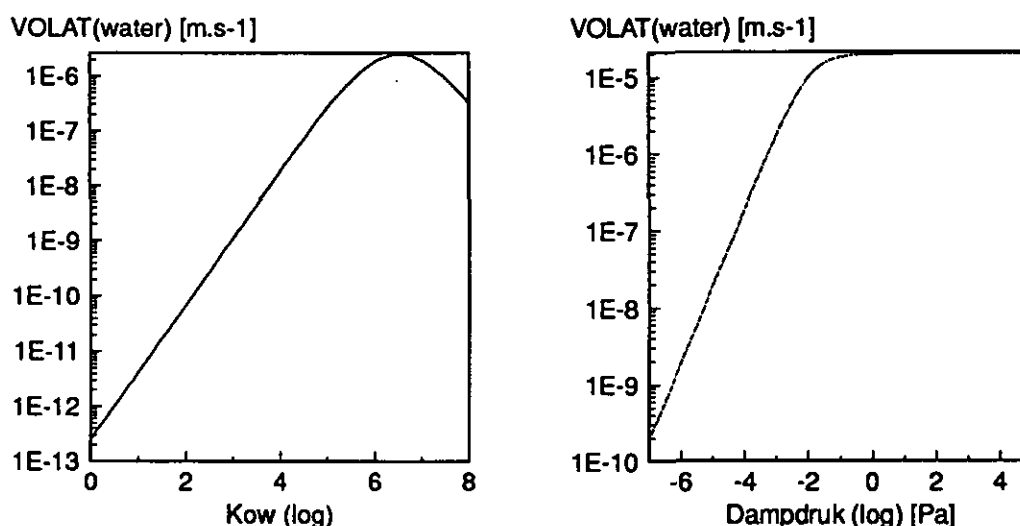
De lucht-water verdelingsconstante, ook bekend als de dimensieloze Henry-constante luidt:

$$K_{\text{lucht-water}} = \frac{H}{R \cdot T} \quad (16)$$

- waarin : $K_{\text{lucht-water}}$ = lucht-water verdelingsconstante [-].
- H = Henry constante [$\text{Pa} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$].
- R = gasconstante [$\text{Pa} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$].
- T = temperatuur [K].

De vervluchtiging uit het water compartiment is zowel van de dampdruk als van de K_{ow} afhankelijk. Dit verband is grafisch weergegeven in afbeelding 2.5

Het is vrij gebruikelijk om hierbij het verband weer te geven tussen de vervluchtiging en de dimensieloze Henry-constante. Maar omdat het gemakkelijker is bij de interpretatie van de verkregen gevoeligheidsoppervlakken, is er voor gekozen om de vluchtigheid tegen zowel de K_{ow} als tegen de dampdruk uit te zetten.



Afbeelding 2.5 : Verband tussen de vervluchtiging en de K_{ow} en dampdruk.

In de linker grafiek is te zien dat bij $K_{ow} = 10^6$ de vervluchtiging bij een optimum beland is. Dit wordt veroorzaakt doordat de fractie stof die opgelost zit in het water, na een waarde van $K_{ow} = 10^6$ gaat afnemen, waardoor de vervluchtiging gaat afnemen (zie ook formule 13).

In de rechter grafiek is te zien dat in het geval de dampdruk $> \sim 10^{-1}$ Pa de vervluchtiging maximaal wordt. Bij een kleine dampdruk is de waarde van $K_{\text{licht-water}}$ klein, waardoor de vervluchtiging bepaald wordt door het produkt $kaw_{\text{licht}} * K_{\text{licht-water}}$ (zie formule 13). En aangezien dat bij toenemende dampdruk de $K_{\text{licht-water}}$ toeneemt, neemt ook de vervluchtiging evenredig toe. Bij een dampdruk $> \sim 10^{-1}$ Pa wordt de $K_{\text{licht-water}}$ groot, waardoor de vervluchtiging bepaald wordt door de kaw_{water} . Dit heeft als gevolg dat de vervluchtiging na een waarde van $\sim 10^{-1}$ Pa maximaal wordt.

2.3.4 Atmosferische depositie

Emissie, gevolgd door atmosferisch transport en depositie, vormt een van de wegen waarlangs mens en milieu worden blootgesteld aan verontreinigende stoffen. Indien een bepaalde chemische stof in de atmosfeer terecht komt, leidt dit veelal tot verdere verspreiding over het gebied. Afhankelijk van de omstandigheden kunnen deze stoffen dan tot op grote afstand van de bron aanleiding geven tot nadelige gevolgen voor mens en milieu. De voor dit transport relevante processen, zoals chemische omzetting, fysische verwijdering en het transport zelf, spelen voornamelijk af in de onderste 2 à 3 kilometer van de atmosfeer. Dit deel van de atmosfeer wordt doorgaans de grenslaag of menglaag genoemd. Stoffen die in de atmosfeer geloosd zijn, worden na een kortere of langere tijd daaruit weer verwijderd. Hierbij kunnen we de volgende verwijderingsmechanismen onderscheiden :

- (i) droge depositie : het neerslaan van chemische stoffen.
- (ii) natte depositie : opname van chemische stoffen in wolken c.q. regenwater, gevolg door transport naar het aardoppervlak via neerslag.

De snelheid waarmee een chemische stof verwijderd wordt uit de atmosfeer is per stof verschillend, afhankelijk van chemische en fysische eigenschappen. De aggregatietoestand is hierbij de belangrijkste factor omdat de depositiesnelheid van gasvormige verontreiniging vaak sterk afwijkt van die van deeltjesvormige als stof en aerosolen.

De massabalans, met betrekking tot de atmosferische depositie, luidt voor het lucht compartiment :

$$V_{lucht} * \frac{\delta C_{lucht}}{\delta t} = EMIS_{lucht} - DEP * C_{lucht} - \quad (17)$$

- waarin :
- V_{lucht} = volume compartiment lucht [m^3]
 - C_{lucht} = concentratie in compartiment lucht [$mol m^{-3}$]
 - t = tijd [s]
 - $EMIS_{lucht}$ = emissie naar compartiment lucht [$mol s^{-1}$]
 - DEP = atmosferische depositie vanuit de lucht naar het water [$mol s^{-1}$]

In Simplebox wordt de atmosferische depositie berekend als de som van de diffusieve transportcoëfficiënt voor gasabsorptie door het water en de advectieve droge- en natte depositie :

$$DEP_{water} = GASABS_{water} + DRYDEP_{aerosol} + WASHOUT \quad (18)$$

waarin : DEP_{water} = atmosferische depositie [$m.s^{-1}$].
 $GASABS_{water}$ = diffusieve transportcoëfficiënt voor gasabsorptie vanuit de lucht naar het water [$m.s^{-1}$].
 $DRYDEP_{aerosol}$ = advectieve massa transport coëfficiënt voor droge depositie [$m.s^{-1}$].
 $WASHOUT$ = advectieve massa transport coëfficiënt voor natte depositie [$m.s^{-1}$].

De diffusieve transportcoëfficiënt voor gasabsorptie wordt geschat met de volgende formule :

$$GASABS_{water} = \frac{kaw_{lucht} * kaw_{water}}{kaw_{lucht} * K_{lucht-water} + kaw_{water}} * (1 - FRass_{aerosol}) \quad (19)$$

waarin : $GASABS_{water}$ = massa transportcoëfficiënt voor gasabsorptie vanuit de lucht naar het water compartiment [$m_{water}.s^{-1}$].
 kaw_{lucht} = partiële massa transport coëfficiënt van lucht [$m.s^{-1}$].
 kaw_{water} = partiële massa transport coëfficiënt van water [$m.s^{-1}$].
 $K_{lucht-water}$ = lucht-water verdelingsconstante [-].
 $FRass_{aerosol}$ = gewichtsfractie chemische stof in de lucht die gebonden zit aan de aerosol deeltjes [-].

De advectieve transportcoëfficiënt voor droge depositie wordt weergegeven door :

$$DRYDEP_{aerosol} = FRass_{aerosol} * DEPrate_{aerosol} \quad (20)$$

waarin : $DRYDEP_{aerosol}$ = advectieve massa transport coëfficiënt voor droge depositie [$m.s^{-1}$].
 $FRass_{aerosol}$ = gewichtsfractie chemische stof in de lucht dat gebonden is aan de aerosol deeltjes [-].
 $DEPrate_{aerosol}$ = depositiesnelheid van een aerosol deeltje, waaraan de chemische stof is geassocieerd [$0.001 m.s^{-1}$].

Tenslotte wordt de advectieve transportcoëfficiënt voor de natte depositie weergegeven door de onderstaande formule :

$$WASHOUT = RAIN_{rate} * SCAV_{ratio} \quad (21)$$

waarin : $WASHOUT$ = advectieve massa transport coëfficiënt voor natte atmosferische depositie [$m_{wet} \cdot s^{-1}$].
 $RAIN_{rate}$ = neerslaghoeveelheid [$m_{regen} \cdot s^{-1}$].
 $SCAV_{ratio}$ = scavenging verhouding [-].

Voor de bepaling van de waarde van de natte depositie is het noodzakelijk om de verhouding tussen de concentratie van de stof in het regenwater en de concentratie van deze stof in de lucht te weten. Deze verhouding wordt weergegeven door de scavenging (wegvang) ratio :

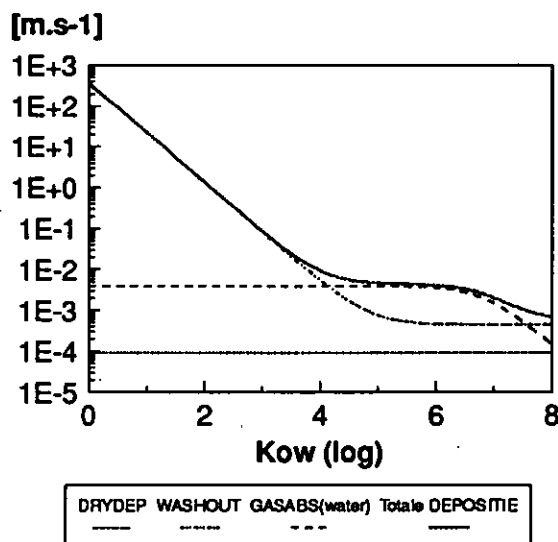
$$SCAV_{ratio} = \frac{(1 - FR_{ass_{aerosol}})}{K_{lucht-water}} + (FR_{ass_{aerosol}}) * 2 \cdot 10^5 \quad (22)$$

waarin : $SCAV_{ratio}$ = scavenging (wegvang) verhouding [-].
 $FR_{ass_{aerosol}}$ = gewichtsfractie chemische stof in de lucht dat gebonden is aan de aerosol deeltjes [-].
 $K_{lucht-water}$ = lucht-water verdelingsconstante [-].
 $2 \cdot 10^5$ = evenredigheidsconstante tussen het volume regenwater en volume atmosfeer [3].

De eerste term in formule (22) geeft een schatting weer van de verdeling tussen de gasfase van lucht en het regenwater. De tweede term geeft de scavenging (wegvangen) weer van een aerosol deeltje door een regendruppel.

Deze drie bovenstaande depositie processen gelden vanzelfsprekend ook voor het bodem compartiment, waarin alleen de diffusieve transportcoëfficiënt vervangen moet worden door $GASABS_{bodem}$.

De totale atmosferische depositie wordt weergegeven als de som van de atmosferische depositie naar het water compartiment. Deze totale atmosferische depositie wordt in afbeelding 2.6a en 2.6b grafisch weergegeven als functie van respectievelijk de K_{ow} en de dampdruk.



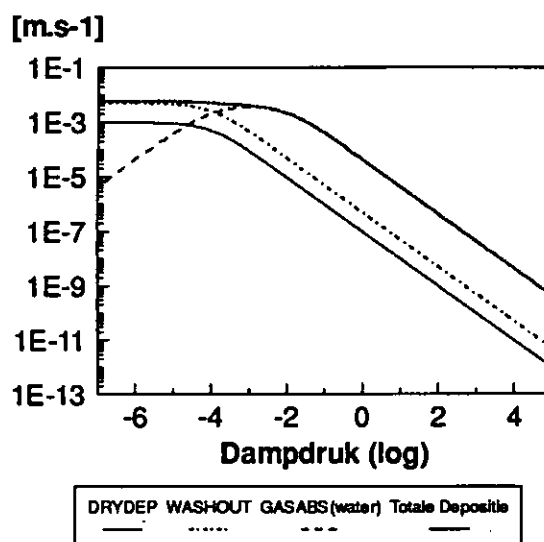
Afbeelding 2.6a : Verband tussen de depositie en de K_{ow}

De droge depositie ($DRYDEP_{aerosol}$) is onafhankelijk van de K_{ow} (zie formule 20), wat dan ook een rechte lijn opleverd.

De natte depositie ($WASHOUT$) is gerelateerd aan de K_{ow} via $1/K_{lucht-water}$ (zie formule 21). Deze neemt af tot dat de evenredigheidsconstante groter wordt dan de waarde $1/K_{lucht-water}$, wat tot gevolg heeft dat de natte depositie constant wordt bij een $K_{ow} > \sim 10^5$.

De gasabsorptie ($GASABS_{water}$) is ook afhankelijk van de K_{ow} via de $K_{lucht-water}$ (zie formule 19). Deze $K_{lucht-water}$ wordt echter pas van invloed als deze groter wordt dan kaw_{lucht} , wat pas het geval is bij een $K_{ow} > 10^6$.

De totale depositie wordt tot een K_{ow} van 10^4 volledig bepaald door de natte depositie. Bij een waarde van de $K_{ow} > 10^4$ wordt de totale atmosferische depositie bepaald door de gasabsorptie vanuit het lucht compartiment naar het water compartiment.



Afbeelding 2.6b : Verband tussen de depositie en de dampdruk.

De droge depositie ($DRYDEP_{aerosol}$) is gerelateerd aan de dampdruk via de gewichtsfractie ($FRass_{aerosol}$) chemische stof in de lucht die gebonden is aan de aërosol deeltjes (zie formule 20). Deze fractie neemt bij toenemende dampdruk af (na een dampdruk van 10^{-3} Pa), waardoor dus de droge depositie ook afneemt.

De natte depositie ($WASHOUT$) is afhankelijk van de dampdruk via de $K_{lucht-water}$ en de fractie stof die gebonden is aan de aërosol deeltjes $FRass_{aerosol}$ (zie formule 21). Deze fractie stof die gebonden is aan de aërosol deeltjes is tot een dampdruk van ongeveer 10^{-3} gelijk aan 1, waardoor dus ook de natte depositie tot deze waarde gelijk blijft, en na deze waarde gaat afnemen.

De gasabsorptie ($GASABS_{water}$) is juist afhankelijk van de fractie die niet gebonden zit aan de aërosol deeltjes. Deze fractie neemt juist toe bij toenemende dampdruk. Bij een dampdruk groter dan $\sim 10^{-2}$ Pa wordt de invloed van $1/K_{lucht-water}$ merkbaar bij de gasabsorptie (formule 19). Hierdoor neemt de gasabsorptie na een dampdruk van $\sim 10^{-2}$ Pa af.

De totale depositie wordt tot een dampdruk van $\sim 10^{-3}$ Pa bepaald door de droge en natte depositie. Na deze waarde wordt zij echter bepaald door de gasabsorptie vanuit de lucht naar het water compartiment.

2.3.5 Sedimentatie

De massabalans, met betrekking tot de sedimentatie, luidt voor het water compartiment :

$$V_{\text{water}} * \frac{\delta C_{\text{water}}}{\delta t} = EMIS_{\text{water}} - SEDIMENTATION * C_{\text{water}} - \quad (23)$$

waarin : V_{water} = volume compartiment water [m^3]
 C_{water} = concentratie in compartiment water [mol.m^{-3}]
 t = tijd [s]
 $EMIS_{\text{water}}$ = emissie naar compartiment water [mol.s^{-1}]
 $SEDIMENTATION$ = totale sedimentatie vanuit het water compartiment [mol.s^{-1}]

De totale sedimentatie is de som van de advectieve transportcoëfficiënt voor de sedimentatie en de diffusieve transportcoëfficiënt voor adsorptie vanuit het water naar het sediment.

$$SEDIMENTATION = SED + ADSORB_{\text{sed}} \quad (24)$$

waarin : $SEDIMENTATION$ = totale netto sedimentatie [m.s^{-1}].
 SED = advectieve transportcoëfficiënt voor sedimentatie [m.s^{-1}].
 $ADSORB_{\text{sed}}$ = diffusieve transportcoëfficiënt voor de adsorptie vanuit het water naar het sediment [m.s^{-1}].

De advectieve transportcoëfficiënt voor de sedimentatie wordt in Simplebox op de volgende manier geschat :

$$SED = SED_{\text{rate}} * [FR_{\text{water-sed}} + (1 - FR_{\text{water-sed}}) * Kp_{\text{sed}} * RHO_{\text{solid}}] \quad (25)$$

waarin : SED = transportcoëfficiënt voor sedimentatie [m.s^{-1}].
 SED_{rate} = sedimentatie snelheid [m.sed^{-1}].
 $FR_{\text{water-sed}}$ = volume fractie water in het sediment [-].
 Kp_{sed} = sediment-water partiticoëfficiënt ($Kp_{\text{sed}} = Kow * CORG_{\text{sed}}$) [$\text{l}_{\text{water}}.\text{kg}_{\text{sed}}^{-1}$].
 RHO_{solid} = dichtheid van de vaste deeltjes in het sediment [$\text{kg}_{\text{sed}}.\text{m}^{-3}$].

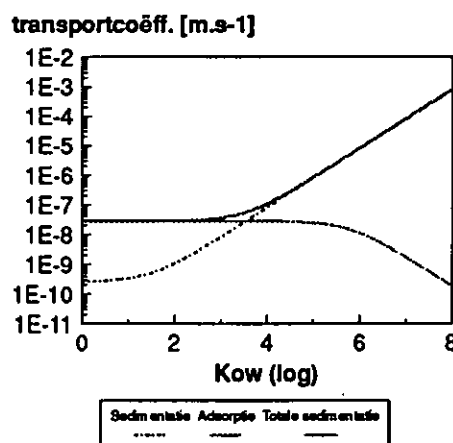
De diffusieve transportcoëfficiënt voor de adsorptie vanuit het water naar het sediment wordt in Simplebox als volgt geschat :

$$ADSORB_{sed} = \frac{kws_{water} * kws_{sed}}{kws_{water} + kws_{sed}} * FRdisslvd_{water} \quad (26)$$

waarin : $ADSORB_{sed}$ = massa transport coëfficiënt voor adsorptie naar de sediment-water interface [$m.s^{-1}$].
 kws_{water} = partiële massa transport coëfficiënt van water bij de sediment-water interface [$m_{water}.s^{-1}$].
 kws_{sed} = partiële massa transport coëfficiënt van porie-water bij sediment-water interface [$m_{porie-water}.s^{-1}$].
 $FRdisslvd_{water}$ = fractie chemische stof dat opgelost zit in het water [-].

Uit het bovenstaande blijkt dat de totale sedimentatie zowel afhankelijk is van de fractie stof dat opgelost zit in het water als van de sedimentatiesnelheid. De rest van de termen zijn te zien als omrekeningsfactoren.

Deze totale sedimentatie hangt af van de K_{ow} . Dit verband is grafisch weergegeven in afbeelding 2.7



Afbeelding 2.7 : Verband tussen de totale sedimentatie en de K_{ow} .

Uit afbeelding 2.7 blijkt dat de sedimentatie constant is tot een $K_{ow} = 10^3$, en alleen wordt bepaald door de adsorptie (zie formule 24). Deze adsorptie wordt bepaald door de fractie stof die opgelost zit in het water. Indien de K_{ow} verder toeneemt gaat de totale sedimentatie toenemen, en wordt alleen nog maar bepaald door de diffusieve transportcoëfficiënt sedimentatie.

2.3.6 Accumulatie

Accumulatie is per definitie het ophopen van een bepaalde (schadelijke) stof in het milieu of een organisme. De term accumulatie geef dus het proces weer waarbij de aanvoer per tijdseenheid groter is dan de afvoer per zelfde tijdseenheid (dus toename van de concentratie in de tijd).

In Simplebox zijn de volgende twee processen opgenomen als accumulatie :

- uitlogen vanuit de bodem naar dieper grondwater (leaching).
- begraving naar dieper gelegen sediment (burial).

De halfwaardetijden die gelden in grondwater en diep sediment zijn zeer groot. Om deze reden ziet het model deze twee processen als verwijderings processen. Deze aanname is echter niet geheel in overeenstemming met de werkelijkheid, wat dus in principe een tekortkoming van het model is.

De massabalans, met betrekking tot het uitlogen, luidt voor het bodem compartiment :

$$V_{bodem} * \frac{\delta C_{bodem}}{\delta t} = EMIS_{bodem} - LEACH_{bodem} * C_{bodem} - \dots \quad (27)$$

waarin : V_{bodem}	= volume compartiment bodem [m^3]
C_{bodem}	= concentratie in compartiment bodem [$mol.m^{-3}$]
t	= tijd [s]
$EMIS_{bodem}$	= emissie naar compartiment bodem [$mol.s^{-1}$]
$LEACH_{bodem}$	= uitloging vanuit de bodem naar diep grondwater [$mol.s^{-1}$]

De transportcoëfficiënt voor het uitlogen vanuit de bodem naar het diepere grondwater wordt in Simplebox als volgt geschat :

$$LEACH_{bodem} = \frac{RAIN_{rate} * FRACinf_{bodem}}{FR_{water-bodem} + (1 - FR_{lucht-bodem} - FR_{water-bodem}) * Kp_{bodem} * RHO_{solid}} \quad (28)$$

waarin : $LEACH_{bodem}$	= massa transport coëfficiënt voor uitlogen vanuit de bodem [$m_{bodem}.s^{-1}$].
$RAIN_{rate}$	= neerslaghoeveelheid [$m_{regen}.s^{-1}$].
$FRACinf_{bodem}$	= fractie regenwater dat infiltreert in de bodem.
$FR_{water-bodem}$	= volume fractie water in het bodem compartiment.
$FR_{lucht-bodem}$	= volume fractie lucht in het bodem compartiment.
Kp_{bodem}	= bodem-water partiëlecoëfficiënt [$l_{water}.kg_{bodem}^{-1}$].
RHO_{solid}	= dichtheid van de vaste deeltjes in het sediment [$kg_{sed}.m^{-3}$].

De bodem-water partiticoëfficiënt wordt als volgt geschat :

$$Kp_{bodem} = Kow * Corg_{bodem} \quad (29)$$

waarin : Kp_{bodem} = bodem-water partiticoëfficiënt [$l_{water} \cdot kg^{-1}_{bodem}$].
 Kow = octanol-water partiticoëfficiënt [-].
 $Corg_{bodem}$ = organisch koolstofgehalte in de bodem [-].

De massabalans, met betrekking tot de begraving naar diep sediment, luidt voor het sediment compartiment :

$$V_{sed} * \frac{\delta C_{sed}}{\delta t} = - BURIAL_{sed} * C_{sed} - \quad (30)$$

waarin : V_{sed} = volume compartiment sediment [m^3]
 C_{sed} = concentratie in compartiment sediment [$mol \cdot m^{-3}$]
 t = tijd [s]
 $BURIAL_{sed}$ = begraving naar het diep sediment [$mol \cdot s^{-1}$]

De begraving naar het diepere sediment is te zien als de sedimentatie snelheid minus de resuspensie snelheid. Dit is dus de netto sedimentatie, welke is geschat op 0.15 mm per jaar .

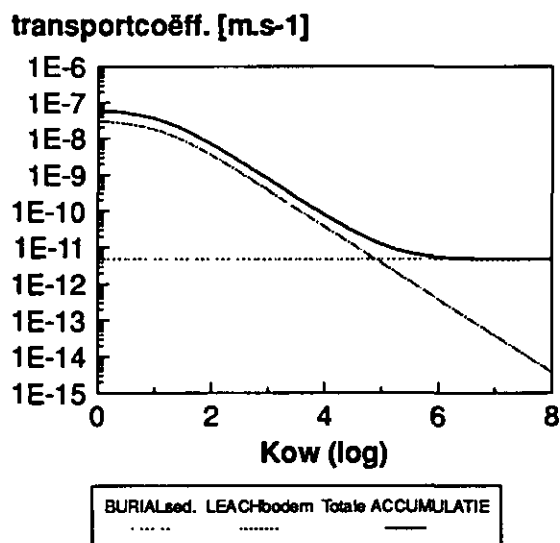
$$BURIAL_{sed} = SED_{rate} - RESUSP_{rate} = 0.15 \quad (31)$$

waarin : $BURIAL_{sed}$ = massa transport coëfficiënt voor begraving naar dieper sediment [$m_{sed} \cdot s^{-1}$].
 SED_{rate} = sedimentatie snelheid vanuit het water naar het sediment [$m_{sed} \cdot s^{-1}$].
 $RESUSP_{rate}$ = resuspensie snelheid vanuit het sediment naar het water [$m_{sed} \cdot s^{-1}$].
 0.15 = netto sedimentatie [$mm \cdot jaar^{-1}$].

De totale accumulatie wordt dan :

$$ACCUMULATIE = LEACH_{bodem} + BURIAL_{sed} \quad (32)$$

Deze formule voor de totale accumulatie is hangt dus af van de K_{ow} , wat grafisch weer-gegeven is in afbeelding 2.8

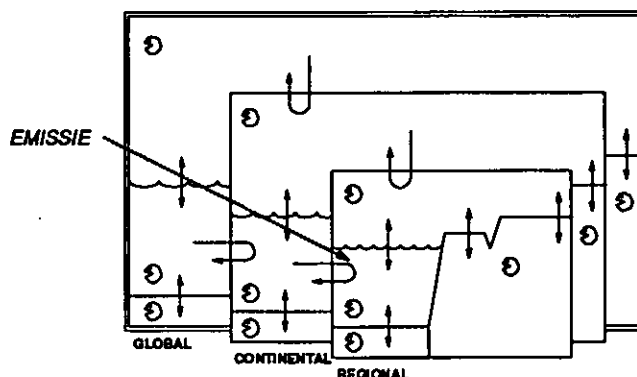


Afbeelding 2.8 : Verband tussen de accumulatie en de K_{ow} .

De uitloging naar het diepe grondwater is via de $K_{p_{bodem}}$ geheel evenredig met de K_{ow} (zie formule 29). De begraving is echter onafhankelijk van de K_{ow} (formule 31). In afbeelding 2.8 kan men dan ook zien dat zolang het proces van uitloging belangrijker is dan het proces van begraving, de accumulatie tot een K_{ow} van 10^5 bijna evenredig is met de uitloging vanuit de bodem naar het grondwater. Bij een grotere K_{ow} wordt de accumulatie echter volledig bepaald door de begraving naar het diepere gelegen sediment.

2.4 Uitbreiding Simplebox tot het multi-schalen model 3scalbox

Dit persistentie gevoeligheidsonderzoek is niet uitgevoerd met het hierboven beschreven Simplebox, maar echter met de drie schalen variant 3scalbox van Simplebox.



Afbeelding 2.9 : Schema van het 3 schalen model 3scalbox

Het 3scalbox model is in principe te zien als drie in elkaar gebouwde Simpleboxen (zie afbeelding 2.9). Hierdoor verkrijgt men een box die bestaat uit drie schalen: de binnen (regionale), de midden (continentale) en de buiten (globale) schaal. De binnen en midden schaal worden gezien als open systemen waardoor transport van de ene schaal naar de andere schaal kan plaatsvinden via de lucht en water fase. Echter de buiten schaal wordt als een gesloten systeem beschouwd. Om dit te bereiken is de verblijftijd τ_{buiten} op 'oneindig' gesteld en de import_{buiten} op nul gesteld..

In een aantal opzichten wijkt de rekenprocedure in 3scalbox echter af met de gehanteerde rekenprocedure in Simplebox. In Simplebox zijn er aparte compartimenten gedefinieerd voor gesuspendeerde deeltjes en biota. In 3scalbox zijn er echter geen aparte compartimenten hiervoor gedefinieerd omdat er van uit wordt gegaan dat de gesuspendeerde deeltjes en de biota in evenwicht zijn met de water fase. Het gevolg hiervan is dat er in 3scalbox met een bulkconcentratie voor het water compartiment wordt gerekend.

De persistentie in dit gevoeligheid onderzoek is gedefinieerd als weergegeven in formule (1).

3 Methodiek

3.1 Algemeen

Het doel van dit onderzoek was om te bekijken hoe gevoelig de persistentie van een stof in het milieu is voor waarden van de K_{ow} , de dampdruk en de pseudo eerste orde afbraakconstante. Deze persistentie is te beschouwen als een functie van de omzettingssnelheid (halfwaardetijd) van een stof in de verschillende milieu-compartimenten en de transportsnelheden van deze stof tussen de verschillende compartimenten. Als variabelen in dit gevoeligheidsonderzoek worden de octanol-water partitiecoëfficiënt (K_{ow}), de dampdruk en de totale pseudo eerste orde afbraakconstante in water genomen. Voor een 13-tal halfwaardetijden werd de persistentie tegen de K_{ow} en dampdruk uitgezet. Het hierdoor verkregen oppervlak noemen we het gevoeligheidsoppervlak.

3.2 Programma opbouw 3scalbox

Zoals eerder is vermeld, is dit gevoeligheidsonderzoek uitgevoerd met een 3 schalen variant van Simplebox. Het prototype van de 3 schalen versie van Simplebox was aanwezig bij het RIVM als de Lotus-123 file 3scale02.wk1 (23-06-93). Deze file is om praktische redenen geconverteerd naar het spreadsheet programma Microsoft® Excel 4.0, en heeft hierna de naam 3scalbox.xls gekregen. Een van de verschillen tussen de uiteindelijke laatste versie van 3scalbox.xls (01-03-94) en 3scale02.wk1 is dat er enkele foutjes opgespoord en verbeterd zijn en dat de weergave van de parameters verduidelijkt is. Echter het grootste verschil is dat er in 3scalbox voor gezorgd is dat het mogelijk is om level 4 berekeningen geautomatiseerd te laten uitvoeren. Deze level 4 berekeningen onderscheiden zich van de (steady state) level 3 berekeningen doordat ze naast spreadsheet georiënteerde berekeningen een extern integratieprogramma nodig hebben om de verkregen differentiaal vergelijkingen op te lossen. Het integratieprogramma wat door 3scalbox hiervoor wordt gebruikt is FAME, dat ontwikkeld is bij het RIVM [13].

Een (vervelende) bijkomstigheid van het gebruik van een integratieprogramma is dat de rekentijd (enorm) toeneemt. De benodigde rekentijd, met een 80486DX2 66MHz computer, varieerde in dit onderzoek van 3 minuten tot een meer dan een dag.

En aangezien dat voor elk gevoeligheidsoppervlak deze level 4 berekening eigenlijk 600 maal diende te worden uitgevoerd, is besloten om het rekengedeelte van 3scalbox te 'automatiseren'. In dit kader is een automatiserings routine geschreven in Microsoft® Excel, waardoor 3scalbox de mogelijkheid krijgt om een groot aantal berekeningen nonstop uit te voeren. Deze automatiserings routine is opgebouwd uit een invoertabel (voor de parameters waarmee de berekeningen uitgevoerd dienen te worden), een uitvoertabel (voor de gevraagde resultaten van de berekeningen) en een lotus-123 macro (de programmatuur voor het uitvoeren van de routine). Deze lotus-123 macro, welke opgenomen is als appendix A, is te starten met de toetsencombinatie CTRL-A.

3.3 Modelberekeningen

3scalbox is een model dat ontworpen is voor het uitvoeren van milieuchemische boxmodel berekeningen aan iedere willekeurige stof. De stoffeigenschappen van de desbetreffende stof kunnen in het invoergedeelte van de spreadsheet file 3scalbox ingevuld worden. In dit invoergedeelte van 3scalbox, dat opgenomen is als appendix B, is het mogelijk om gegevens op te geven over specifieke stoffeigenschappen, milieu eigenschappen, emissie gegevens en transformatie/transport gegevens. Deze invoergegevens zijn alle voorzien met een (D) of een (A). De (D) staat voor definitie parameters. Deze definitie parameters bepalen te samen de massabalans vergelijkingen voor de verschillende compartimenten. De modelberekeningen kunnen niet zonder een waarde voor deze definitie parameters uitgevoerd worden. De (A) staat voor hulp variabele welke alleen maar gebruikt worden om de definitie parameters te schatten. Tevens zijn verticaal de kolommen user, form en used te vinden. De kolom user kan door de modelleur ingevuld worden met invoerparameters. De kolom form bevat de waarde die 3scalbox schat op grond van (eerder) ingevoerde gegevens. De used kolom bevat de uiteindelijke waarden (in de juiste eenheid). In principe zijn dit de schattingswaarden of er moet een waarde in de user kolom door de gebruiker zijn ingevuld, waarmee 3scalbox de modelberekeningen gaat uitvoeren.

Aangezien dit gevoeligheidsonderzoek is uitgevoerd met behulp van de hypothetische stof 'hypothetical', zijn in de meeste gevallen de waarden geaccepteerd die geschat werden door 3scalebox (zie appendix B).

Om de invloed op de door 3scalbox berekende persistentie van een stof te bepalen werden de partitie eigenschappen K_{ow} en dampdruk en de totale pseudo eerste orde afbraakconstante met de volgende range gevarieerd:

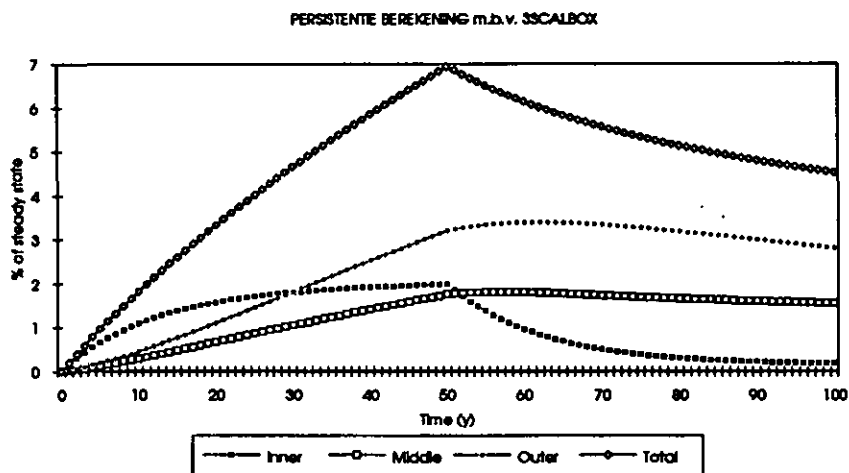
- K_{ow} : range $10^3 - 10^{7.7}$ (in 15 stappen)
- Dampdruk [Pa] : range $10^{-7} - 10^5$ Pa (in 25 stappen)
- Halflife_{testwater} : range $10^{-1} - 10^5$ dagen (in 13 stappen)

De totale pseudo eerste orde afbraakconstante voor het water compartiment is via formule (9) direkt te beïnvloeden door de halflife_{testwater}.

Het uitgangspunt was om de K_{ow} vanaf 10^0 en de halflife_{testwater} vanaf 10^{-2} dag mee te nemen in dit gevoeligheidsonderzoek, maar deze betreffende berekeningen veroorzaakten te veel 'stijfheid' bij de gebruikte externe integrator. De FAME integrator bleek dus voor deze berekeningen niet echt geschikt. Gezien het feit dat er geen geschikte andere integratieroutine voor handen was is maar besloten om de range van de K_{ow} en de halflife_{testwater} aan te passen.

Nadat de juiste getallen in het automatisering invoergedeelte ingevuld zijn, wordt de berekening gestart CTRL-A. Hierbij wordt de lotus-123 macro (zie appendix A) uitgevoerd, waarbij het spreadsheet allereerst doorgerekend wordt door de rekenroutines van Excel. Dit resulteert in een steady state resultaten tabel (zie appendix C), waarin de belangrijkste invoergegevens en gegevens over de stofstromen staan. Hierna wordt vanuit het spreadsheet de externe integrator FAME opgestart. Deze integrator geeft als resultaat een tabel waarin over een tijdsduur van 100 jaar, met stappen van een jaar het percentage stof wat op de desbetreffende tijd aanwezig is. Deze waarden worden vervolgens ingelezen in een tabel binnen het spreadsheet, waarna een concentratie-tijds profiel wordt verkregen zoals weergegeven in afbeelding 3.1.

Uit deze verkregen tabel wordt de persistentie bepaald op de tijdstippen 5, 10, 25 en 50 jaar na beëindigen van de emissie. Nadat deze waarden ingevuld zijn in het automatiserings uitvoergedeelte wordt zowel de verkregen steady state resultaten tabel, alsmede de concentratie-tijd tabel opgeslagen als ASCII-file (respectievelijk RES#ixxx.PRN en INT#ixxx.PRN).



Afbeelding 3.1 : Concentratie-tijds profiel verkregen door externe integratie in 3scalbox.

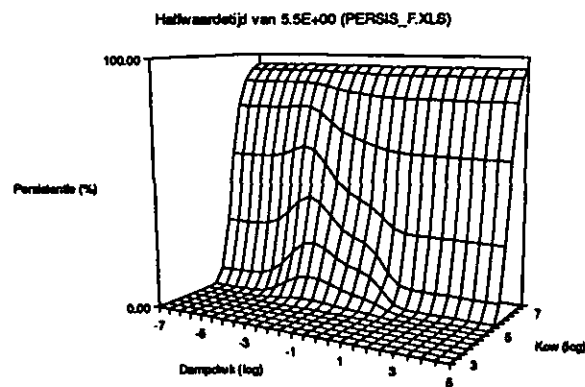
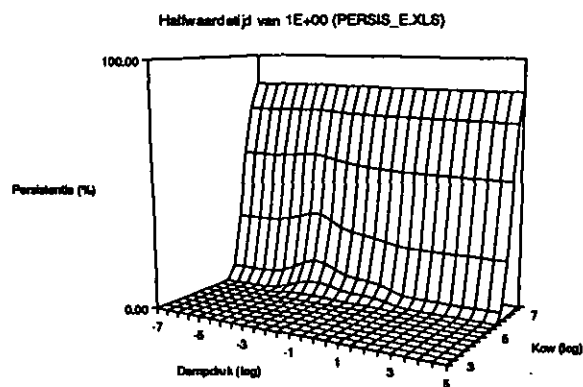
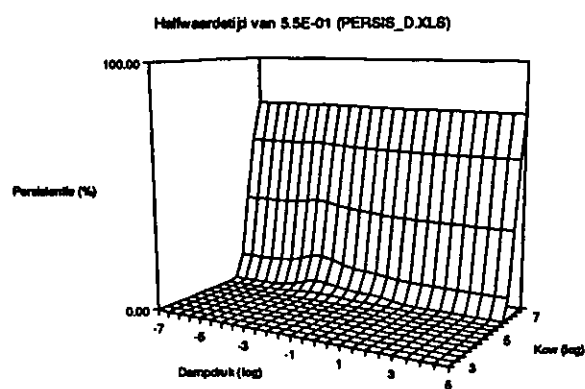
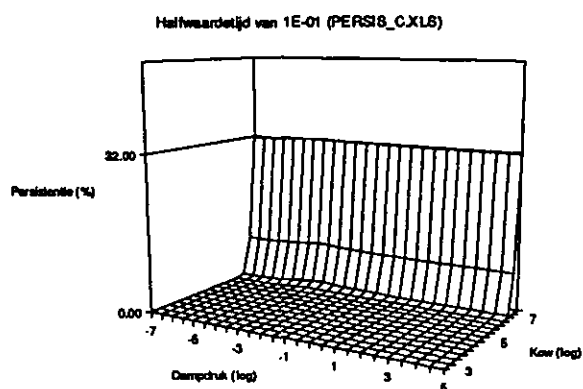
Hierna gaat de lotus-123 macro verder met de volgende berekening. Voor 13 verschillende halfwaardetijden met elk 375 ($15 K_{ow} * 25$ dampdruk waarden) berekeningen is deze macro-routine uitgevoerd. Voor elke waarde van de halfwaardetijd is op deze manier een spreadsheet verkregen. De filenamen die gegeven zijn aan elke spreadsheet versie, die met elkaar verschillen in de gehanteerde halfwaardetijd, zijn te vinden in onderstaande tabel.

Halfwaardetijd [dagen]	Naam spreadsheet-file
10^{-1}	PERSIS_C.XLS
$5.5 \cdot 10^{-1}$	PERSIS_D.XLS
10^0	PERSIS_E.XLS
$5.5 \cdot 10^0$	PERSIS_F.XLS
10^1	PERSIS_G.XLS
$5.5 \cdot 10^1$	PERSIS_H.XLS
10^2	PERSIS_I.XLS
$5.5 \cdot 10^2$	PERSIS_J.XLS
10^3	PERSIS_K.XLS
$5.5 \cdot 10^3$	PERSIS_L.XLS
10^4	PERSIS_M.XLS
$5.5 \cdot 10^4$	PERSIS_N.XLS
10^5	PERSIS_O.XLS

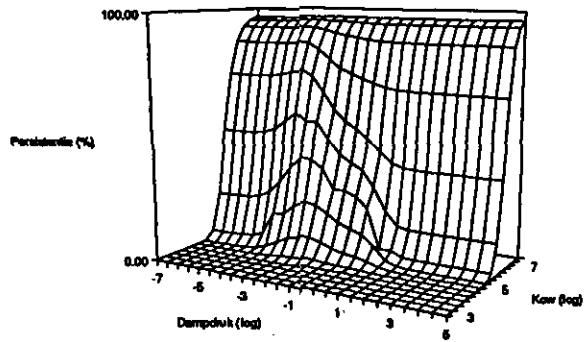
4 Resultaten en discussie

4.1 Gevoeligheidsoppervlakken

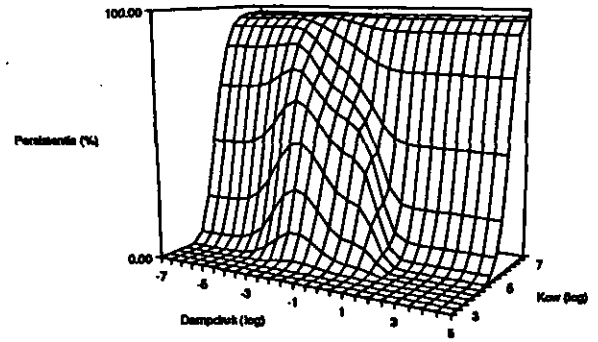
De verkregen waarden voor de persistentie in % na 5 jaar (zie appendix D) voor elk van de halfwaardetijden zijn uitgezet in een 3D-surface figuur welke gemaakt zijn met Microsoft® Excel 4.0. De persistentie is hierbij op de lineaire z-as uitgezet.



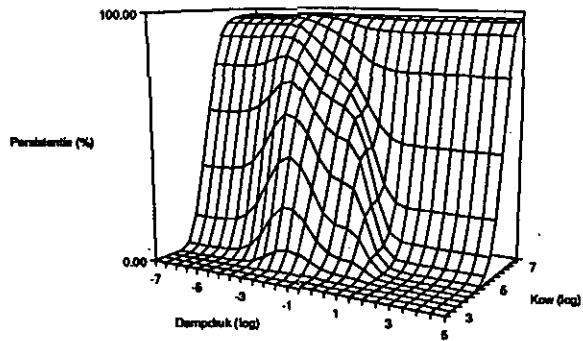
Halfwaardetijd van $1E+01$ (PERSIS_G.XLS)



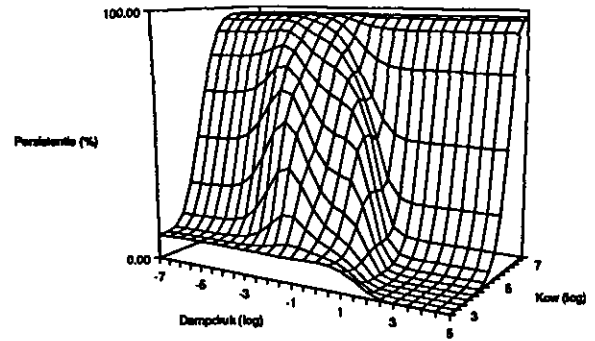
Halfwaardetijd van $5.5E+01$ (PERSIS_H.XLS)



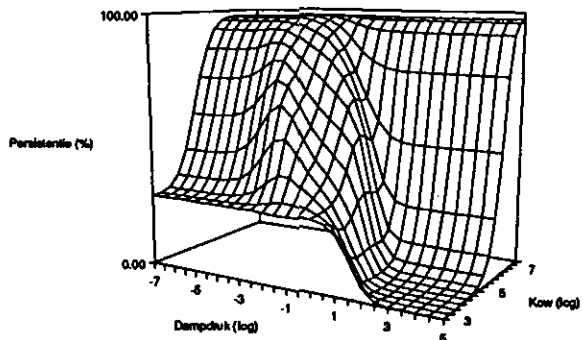
Halfwaardetijd van $1E+02$ (PERSIS_I.XLS)



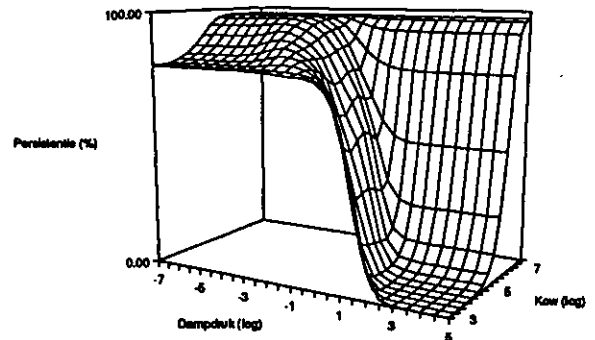
Halfwaardetijd van $5.5E+02$ (PERSIS_J.XLS)

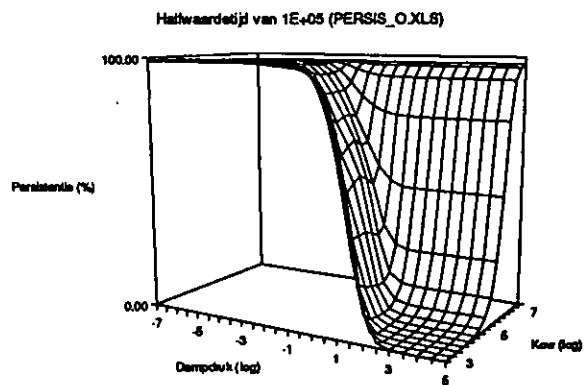
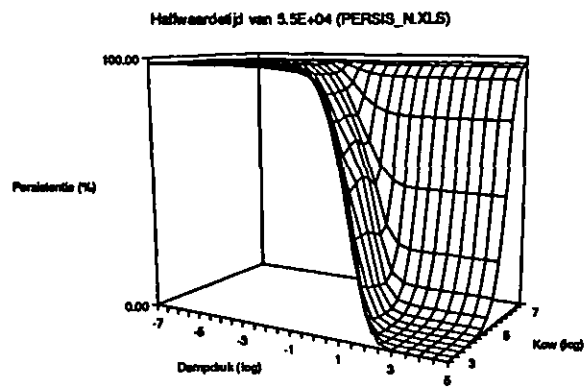
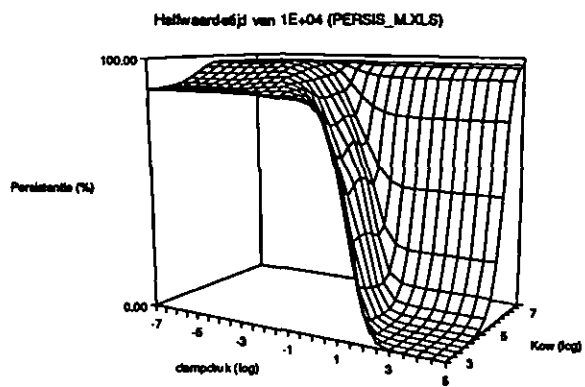


Halfwaardetijd van $1E+03$ (PERSIS_K.XLS)

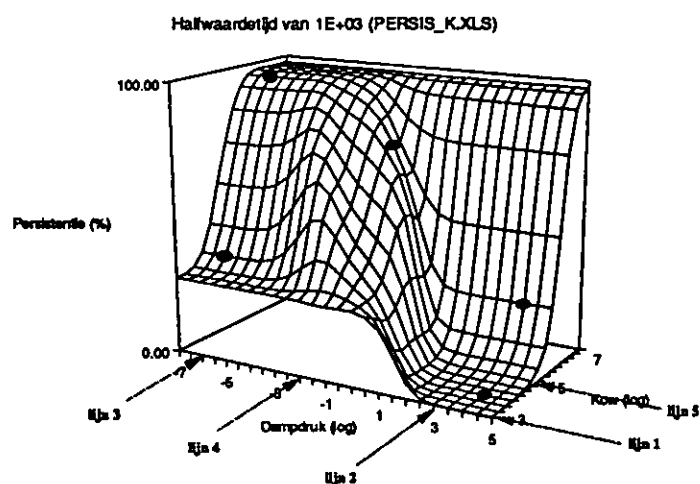


Halfwaardetijd van $5.5E+03$ (PERSIS_L.XLS)





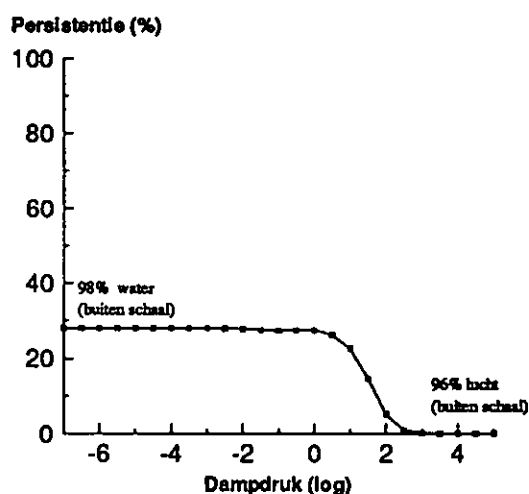
4.2 Interpretatie van het gevoeligheidsoppervlak bij $t_{1/2} = 1000$ dagen



Afbeelding 4.1 : Gevoeligheidsoppervlak bij een halfwaardetijd van 1000 d.

De bijbehorende persistentiewaarden van dit gevoeligheidsoppervlak bij een halfwaardetijd van 1000 dagen (PERSIS_K.XLS) zijn te vinden in bijlage D. Om dit gevoeligheidsoppervlak goed te kunnen verklaren, volgt hieronder de interpretatie van de 5 karakteristieke lijnen uit dit gevoeligheidsoppervlak.

1. De persistentie als functie van de dampdruk bij een vaste waarde van de $K_{ow} = 10^3$ verloopt als volgt :

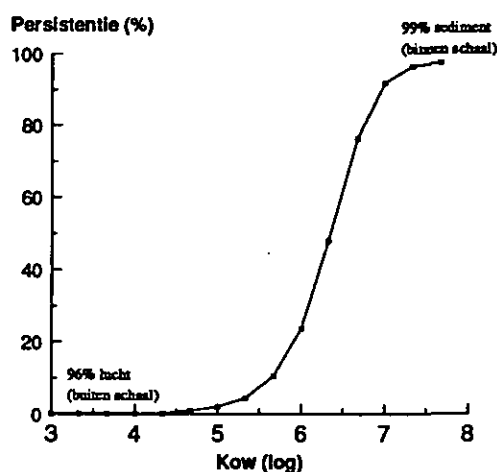


Afbeelding 4.2 : Verband tussen de dampdruk en persistentie (bij een K_{ow} van 10^3)

De stof wordt in het water compartiment van de binnen schaal geëmitteerd. Bij een lage waarde van de dampdruk is er vrijwel geen vervluchtiging. De sedimentatie snelheid is relatief laag, dus er vindt vrijwel geen sedimentatie plaats. De stof kan dus alleen verdwijnen uit dit compartiment door transport via of degradatie in het water compartiment. Omdat de halfwaardetijd (in de orde van 10^3 dag) relatief hoog is, vindt er transport van de stof via de waterfase naar de buiten schaal plaats. In het water compartiment van de buiten schaal vindt tenslotte de afbraak plaats. Door de hoge halfwaardetijd gaat dit echter zeer langzaam, waardoor er een vrij hoge persistentie (~28 %) gevonden wordt.

Bij een toenemende dampdruk neemt de vervluchtiging echter toe (zie afbeelding 2.5). Daarentegen neemt de atmosferische depositie naarmate de dampdruk groter wordt af (zie afbeelding 2.6). Hierdoor zal er in belangrijke mate export plaatsvinden via het lucht compartiment naar de buiten schaal. Aangezien dat er vrijwel geen atmosferische depositie plaatsvindt, zal de stof hier alleen maar verwijderd kunnen worden door afbraak. Omdat de afbraak constante in het lucht compartiment (in de orde van 10^2 dag) vrij hoog is, vindt de afbraak snel plaats. Hierdoor wordt bij een dampdruk $> 10^3$ Pa de persistentie nihil.

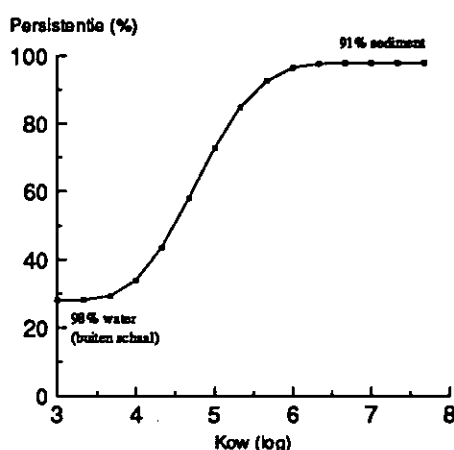
2. De persistentie als functie van de K_{ow} bij een vaste waarde van de dampdruk van 10^3 Pa verloopt als volgt :



Afbeelding 4.3 : Verband tussen de K_{ow} en persistentie (bij dampdruk = 10^3 Pa)

Bij een dampdruk van 10^4 Pa en een lage waarde van de K_{ow} is de vervluchtiging groot waardoor de stof naar het lucht compartiment van de buiten schaal wordt getransporteerd. Hierin vindt de afbraak relatief snel plaats, met als gevolg dat er vrijwel geen persistentie is. Indien de K_{ow} groter wordt dan 10^6 neemt de vervluchtiging af (zie afbeelding 2.5), waardoor zich meer stof in het water compartiment gaat ophouden. Tevens neemt hierbij de neiging van sedimentatie sterk toe (zie afbeelding 2.7). Aangezien de degradatie in het sediment bij toenemende K_{ow} zeer langzaam verloopt (halfwaardetijd $\sim 10^5$ dag), neemt ook de accumulatie door de lange verblijftijd sterk toe. Dit alles leidt er toe dat de persistentie bij toenemende K_{ow} sterk toeneemt.

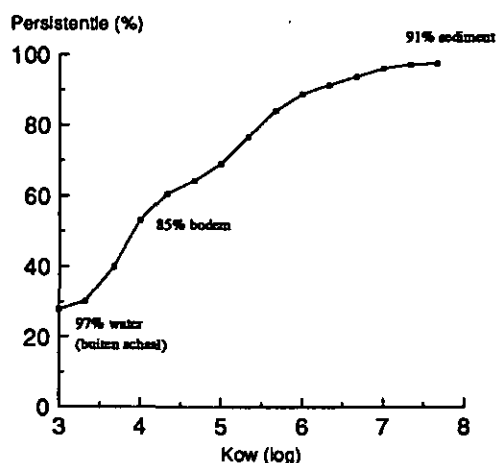
3. De persistentie als functie van de K_{ow} bij een vaste waarde van de dampdruk van 10^{-6} Pa verloopt hier als volgt :



Afbeelding 4.4 : Verband tussen de K_{ow} en de persistentie (bij dampdruk = 10^{-6} Pa)

Zoals eerder vermeld bevindt de stof bij een K_{ow} van 10^3 zich in het water compartiment van de buiten schaal. Door de vrij hoge halfwaardetijd in het water compartiment, is de persistentie hier relatief hoog. Bij een K_{ow} van 10^4 tot 10^6 neemt de sedimentatie toe, waardoor er minder export plaatsvindt via de waterfase naar de overige schalen. Aangezien de afbraak constante in het sediment zeer langzaam verloopt, neemt de persistentie sterk toe. Na een K_{ow} van 10^6 bevindt zich vrijwel alles in het sediment, waardoor de accumulatie sterk toeneemt (bij $K_{ow} = 10^7 \sim 96\%$ accumulatie). Hierdoor vrijwel geen afbraak, met als gevolg een zeer hoge persistentie.

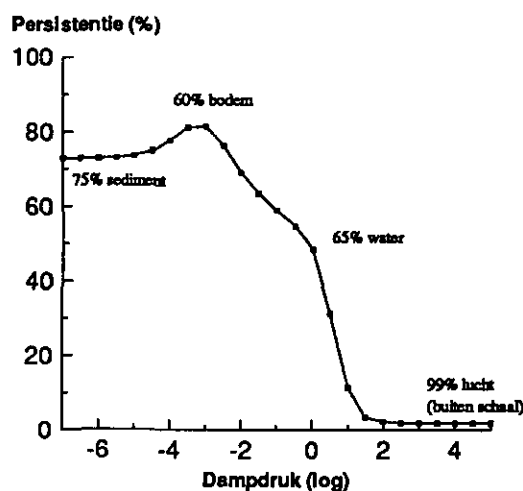
4. De persistentie als functie van de K_{ow} bij een vaste waarde van de dampdruk van 10^{-2} Pa verloopt als volgt :



Afbeelding 4.5 : Verband tussen de K_{ow} en de persistentie (bij dampdruk = 10^{-2} Pa)

Bij een dampdruk van 10^{-2} Pa en een K_{ow} van 10^3 bevindt de stof zich bijna geheel in het water compartiment van de buiten schaal. Als nu de K_{ow} groter wordt, zal de vervluchtiging toenemen (zie afbeelding 2.5). Hierdoor zal door atmosferische depositie transport plaatsvinden naar het bodem compartiment. Aangezien de halfwaardetijd voor de degradatie in de bodem zeer groot is (in de orde van 10^5 dag), zal de persistentie sterk toenemen. Na een K_{ow} van $\sim 10^5$ wordt het proces van sedimentatie belangrijker dan het proces van atmosferische depositie. Aangezien de halfwaardetijd voor de degradatie in het sediment iets kleiner is dan die in de bodem, zal de persistentie is kleiner worden. snel stijgt. Als nu de sedimentatie zo groot wordt dat bijna al de stof via sedimentatie in het sediment terechtkomt, zal de persistentie weer sterk gaan toenemen. Tevens neemt de accumulatie toe (zie afbeelding 2.8).

5. De persistentie als functie van de dampdruk bij een vaste waarde van de K_{ow} van 10^5 ziet er als volgt uit :



Afbeelding 4.5 : Verband tussen de dampdruk en persistentie (bij een K_{ow} van 10^5)

Bij een dampdruk van 10^{-7} Pa en een K_{ow} van 10^5 bevindt de stof zich voor 25% in het water en voor 75% in het sediment. Door de relatief hoge afbraak halfwaardetijden die hier gelden, is de persistentie hoog. Als nu de dampdruk groter wordt, neemt de vluchtigheid toe (zie afbeelding 2.5). Hierdoor komt een gedeelte van de stof door atmosferische depositie terecht in het bodem compartiment. Aangezien de afbraak halfwaardetijd van het bodem compartiment hoog is (in de orde van 10^5 jaar) neemt de persistentie toe. Echter bij verdere toename van de dampdruk neemt de atmosferische depositie snelheid (zie afbeelding 2.6) af en de vluchtigheid toe, waardoor de stof steeds meer naar het buiten compartiment getransporteerd wordt door export via de lucht. Hierdoor neemt de persistentie sterk af.

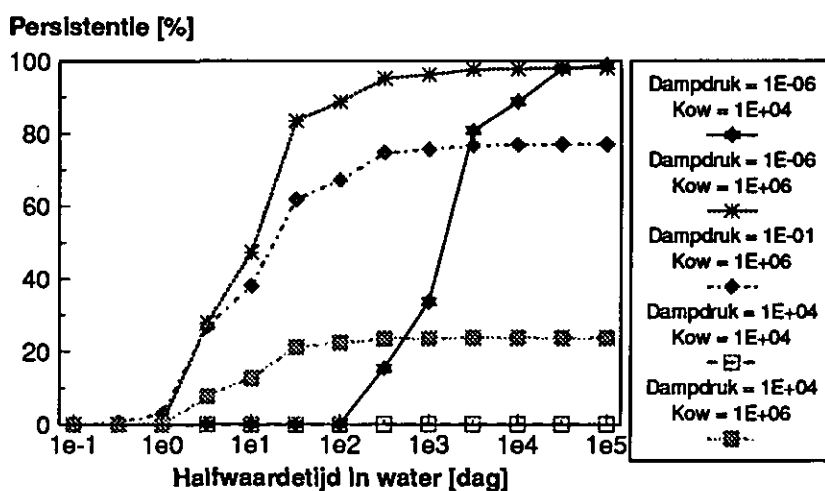
Het zal wel duidelijk zijn dat de processen die hierbij spelen elkaar beïnvloeden, en dat het zeer moeilijk is om een gedetailleerde verklaring te geven over het precieze verloop van de gevonden lijnen.

4.3 Extrapolatie naar andere halfwaardetijden

Nu het gevoeligheidsoppervlak bij de halfwaardetijd van 1000 dagen is geïnterpreteerd is het mogelijk om dit te extrapoleren naar de andere verkregen gevoeligheidsoppervlakken. Hierbij zijn vijf punten uit het gevoeligheidsoppervlak van 1000 dagen genomen. Deze vijf punten zijn als zwarte stippen aangegeven in afbeelding 4.1, de bijbehorende waarden voor de K_{ow} en de dampdruk en de henry constante [$\text{Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$] zijn in onderstaande tabel weergegeven :

	Dampdruk [Pa]	K_{ow}	H [$\text{Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$]
1.	1E-06	1E+04	1.0E-02
2.	1E-06	1E+06	8.6E+00
3.	1E-01	1E+06	2.7E+05
4.	1E+04	1E+04	1.0E+08
5.	1E+04	1E+06	2.7E+10

In afbeelding 4.6 is het verband tussen de persistentie en de halfwaardetijd bij deze vijf combinatie's weergegeven.



Afbeelding 4.6 : Het verband tussen de persistentie en de halfwaardetijd.

Uit afbeelding 4.6 blijkt dat naarmate de halfwaardetijd toeneemt, de persistentie ook toeneemt. De persistentie is nihil tot een halfwaardetijd van ongeveer 10^0 dag, ongeacht de gekozen combinatie van K_{ow} en de dampdruk. Dit komt omdat hierbij de degradatie zo snel gaat dat de stof nagenoeg geen kans krijgt om zich te verspreiden. Bij een toenemende halfwaardetijd zal de degradatiesnelheid afnemen, waardoor de verblijftijd van een stof in een bepaald compartiment toeneemt, en zal afhankelijk van de gekozen waarden voor de K_{ow} en de dampdruk de persistentie gaan toenemen.

De interpretatie van de verschillende lijnen gaat op dezelfde manier als die van het gevoeligheidsoppervlak bij $t_{1/2} = 1000$ dagen (zie hoofdstuk 4.2). Als voorbeeld zal hier de combinatie van een dampdruk van 10^{-6} Pa en een K_{ow} van 10^4 uitgewerkt worden. Hierbij bevindt de stof zich geheel in het water compartiment. Bij toenemende halfwaardetijd neemt de verblijftijd toe, waardoor in dit geval de kans op sedimentatie sterk toeneemt. Hierdoor neemt bij toenemende halfwaardetijd de persistentie sterk toe.

De combinatie van een dampdruk van 10^4 Pa en een K_{ow} van 10^4 wijkt echter van deze interpretatie af omdat de stof zich geheel bevindt in het lucht compartiment. Bij afbraak in het luchtcompartiment is er van uit gegaan dat deze afbraakconstante onafhankelijk is van de gekozen halfwaardetijd in water, waardoor de halfwaardetijd niet van invloed is op de persistentie.

In het algemeen geldt dat naarmate de halfwaardetijd toeneemt, de invloed van vervluchtiging, atmosferische depositie en accumulatie steeds groter wordt. Dit komt omdat de beschikbare tijd dat deze processen kunnen plaatsvinden groter wordt, omdat de afbraak steeds langzamer gaat verlopen. Hierdoor zal dus naarmate de halfwaardetijd toeneemt de persistentie toenemen. Welk proces optreedt is uiteraard afhankelijk van de geldende waarde van de K_{ow} en de dampdruk.

Tenslotte blijkt uit afbeelding 4.6 dat uitgezonderd bij de combinatie met een K_{ow} van 10^6 en een dampdruk van 10^{-6} Pa, de persistentie niet meer zichtbaar wordt beïnvloed door een halfwaardetijd groter dan $\sim 10^3$ dag. De verblijftijd is hier zo groot, dat de verspreiding van de stof sterk de overhand heeft.

5 Conclusies

De berekeningen die met het 3 schalen model 3scalbox zijn uitgevoerd, geven aan dat de verwachte persistentie in het totale milieu sterk afhangt van de gekozen waarde voor de octanol-water partitiecöefficient (K_{ow}), de dampdruk en de pseudo eerste orde afbraakconstante.

Het gevoeligheidsoppervlak dat verkregen is bij een halfwaardetijd in water van 10^{-1} dag, laat zien dat de persistentie nihil is tot een K_{ow} van 10^7 (onafhankelijk de waarde van de dampdruk). Bij een hogere waarde van de K_{ow} neemt de persistentie echter sterk toe, dit wordt veroorzaakt doordat bij toenemende waarde van K_{ow} de sedimentatie sterk toeneemt, waardoor dus de persistentie sterk toeneemt. Bij een lage waarde van de dampdruk bevindt de stof zich geheel in het water compartiment van de buiten schaal. Daarentegen zal bij een hoge waarde van de dampdruk de stof zich geheel in het lucht compartiment van de buiten schaal bevinden.

Als nu de halfwaardetijd voor de afbraak in water groter wordt, zal de afbraak langzamer gaan verlopen waardoor er relatief meer tijd voor de chemische stof vrij komt om zich via transport naar andere compartimenten te verplaatsen. Kortom, de vervluchtiging, de atmosferische depositie en accumulatie worden belangrijker. Afhankelijk van de octanol-water partitiecöefficient (K_{ow}) en de dampdruk zal één of meer van deze processen gaan toenemen. Indien nu transport naar het bodem of sediment compartiment zal plaatsvinden, zal de persistentie sterk toenemen omdat de halfwaardetijd voor afbraak hier zeer groot zijn. Echter bij een dampdruk die groter is dan 10^3 Pa zal de persistentie niet hoger worden bij toenemende halfwaardetijd, omdat de afbraak in lucht niet afhankelijk is van de gekozen halfwaardetijd in water.

Het blijkt echter zeer moeilijk om de stofstomen in detail te verklaren, dit wordt vooral veroorzaakt omdat de verschillende transport processen elkaar beïnvloeden.

6 Aanbevelingen

1. Aangezien dat de gebruikte externe integrator zeer lange rekentijden nodig heeft bij modelberekeningen met een octanol-water partitiecoëfficiënt kleiner dan 10^3 en een halfwaardetijd in water kleiner dan 10^{-2} dag, is het aan te bevelen om een andere integrator routine te gebruiken c.q. te ontwikkelen.
2. Het is ook aan te bevelen om na te gaan of er geen verband moet worden aangenomen tussen de degradatie constante in lucht en de degradatie constante in water. Dit omdat het niet waarschijnlijk lijkt dat een stof die zeer moeilijk in water wordt afgebroken, ook meer moeite zal ondervinden bij de afbraak in het lucht compartiment.
3. Ten behoeve van het project "Ontwikkeling van een QSAR-systeem voor de voorspelling van de eliminatie van chemicaliën in het milieu" dat wordt uitgevoerd op de Universiteit van Amsterdam is het aan te bevelen om voor meerdere waarden van de K_{ow} en dampdruk het verband uit te zetten tussen de persistentie en de halfwaardetijd in water.

7 Geraadpleegde literatuur

- [1] van de Meent D.
Simplebox : a generic multimedia fate evaluation model
augustus 1993, RIVM rapport nr. 672720 001
Bilthoven: Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiëne.
- [2] van de Meent D.
Beoordelingsstelsysteem Nieuwe Stoffen: SIMPLERISK : een model voor het schatten van concentraties in water en bodem.
februari 1989, RIVM rapport nr. 718706 001
Bilthoven: Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiëne.
- [3] Mackay Donald
Multimedia Environmental Models; The Fugacity Approach
1991, Lewis Publishers.
- [4] Mackay, D ; Paterson, S. ; Cheung, B. ; Neely, W.B.
Evaluating the environmental behavior of chemicals with a level III fugacity model.
1985, Chemosphere, Vol.14, No.3-4, pp 335-374
- [5] Noordijk, F. ; de Leeuw, F.A.A.M.
De berekening van atmosferische transport van organische stoffen.
december 1991, RIVM rapport nr. 679102 005
Bilthoven: Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiëne.
- [6] Gobas, F.A.P.C. ; McCorquodale, J.A.
Chemical dynamics in fresh water ecosystems.
Chapter 4 : Exchange of chemicals between lakes and the atmosphere.
1992, Lewis publishers, pp 93-109
- [7] de Greef, J. ; van de Meent, D.
Beoordelingsstelsysteem Nieuwe Stoffen: Transportroutines, een receptuur voor het schatten van de snelheid van het transport van stoffen in oppervlaktewater.
augustus 1989, RIVM rapport nr. 958701 001
Bilthoven: Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiëne.
- [8] Mills, W.B.; Porcella, D.B.; Unger, M.J.; Gherini, S.A.; Summers, K.V.; Mok, L.; Rupp, G.L.; Bowie, G.L.; Haith, D.A.
Water quality assessment : A Screening Procedure for Toxic and Conventional Pollutants in Surface and Ground Water
1985, part 1, JACA Corporation, Fort Washington, Pennsylvania 19034

- [9] Brock Neely W. ; Blau, Gary E.
Environmental Exposure from Chemicals.
Volume I, CRC Press Inc, Florida.

- [10] Lyman, W.J. ; Reehl, W.F. ; Rosenblatt, D.H.
Handbook of Chemical Property Estimation Methods
1990, American Chemical Society, Washington, DC

- [11] Howard, P.H. ; Boethling, R.S. ; Jarvis, W.F. ; Maylan, W.M. ; Michalenko, E.M.
Handbook of Environmental Degradation Rates
1991, Lewis Publishers

- [12] van Straalen, N.M. ; Verkleij, J.A.C.
Leerboek Oecotoxicologie
1991, VU uitgeverij Amsterdam

- [13] Wortelboer R. en Aldenberg T.
FAME, Friendly Applied Modelling Environment. Version 2.2 User Manual
RIVM rapport nr. 718900 001 Bilthoven: RIVM

Appendix A Automatiserings macro

\Automatic	
{let COUNTER,1}	; zet teller op 1 bij starten van automatische berekening.
{for COUNTER,START,STOP,STEP,LOOP}	; roep de routine LOOP aan, met een waarde voor teller, start, stop en herhaal deze loop stop-start keer.
{blank \$C\$9}	; na afloop van de looproutine de inhoud cel C9 wissen.
{blank \$C\$10}	; na afloop van de looproutine de inhoud cel C10 wissen.
{blank \$C\$142}	; na afloop van de looproutine de inhoud cel C142 wissen.
{blank \$CG\$178}	; na afloop van looproutine de inhoud cel CG178 wissen.
{blank \$CH\$178}	; na afloop van looproutine de inhoud cel CH178 wissen.
{blank \$DO\$5}	; na afloop van de looproutine de inhoud cel DO5 wissen.
{blank \$DO\$6}	; na afloop van de looproutine de inhoud cel DO6 wissen.
/feoLOOP.DAT~y	; na afloop de MSDOS-file LOOP.DAT verwijderen.
/feoINTEGR.BAT~y	; na afloop de MSDOS-file INTEGR.BAT verwijderen.
{home}{goto}DB1~	; ga met de cursor naar cel DB1.
\LOOP	
{windowsoff}	; schakelt het verversingsscreen uit.
{put TIME,0,COUNTER+1,@now}	; zet de tijd (begintijd berekening) in de uitvoertabel.
{let \$C\$9,@vlookup(COUNTER,AUTO_INTABEL,1)}	; zet de juiste waarde van de Kow in cel C9.
{let \$C\$10,@vlookup(COUNTER,AUTO_INTABEL,2)}	; zet de juiste waarde van de dampdruk in cel C10.
{let \$C\$142,@vlookup(COUNTER,AUTO_INTABEL,3)}	; zet de juiste waarde van de halfwaardetijd in cel C142.
{let \$DO\$5,cell("contents",DO3)&text(COUNTER,"0")&"PRN"}	; formuleer een unieke filenaam en zet deze in cel DO5.
{let \$DO\$6,cell("contents",DO4)&text(COUNTER,"0")&"PRN"}	; formuleer een unieke filenaam en zet deze in cel DO6.
{let CG178,STOP-START+1}	; zet totaal aantal berekeningen in CG178 (LOOP.DAT).
{let CH178,COUNTER-START+1}	; zet nummer van huidige berekening in CH178.
{let \$AZ\$10,\$DO\$6}	; zet de inhoud van cel DO6 in de resultaten tabel.
{let \$CG\$150,\$DO\$6}	; zet de inhoud van cel DO6 in cel CG150.
{let \$CG\$153,\$DO\$5}	; zet de inhoud van cel DO5 in cel CG153.
/pfLOOP.DAT~rr{esc}LOOP.DAT~agq	; kopieer de inhoud van LOOP.DAT naar de MSDOS-file LOOP.DAT
{calc}	; reken de sheet door.
/dmiCF~CF-1~	; inverseer de matrix CF.
/dmmCF-1~CNST~RES~	; vermenigvuldigd matrix CF-1 met matrix CNST.
/rRES~CSS~	; transposeer de matrix RES naar matrix CSS.
{calc}	; bereken de sheet nogmaals door.
/ppoml0~mr240~ouqq	; printer options.
/pfINTEGR.BAT~rr{esc}INTEGR.BAT~agq	; kopieer de inhoud van INTEGR.DAT naar de MSDOS-file INTEGR.DAT
/pf3SCALINT.SCN~rr{esc}SCENARIO1~agq	; kopieer de inhoud van SCENARIO1 naar de MSDOS-file 3SCALINT.SCN (nodig voor de integratie routine).

/pf3SCALINT.SET~rr{esc}SETTINGS~agq	; kopieer de inhoud van SETTINGS naar de MSDOS-file 3SCALINT.SET (nodig voor de integratie routine).
{system "INTEGR"}	; ga na MSDOS en start INTEGR.BAT op.
{goto}DYNOUTPUT~{d 14}~	; ga naar DYNOUTPUT en ga 14 regels naar beneden.
/reINTEGRATDATA~	; maak INTEGRATDATA leeg.
/finINTEGRAT.DAT~	; lees de inhoud van INTEGRAT.DAT in de sheet in.
/re{r 9}~	
/cLEGEND~LEGENDS~	; zet de juiste legends boven integratie resultaten tabel.
/pf	; kopieer de inhoud van SSOUTPUT naar de MSDOS-file RES#yxxx.PRN.
RES#yxxx.PRN	
~rr{esc}SSOUTPUT~agq	
/pf	; kopieer de inhoud van DYNOUTPUT naar de MSDOSfile INT#yxxx.PRN.
INT#yxxx.PRN	
~rr{esc}DYNOUTPUT~agq	
{put TIME,1,COUNTER+1,@now}	; zet de tijd (eindtijd berekening) in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,0,COUNTER,DO6}	; zet de waarde van DO6 (unieke naam) in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,1,COUNTER,C9}	; zet de waarde van C9 (Kow) in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,2,COUNTER,C10}	; zet de waarde van C10 (dampdruk) in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,3,COUNTER,C142}	; zet de waarde van C142 (halfwaardetijd) in uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,4,COUNTER,CW71/CW66*100}	; zet de persistentie 5 jaar INNER in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,5,COUNTER,CX71/CX66*100}	; zet de persistentie 5 jaar MIDDLE in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,6,COUNTER,CY71/CY66*100}	; zet de persistentie 5 jaar OUTER in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,7,COUNTER,CZ71/CZ66*100}	; zet de persistentie 5 jaar TOTAAL in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,8,COUNTER,CW76/CW66*100}	; zet de persistentie 10 jaar INNER in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,9,COUNTER,CX76/CX66*100}	; zet de persistentie 10 jaar MIDDLE in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,10,COUNTER,CY76/CY66*100}	; zet de persistentie 10 jaar OUTER in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,11,COUNTER,CZ76/CZ66*100}	; zet de persistentie 10 jaar TOTAAL in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,12,COUNTER,CW91/CW66*100}	; zet de persistentie 25 jaar INNER in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,13,COUNTER,CX91/CX66*100}	; zet de persistentie 25 jaar MIDDLE in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,14,COUNTER,CY91/CY66*100}	; zet de persistentie 25 jaar OUTER in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,15,COUNTER,CZ91/CZ66*100}	; zet de persistentie 25 jaar TOTAAL in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,16,COUNTER,CW116/CW66*100}	; zet de persistentie 50 jaar INNER in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,17,COUNTER,CX116/CX66*100}	; zet de persistentie 50 jaar MIDDLE in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,18,COUNTER,CY116/CY66*100}	; zet de persistentie 50 jaar OUTER in de uitvoertabel.
{put OUTPUT_AUTOMATIC,19,COUNTER,CZ116/CZ66*100}	; zet de persistentie 50 jaar TOTAAL in de uitvoertabel.

Appendix B Invoergegevens 3scalbox

PROPERTIES		USER	FORM	USED
COMPOUND				
(A) COMPOUNDNAME		HYPOTHETICAL	HYPO	HYPOTHETICAL
(A) FORMULA			HyPo	HyPo
(A) MOLWEIGHT	g.mol-1		250	2.50E-01 kg.mol-1
(A) Kow	-	INPUT	1E+06	1.00E+06 -
(A) VAPORPRESSURE	Pa	INPUT	1E-03	1.00E-03 Pa
(A) SOLUBILITY	mg.l-1		9E-02	3.68E-04 mol.m-3
(A) PASSreadytest	[y/h]		N	NO -
(D) K(air1-water1)	-	1.15E-03	1E-03	1.15E-03 -
(A) Temperature1	°C		12	2.85E+02 K
(D) K(air2-water2)	-	1.15E-03	1E-03	1.15E-03 -
(A) Temperature2	°C		12	2.85E+02 K
(D) K(air3-water3)	-	1.15E-03	1E-03	1.15E-03 -
(A) Temperature3	°C		12	2.85E+02 K
(D) KP(susp1)	l.kg-1	1.00E+05	1E+05	1.00E+05 l.kg-1
(A) CORG(susp1)	%C.		10	1.00E-01 -
(D) KP(susp2)	l.kg-1	1.00E+05	1E+05	1.00E+05 l.kg-1
(A) CORG(susp2)	%C.		10	1.00E-01 -
(D) KP(susp3)	l.kg-1	1.00E+05	1E+05	1.00E+05 l.kg-1
(A) CORG(susp3)	%C.		10	1.00E-01 -
(D) KP(sed1)	l.kg-1	5.00E+04	5E+04	5.00E+04 l.kg-1
(A) CORG(sed1)	%C.		5	5.00E-02 -
(D) KP(sed2)	l.kg-1	5.00E+04	5E+04	5.00E+04 l.kg-1
(A) CORG(sed2)	%C.		5	5.00E-02 -
(D) KP(sed3)	l.kg-1	5.00E+04	5E+04	5.00E+04 l.kg-1
(A) CORG(sed3)	%C.		5	5.00E-02 -
(D) KP(soilA1)	l.kg-1	2.00E+04	2E+04	2.00E+04 l.kg-1
(A) CORG(soilA1)	%C.		2	2.00E-02 -
(D) KP(soilA2)	l.kg-1	2.00E+04	2E+04	2.00E+04 l.kg-1
(A) CORG(soilA2)	%C.		2	2.00E-02 -
(D) KP(soilA3)	l.kg-1	2.00E+04	2E+04	2.00E+04 l.kg-1
(A) CORG(soilA3)	%C.		2	2.00E-02 -
(D) KP(soilB1)	l.kg-1	2.00E+04	2E+04	2.00E+04 l.kg-1
(A) CORG(soilB1)	%C.		2	2.00E-02 -
(D) KP(soilB2)	l.kg-1	2.00E+04	2E+04	2.00E+04 l.kg-1
(A) CORG(soilB2)	%C.		2	2.00E-02 -
(D) KP(soilB3)	l.kg-1	2.00E+04	2E+04	2.00E+04 l.kg-1
(A) CORG(soilB3)	%C.		2	2.00E-02 -
ENVIRONMENT CHARACTERISTICS				
(A) SYSTEMNAME		EARTH		EARTH
(D) SYSTEMAREA1	km2	5.00E+04	5E+04	5.00E+10 m2
(D) AFRAC(water1)	%	1.00E+01	10.0	1.00E-01 -
(D) AFRAC(soilA1)	%	1.00E-10	50.0	1.00E-12 -
(D) AFRAC(soilB1)	%	9.00E+01	90.0	9.00E-01 -
(D) SYSTEMAREA2	km2	5.00E+06	5E+06	5.00E+12 m2
(D) AFRAC(water2)	%	5.00E+00	5.0	5.00E-02 -
(D) AFRAC(soilA2)	%	1.00E-10	50.0	1.00E-12 -
(D) AFRAC(soilB2)	%	9.50E+01	95.0	9.50E-01 -
(D) SYSTEMAREA3	km2	5.00E+08	5E+08	5.00E+14 m2
(D) AFRAC(water3)	%	7.00E+01	70.0	7.00E-01 -
(D) AFRAC(soilA3)	%	1.00E-10	20.0	1.00E-12 -
(D) AFRAC(soilB3)	%	3.00E+01	30.0	3.00E-01 -
(A) HEIGHT(air1)	m		1000	1.00E+03 m
(A) HEIGHT(air2)	m		1000	1.00E+03 m
(A) HEIGHT(air3)	m		1000	1.00E+03 m
(A) DEPTH(water1)	m		3	3.00E+00 m

Onderzoek van de gevoeligheid van modelmatige berekende persistentie in het milieu

(A)	DEPTH(water2)	m		5	5.00E+00	m
(A)	DEPTH(water3)	m		100	1.00E+02	m
(A)	SUSP(water1)	mg.l-1		15	1.50E-02	kg.m-3
(A)	SUSP(water2)	mg.l-1		10	1.00E-02	kg.m-3
(A)	SUSP(water3)	mg.l-1		5	5.00E-03	kg.m-3
(A)	DEPTH(sed1)	cm		3	3.00E-02	m
(A)	DEPTH(sed2)	cm		3	3.00E-02	m
(A)	DEPTH(sed3)	cm		3	3.00E-02	m
(A)	DEPTH(soilA1)	cm	2.00E+01	5	2.00E-01	m
(A)	DEPTH(soilA2)	cm	2.00E+01	5	2.00E-01	m
(A)	DEPTH(soilA3)	cm	2.00E+01	5	2.00E-01	m
(A)	DEPTH(soilB1)	cm		20	2.00E-01	m
(A)	DEPTH(soilB2)	cm		20	2.00E-01	m
(A)	DEPTH(soilB3)	cm		20	2.00E-01	m
(A)	RHO(sed1)	kg.m-3		1300	1.30E+03	kg.m-3
(A)	RHO(sed2)	kg.m-3		1300	1.30E+03	kg.m-3
(A)	RHO(sed3)	kg.m-3		1300	1.30E+03	kg.m-3
(A)	RHO(soil1)	kg.m-3		1550	1.55E+03	kg.m-3
(A)	RHO(soil2)	kg.m-3		1550	1.55E+03	kg.m-3
(A)	RHO(soil3)	kg.m-3		1550	1.55E+03	kg.m-3
(A)	FRwater(sed1)	-		0.8	8.00E-01	-
(A)	FRwater(sed2)	-		0.8	8.00E-01	-
(A)	FRwater(sed3)	-		0.8	8.00E-01	-
(A)	FRair(soil1)	-		0.2	2.00E-01	-
(A)	FRair(soil2)	-		0.2	2.00E-01	-
(A)	FRair(soil3)	-		0.2	2.00E-01	-
(A)	FRwater(soil1)	-		0.3	3.00E-01	-
(A)	FRwater(soil2)	-		0.3	3.00E-01	-
(A)	FRwater(soil3)	-		0.3	3.00E-01	-
(A)	RHOsolid	g.cm-3		2500	2.50E+03	kg.m-3
(D)	TAU(air1)	d	4.59E-01	5E-01	3.96E+04	s
(D)	TAU(air2)	d	4.59E+00	5E+00	3.96E+05	s
(D)	TAU(air3)	d	1.00E+10	1E+10	8.64E+14	s
(D)	TAU(water1)	d	5.00E+01	5E+01	4.32E+06	s
(D)	TAU(water2)	d	2.50E+02	2E+02	2.16E+07	s
(D)	TAU(water3)	d	1.00E+10	1E+10	8.64E+14	s

LOADING PARAMETERS

EMISSIONS

(D)	Edirect(air1)	tyr-1	1.00E-25	1E-10	1.27E-29	mol.s-1
(D)	Edirect(air2)	tyr-1	1.00E-25	0E+00	1.27E-29	mol.s-1
(D)	Edirect(air3)	tyr-1	1.00E-25	0E+00	1.27E-29	mol.s-1
(D)	Edirect(water1)	tyr-1	5.00E+00	5E+01	6.34E-04	mol.s-1
(D)	Edirect(water2)	tyr-1	1.00E-25	0E+00	1.27E-29	mol.s-1
(D)	Edirect(water3)	tyr-1	1.00E-25	0E+00	1.27E-29	mol.s-1
(D)	Edirect(soilB1)	tyr-1	1.00E-25	1E-10	1.27E-29	mol.s-1
(D)	Edirect(soilB2)	tyr-1	1.00E-25	0E+00	1.27E-29	mol.s-1
(D)	Edirect(soilB3)	tyr-1	1.00E-25	0E+00	1.27E-29	mol.s-1
(A)	PRODUCTION1	tyr-1		5E+01	6.34E-03	mol.s-1
(A)	PRODUCTION2	tyr-1		0E+00	0.00E+00	mol.s-1
(A)	PRODUCTION3	tyr-1		0E+00	0.00E+00	mol.s-1
(A)	EMISfact(air)	%		33.3	1.00E-12	-
(A)	EMISfact(water)	%		33.3	1.00E+00	-
(A)	WWTP(air)	%		10.0	1.00E-12	-
(A)	WWTP(water)	%		30.0	1.00E+00	-
(A)	WWTP(sludge)	%		60.0	1.00E-12	-
(A)	EMISFACT(soil)	%		33.3	1.00E-12	-

IMPORT

(D)	IMPORT(air3)	tyr-1	0.00E+00	0.0E+00	0.00E+00	mol.s-1
(A)	CONCimp(air3)	g.m-3		0.0E+00	0.00E+00	mol.m-3
(D)	IMPORT(water3)	tyr-1	0.00E+00	0.0E+00	0.00E+00	mol.s-1
(A)	CONCimp(water3)	g.l-1		0.0E+00	0.00E+00	mol.m-3

TRANSFORMATION PROCESSES

(D) KDEG(air1)	d-1		3.94E-03		4E-03		4.56E-08	s-1
(D) KDEG(air2)	d-1		3.94E-03		4E-03		4.56E-08	s-1
(D) KDEG(air3)	d-1		3.94E-03		4E-03		4.56E-08	s-1
(D) KDEG(water1)	d-1		2.77E-04		3E-04		3.21E-09	s-1
(D) KDEG(water2)	d-1		3.47E-04		3E-04		4.01E-09	s-1
(D) KDEG(water3)	d-1		4.62E-04		5E-04		5.35E-09	s-1
(A) FRdisslvd(water1)	%				40		4.00E-01	-
(A) FRdisslvd(water2)	%				50		5.00E-01	-
(A) FRdisslvd(water3)	%				67		6.67E-01	-
(A) HALFLIFE(testwater)	d		INPUT		1E+03		1.00E+03	d
(A) KDEG(testwater)	d-1				7E-04		6.93E-04	d-1
(A) BACT(testwater)	cfu.ml-1				4E+04		4.00E+04	cfu.ml-1
(A) BACT(water)	cfu.ml-1				4E+04		4.00E+04	cfu.ml-1
(D) KDEG(sed1)	d-1		1.25E-03		3E-06		3.32E-11	s-1
(D) KDEG(sed2)	d-1		1.25E-03		3E-06		3.32E-11	s-1
(D) KDEG(sed3)	d-1		1.25E-03		3E-06		3.32E-11	s-1
(A) FRdisslvd(sed1)	mol%				3E-03		3.20E-05	mol%
(A) FRdisslvd(sed2)	mol%				3E-03		3.20E-05	mol%
(A) FRdisslvd(sed3)	mol%				3E-03		3.20E-05	mol%
(A) BACT(sedwater)	cfu.ml-1		5.17E+06		2E+09		5.17E+06	cfu.ml-1
(D) KDEG(soilA1)	d-1		7.68E-07		8E-07		8.88E-12	s-1
(D) KDEG(soilA2)	d-1		7.68E-07		8E-07		8.88E-12	s-1
(D) KDEG(soilA3)	d-1		7.68E-07		8E-07		8.88E-12	s-1
(D) KDEG(soilB1)	d-1		7.68E-07		8E-07		8.88E-12	s-1
(D) KDEG(soilB2)	d-1		7.68E-07		8E-07		8.88E-12	s-1
(D) KDEG(soilB3)	d-1		7.68E-07		8E-07		8.88E-12	s-1
(A) FRdisslvd(soil1)	mol%				9E-04		8.57E-06	mol%
(A) FRdisslvd(soil2)	mol%				9E-04		8.57E-06	mol%
(A) FRdisslvd(soil3)	mol%				9E-04		8.57E-06	mol%
(A) BACT(soilwater)	cfu.ml-1				5E+06		5.17E+06	cfu.ml-1

INTERMEDIA TRANSFER PROCESSES

AIR/WATER and AIR/SOIL EXCHANGE

(D) DRYDEP(aerosol1)	m.s-1		9.09E-05		9E-05		9.09E-05	m.s-1
(D) DRYDEP(aerosol2)	m.s-1		9.09E-05		9E-05		9.09E-05	m.s-1
(D) DRYDEP(aerosol3)	m.s-1		9.09E-05		9E-05		9.09E-05	m.s-1
(A) FRass(aerosol1)	-				0.09		9.09E-02	-
(A) FRass(aerosol2)	-				0.09		9.09E-02	-
(A) FRass(aerosol3)	-				0.09		9.09E-02	-
(A) AEROSOL(DEPrate1)	cm.s-1				0.1		1.00E-03	m.s-1
(A) AEROSOL(DEPrate2)	cm.s-1				0.1		1.00E-03	m.s-1
(A) AEROSOL(DEPrate3)	cm.s-1				0.1		1.00E-03	m.s-1
(D) WASHOUT1	m.s-1		4.57E-04		5E-04		4.57E-04	m.s-1
(D) WASHOUT2	m.s-1		4.57E-04		5E-04		4.57E-04	m.s-1
(D) WASHOUT3	m.s-1		4.57E-04		5E-04		4.57E-04	m.s-1
(A) RAINrate1	mm.yr-1				760		2.41E-08	m.s-1
(A) RAINrate2	mm.yr-1				760		2.41E-08	m.s-1
(A) RAINrate3	mm.yr-1				760		2.41E-08	m.s-1
(A) SCA Vratio1	-				2E+04		1.90E+04	-
(A) SCA Vratio2	-				2E+04		1.90E+04	-
(A) SCA Vratio3	-				2E+04		1.90E+04	-
(D) GASABS(water1)	m.s-1		3.51E-03		4E-03		3.51E-03	m.s-1
(D) GASABS(water2)	m.s-1		3.51E-03		4E-03		3.51E-03	m.s-1
(D) GASABS(water3)	m.s-1		3.51E-03		4E-03		3.51E-03	m.s-1
(D) VOLAT(water1)	m.s-1		1.77E-06		2E-06		1.77E-06	m.s-1
(D) VOLAT(water2)	m.s-1		2.22E-06		2E-06		2.22E-06	m.s-1
(D) VOLAT(water3)	m.s-1		2.95E-06		3E-06		2.95E-06	m.s-1
(A) Kaw(air)	m.s-1				4E-03		4.24E-03	m.s-1
(A) Kaw(water)	m.s-1				5E-05		5.00E-05	m.s-1

Onderzoek van de gevoeligheid van modelmatige berekende persistentie in het milieu

(D) GASABS(soilA1)	m.s-1		5.49E-06		5E-06		5.49E-06	m.s-1
(D) GASABS(soilA2)	m.s-1		5.49E-06		5E-06		5.49E-06	m.s-1
(D) GASABS(soilA3)	m.s-1		5.49E-06		5E-06		5.49E-06	m.s-1
(D) GASABS(soilB1)	m.s-1		5.49E-06		5E-06		5.49E-06	m.s-1
(D) GASABS(soilB2)	m.s-1		5.49E-06		5E-06		5.49E-06	m.s-1
(D) GASABS(soilB3)	m.s-1		5.49E-06		5E-06		5.49E-06	m.s-1
(D) VOLAT(soilA1)	m.s-1		2.77E-13		3E-13		2.77E-13	m.s-1
(D) VOLAT(soilA2)	m.s-1		2.77E-13		3E-13		2.77E-13	m.s-1
(D) VOLAT(soilA3)	m.s-1		2.77E-13		3E-13		2.77E-13	m.s-1
(D) VOLAT(soilB1)	m.s-1		2.77E-13		3E-13		2.77E-13	m.s-1
(D) VOLAT(soilB2)	m.s-1		2.77E-13		3E-13		2.77E-13	m.s-1
(D) VOLAT(soilB3)	m.s-1		2.77E-13		3E-13		2.77E-13	m.s-1
(A) Kasl(air)	m.s-1				4E-03		4.24E-03	m.s-1
(A) Kasl(soil_air)	m.s-1				6E-06		5.56E-06	m.s-1
(A) Kasl(soil_water)	m.s-1				6E-10		5.56E-10	m.s-1

WATER/SEDIMENT EXCHANGE

(D) SEDRate1	mm.yr-1		1.00E+01		10.0		3.17E-10	m.s-1
(D) SEDRate2	mm.yr-1		5.00E+00		5.0		1.59E-10	m.s-1
(D) SEDRate3	mm.yr-1		1.00E+00		1.0		3.17E-11	m.s-1
(D) RESUSPrate1	mm.yr-1		9.85E+00		9.9		3.12E-10	m.s-1
(D) RESUSPrate2	mm.yr-1		4.90E+00		4.9		1.55E-10	m.s-1
(D) RESUSPrate3	mm.yr-1		9.00E-01		0.9		2.85E-11	m.s-1
(D) ADSORB(sed1)	m.s-1		1.10E-08		1E-08		1.10E-08	m.s-1
(D) ADSORB(sed2)	m.s-1		1.38E-08		1E-08		1.38E-08	m.s-1
(D) ADSORB(sed3)	m.s-1		1.83E-08		2E-08		1.83E-08	m.s-1
(D) DESORB(sed1)	m.s-1		4.40E-13		4E-13		4.40E-13	m.s-1
(D) DESORB(sed2)	m.s-1		5.50E-13		6E-13		5.50E-13	m.s-1
(D) DESORB(sed3)	m.s-1		7.33E-13		7E-13		7.33E-13	m.s-1
(A) KWS(water)	m.s-1				3E-06		2.78E-06	m.s-1
(A) KWS(sed)	m.s-1				3E-08		2.78E-08	m.s-1

SOIL TO WATER TRANSFER

(D) RUNOFF(soilA1)	m.s-1		0.00E+00		0E+00		0.00E+00	m.s-1
(D) RUNOFF(soilA2)	m.s-1		0.00E+00		4E-12		3.65E-12	m.s-1
(D) RUNOFF(soilA3)	m.s-1		0.00E+00		4E-12		3.65E-12	m.s-1
(D) RUNOFF(soilB1)	m.s-1		0.00E+00		0E+00		0.00E+00	m.s-1
(D) RUNOFF(soilB2)	m.s-1		0.00E+00		4E-12		3.65E-12	m.s-1
(D) RUNOFF(soilB3)	m.s-1		0.00E+00		4E-12		3.65E-12	m.s-1
(A) FRACrum(soil1)	-				0		0.00E+00	-
(A) FRACrum(soil2)	-				0.5		5.00E-01	-
(A) FRACrum(soil3)	-				0.5		5.00E-01	-
(A) EROSION(soilA1)	mm.yr-1				0		0.00E+00	m3.s-1
(A) EROSION(soilA2)	mm.yr-1				0.1		3.17E-12	m3.s-1
(A) EROSION(soilA3)	mm.yr-1				0.1		3.17E-12	m3.s-1
(A) EROSION(soilB1)	mm.yr-1				0		0.00E+00	m3.s-1
(A) EROSION(soilB2)	mm.yr-1				0.1		3.17E-12	m3.s-1
(A) EROSION(soilB3)	mm.yr-1				0.1		3.17E-12	m3.s-1

TRANSPORT FROM SYSTEM

(D) BURIAL(sed1)	m.s-1		4.76E-12		5E-12		4.76E-12	m.s-1
(D) BURIAL(sed2)	m.s-1		3.17E-12		3E-12		3.17E-12	m.s-1
(D) BURIAL(sed3)	m.s-1		3.17E-12		3E-12		3.17E-12	m.s-1
(D) LEACH(soilA1)	m.s-1		3.86E-13		4E-13		3.86E-13	m.s-1
(D) LEACH(soilA2)	m.s-1		3.86E-13		4E-13		3.86E-13	m.s-1
(D) LEACH(soilA3)	m.s-1		3.86E-13		4E-13		3.86E-13	m.s-1
(D) LEACH(soilB1)	m.s-1		3.86E-13		4E-13		3.86E-13	m.s-1
(D) LEACH(soilB2)	m.s-1		3.86E-13		4E-13		3.86E-13	m.s-1
(D) LEACH(soilB3)	m.s-1		3.86E-13		4E-13		3.86E-13	m.s-1
(A) FRACinf(soil1)	-				4E-01		4.00E-01	m.s-1
(A) FRACinf(soil2)	-				4E-01		4.00E-01	m.s-1
(A) FRACinf(soil3)	-				4E-01		4.00E-01	m.s-1

Appendix C Voorbeeld steady-state resultatentabel 3scalbox

SYSTEM	EARTH	COMPOUND	HYPOTHETICAL	HALF LIFE degradation AIR ^a	1.76E+02 d.	DOCUMENTATION	
INNER SCALE		MOL WEIGHT	250 g.mol-1	HALF LIFE degradation WATER ^b	2.50E+03 d.		
SYSTEM AREA	5.0E+04 km2	KOW	1.0E+06 -	HALF LIFE degradation SEDIMENT ^c	2.42E+05 d.	MODEL : 3SCALBOX type 1.0	
RESIDENCE TIME AIR	4.6E-01 d	VAPOR PRESSURE	1.0E-03 Pa	HALF LIFE (atm. damp.)	9.03E+05 d.		
WATER AREA	5.0E+03 km2	SOLUBILITY	9.2E-02 mg.l-1	HALF LIFE (volat. water)	8.87E+00 d.	WORKER : Peter van der Burg	
RESIDENCE TIME WATER	5.0E+01 d	BIODEGRADABILITY	NO	HALF LIFE (sedimentation)	1.36E+01 d.		
AREA NATURAL SOIL	5.0E-08 km2	INNER SCALE PRODUCTION VOLUME	50 t.yr-1		3.80E+06 d.	FILE : RES1XXX.PRN	
AREA LOADED SOIL	4.5E+04 km2	MIDDLE SCALE PRODUCTION VOLUME	0 t.yr-1		3.03E+00 d.	DATE/TIME : 01-Mar-94 14:30:22	
		OUTER SCALE PRODUCTION VOLUME	0 t.yr-1				
MIDDLE SCALE				DISPERSION from INNER to MIDDLE	92.64 %		
SYSTEM AREA	5.0E+06 km2	EMISSION FACTOR AIR	0.00 %	DISPERSION from MIDDLE to OUTER	82.96 %		
RESIDENCE TIME AIR	4.6E+00 d	EMISSION FACTOR WATER	100.00 %			FLUX UNITS : 2	
WATER AREA	2.5E+05 km2	EMISSION FACTOR SOIL	0.00 %	ENVIRONMENTAL PERSISTENCE (t=5 y.):			
RESIDENCE TIME WATER	2.5E+02 d	HWTP to AIR	0.00 %	- INNER SCALE	69.02 %	Conversion : 1 mol.s-1 = 6.34E-06 (% of throughput)	
AREA NATURAL SOIL	5.0E-06 km2	HWTP to WATER	100.00 %	- MIDDLE SCALE	102.82 %	--> 1: 1 mol.s-1 ~ 1.00E+00 mol.e-1	
AREA LOADED SOIL	4.8E+06 km2	HWTP to SLUDGE	0.00 %	- OUTER SCALE	104.36 %	--> 2: 1 s ~ 1.58E+05 mol.e-1	
				- TOTAL	93.97 %	--> 3: 1 t.y-1 ~ 7.88E+03 mol.e-1	
OUTER SCALE						--> 4: 1 kg.d-1 ~ 2.16E+04 mol.e-1	
SYSTEM AREA	5.0E+08 km2	HENRY'S LAW CONSTANT	2.7E+00 -				
RESIDENCE TIME AIR	1.0E+10 d	Kf (sediment)	30000 l.kg-1				
AIR BACKGROUND	n.a. g.m-3	Kf (natural soil)	20000 l.kg-1				
WATER AREA	3.5E+08 km2	Kf (loaded soil)	20000 l.kg-1				
RESIDENCE TIME WATER	1.0E+10 d						
WATER BACKGROUND	n.a. g.l-1						
AREA NATURAL SOIL	5.0E-04 km2						
AREA LOADED SOIL	1.5E+08 km2						

		INNER SCALE		MIDDLE SCALE		OUTER SCALE	
		Air Water Sed. Soils SoilB Total		Air Water Sed Soils SoilB Total		Air Water Sed Soils SoilB Total	
STATE	[mol/m3]	3.7E-13 4.9E-08 1.2E-03 0.5E-05 0.5E-05		4.1E-14 4.3E-10 1.1E-05 3.8E-06 3.8E-06		1.7E-15 2.0E-12 4.8E-08 1.5E-07 1.5E-07	
Concentration	[...]	9.3E-11 1.2E-08 6.1E-04 1.7E-05 1.7E-05		1.0E-11 1.1E-10 5.3E-06 7.5E-07 7.5E-07		4.2E-13 4.9E-13 2.4E-08 3.0E-09 3.0E-09	
Pugacity	[Pa]	0.8E-10 1.3E-07 1.3E-07 9.2E-09 9.2E-09		9.8E-11 1.2E-09 1.2E-09 4.1E-10 4.1E-10		4.0E-12 5.4E-12 5.2E-12 1.6E-11 1.6E-11	
Boil-up	[t]	4.7E-03 1.8E-01 4.6E+01 2.1E-10 1.9E+02	2.4E+02	5.2E-02 1.3E-01 2.0E+01 9.4E-10 9.4E-10	9.1E+02	2.1E-01 1.7E+01 1.3E+02 3.8E-09 1.1E+03	
Distribution	(d)	0.0 0.1 19.4 0.0 80.5	9.7	0.0 0.0 2.2 0.0 97.8	37.6	0.0 1.3 9.8 0.0 88.8	
Residence time	(d)		2.0E+13		2.5E+15		1.4E+1
FATE [% of throughput]							
Emission		8.04E-35 4.02E-09		8.04E-35 4.02E-09	8.04E-35 2.41E-34	8.04E-35 8.04E-35	8.04E-35 2.41E-34
% of throughput		0.0 100.0	0.0	0.0 0.0	0.0 0.0	0.0 0.0	0.0 0.0
Background influx					0.00E+00 0.00E+00	0.00E+00 0.00E+00	0.00E+00 0.00E+00
% of throughput					0.0 0.0	0.0 0.0	0.0 0.0
Accumulation			1.05E-10 1.04E-23 9.32E-12 1.94E-10	5.38E-11 4.60E-23 4.37E-11 9.75E-11	9.75E-11 3.37E-10 1.85E-22 5.56E-11 3.92E-11	3.92E-11 8.4E-06 0.0 1.4E-08 1.4E-08	
% of throughput		4.6 0.0 0.2 4.8	4.8	1.3 0.0 1.1 2.4	2.4 2.4 2.4 2.4	2.4 2.4 2.4 2.4	2.4 2.4 2.4 2.4
Transformation		5.39E-12 1.50E-11 3.06E-11 4.77E-23 4.29E-11 1.02E-10	5.99E-11 1.37E-11 1.69E-11 2.12E-22 2.01E-10 2.92E-10	2.41E-10 2.34E-09 1.06E-10 0.54E-22 2.86E-10 2.94E-10	2.94E-10 2.94E-10 2.94E-10 2.94E-10 2.94E-10 2.94E-10	2.94E-10 2.94E-10 2.94E-10 2.94E-10 2.94E-10 2.94E-10	
% of throughput		0.1 0.4 1.0 0.0 1.1 2.5	1.5 0.3 0.4 0.0 5.0 7.3	6.0 6.0 6.0 6.0 6.0 6.0	6.0 6		

Appendix D Persistenties in tabelvorm

Hieronder zijn de verkregen persistenties [%] voor de 13 waarden van de halfwaardetijd in matrixvorm gegeven. De met grijs aangegeven rij bevat de waarden voor de K_{ow} en de met grijs aangegeven kolom bevat de waarden voor de dampdruk [Pa].

* halfwaardetijd = 10^{-1} dag (PERSIS_C.XLS) :

	3	3.33	3.67	4	4.33	4.67	5	5.33	5.67	6	6.33	6.67	7	7.33	7.67
-7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.45	8.47	31.88
-6.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.45	8.47	31.88
-6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.45	8.48	31.89
-5.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.47	8.49	31.90
-5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.51	8.55	31.93
-4.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.63	8.68	32.01
-4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.14	0.88	8.94	32.11
-3.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.26	1.19	9.12	32.13
-3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.32	1.22	9.03	32.06
-2.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.27	1.03	8.85	31.98
-2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.20	0.87	8.71	31.92
-1.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.16	0.77	8.59	31.86
-1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.14	0.69	8.50	31.82
-0.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.14	0.63	8.44	31.80
0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.13	0.57	8.40	31.79
0.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.08	0.49	8.36	31.78
1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	0.03	0.44	8.35	31.77
1.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	0.03	0.01	0.43	8.34	31.77
2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.03	0.04	0.03	0.01	0.42	8.34	31.77
2.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	0.03	0.04	0.04	0.03	0.01	0.42	8.34	31.77
3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	0.03	0.04	0.04	0.04	0.03	0.01	0.42	8.34	31.77
3.5	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.01	0.42	8.34	31.77
4	0.00	0.02	0.03	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.01	0.42	8.34	31.77
4.5	0.02	0.03	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.01	0.42	8.34	31.77
5	0.03	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.01	0.42	8.34	31.77

* halfwaardetijd = $5.5 \cdot 10^{-1}$ dag (PERSIS_D.XLS) :

	3	3.33	3.67	4	4.33	4.67	5	5.33	5.67	6	6.33	6.67	7	7.33	7.67
-7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.70	10.55	36.35	62.54	79.66
-6.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.70	10.56	36.36	62.54	79.66
-6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.72	10.58	36.37	62.54	79.66
-5.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.77	10.64	36.41	62.56	79.66
-5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	0.91	10.83	36.54	62.61	79.68
-4.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.20	1.33	11.37	36.89	62.74	79.71
-4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.52	2.33	12.62	37.63	62.96	79.74
-3.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	1.02	3.87	14.32	38.33	63.03	79.72
-3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.09	1.43	4.93	14.83	37.95	62.75	79.65
-2.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.10	1.51	4.71	13.58	36.86	62.42	79.59
-2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08	1.27	3.70	12.11	36.05	62.19	79.53
-1.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.94	2.92	11.25	35.51	61.99	79.48
-1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.74	2.64	10.75	35.09	61.84	79.44
-0.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.69	2.58	10.31	34.76	61.75	79.42
0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.64	2.28	9.70	34.46	61.68	79.41
0.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.47	1.46	8.97	34.26	61.65	79.40
1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.19	0.65	8.56	34.18	61.64	79.40
1.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.05	0.43	8.48	34.18	61.64	79.40
2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	0.04	0.04	0.41	8.48	34.18	61.64	79.40
2.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	0.04	0.04	0.04	0.41	8.48	34.18	61.64	79.40
3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.41	8.48	34.18	61.64	79.40
3.5	0.00	0.00	0.01	0.03	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.41	8.48	34.18	61.64	79.40
4	0.00	0.02	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.41	8.48	34.18	61.64	79.40
4.5	0.02	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.41	8.48	34.18	61.64	79.40
5	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.41	8.48	34.18	61.64	79.40

* halfwaardetijd = 10^0 dag (PERSIS_E.XLS) :

	3	3.33	3.67	4	4.33	4.67	5	5.33	5.67	6	6.33	6.67	7	7.33	7.67
-7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.24	5.96	28.41	56.63	76.43	87.34
-6.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.24	5.97	28.42	56.64	76.43	87.34
-6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.26	6.00	28.44	56.65	76.43	87.34
-5.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.31	6.09	28.52	56.69	76.44	87.34
-5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.47	6.37	28.75	56.79	76.47	87.35
-4.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.15	0.93	7.16	29.42	57.09	76.55	87.36
-4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.38	2.03	9.02	30.89	57.67	76.67	87.38
-3.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.76	3.76	11.80	32.72	58.09	76.64	87.36
-3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	1.09	5.13	13.49	32.75	57.41	76.36	87.31
-2.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	1.20	5.39	12.66	30.45	56.12	76.05	87.25
-2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	1.10	4.62	10.44	28.06	55.21	75.84	87.20
-1.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.84	3.56	8.76	26.67	54.61	75.65	87.14
-1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.60	2.97	8.07	25.82	54.14	75.51	87.10
-0.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.48	2.84	7.72	25.04	53.77	75.42	87.08
0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.42	2.58	6.77	24.06	53.47	75.36	87.07
0.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.32	1.70	4.99	23.14	53.29	75.34	87.07
1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.16	0.55	3.61	22.73	53.23	75.33	87.07
1.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	0.14	3.31	22.67	53.23	75.33	87.07
2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	0.04	0.11	3.29	22.67	53.23	75.33	87.07
2.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	0.04	0.04	0.11	3.29	22.67	53.23	75.33	87.07
3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	0.04	0.04	0.04	0.10	3.29	22.67	53.23	75.33	87.07
3.5	0.00	0.00	0.01	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	3.29	22.67	53.23	75.33	87.07
4	0.01	0.02	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	3.29	22.67	53.23	75.33	87.07
4.5	0.02	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	3.29	22.67	53.23	75.33	87.07
5	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	3.29	22.67	53.23	75.33	87.07

* halfwaardetijd = $5.5 \cdot 10^0$ dag (PERSIS_F.XLS) :

	3	3.33	3.67	4	4.33	4.67	5	5.33	5.67	6	6.33	6.67	7	7.33	7.67
-7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.43	6.49	27.69	56.79	77.68	88.47	93.48	95.76
-6.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.44	6.51	27.71	56.80	77.67	88.47	93.48	95.77
-6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.47	6.57	27.78	56.84	77.68	88.47	93.48	95.77
-5.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.56	6.76	27.99	56.95	77.72	88.48	93.48	95.78
-5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08	0.83	7.35	28.64	57.29	77.83	88.51	93.48	95.77
-4.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.23	1.63	9.01	30.43	58.23	78.09	88.56	93.50	95.78
-4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.62	3.53	12.84	34.38	60.22	78.58	88.61	93.50	95.78
-3.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	1.32	6.59	18.48	39.61	62.29	78.59	88.31	93.41	95.77
-3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08	2.03	9.24	22.66	42.03	61.14	76.38	87.24	93.19	95.75
-2.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.10	2.37	10.32	23.53	39.68	55.55	72.25	85.99	92.97	95.71
-2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.10	2.31	10.00	21.73	34.44	48.77	68.76	85.11	92.75	95.64
-1.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08	1.91	8.57	18.51	29.37	44.19	66.65	84.44	92.51	95.57
-1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	1.38	6.79	15.82	26.63	41.68	65.11	83.86	92.32	95.51
-0.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.99	5.61	14.49	24.97	39.22	63.67	83.45	92.21	95.49
0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.77	4.73	12.39	20.74	35.17	62.31	83.19	92.15	95.47
0.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.56	3.23	7.57	13.56	31.15	61.47	83.07	92.13	95.47
1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.26	1.16	2.58	8.75	29.46	61.21	83.04	92.13	95.47
1.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.15	0.99	7.72	29.20	61.18	83.03	92.13	95.47
2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.07	0.89	7.68	29.20	61.18	83.03	92.13	95.47
2.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.04	0.07	0.88	7.69	29.21	61.18	83.03	92.13	95.47
3	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.04	0.04	0.07	0.88	7.69	29.21	61.18	83.03	92.13	95.47
3.5	0.00	0.01	0.02	0.03	0.04	0.04	0.04	0.07	0.88	7.69	29.21	61.18	83.03	92.13	95.47
4	0.01	0.02	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.88	7.69	29.21	61.18	83.03	92.13	95.47
4.5	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.88	7.69	29.21	61.18	83.03	92.13	95.47
5	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.88	7.69	29.21	61.18	83.03	92.13	95.47

* halfwaardetijd = 10^1 dag (PERSIS_G.XLS) :

	3	3.33	3.67	4	4.33	4.67	5	5.33	5.67	6	6.33	6.67	7	7.33	7.67
-7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.16	3.72	19.51	47.25	72.00	86.07	92.54	95.39	96.66
-6.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.17	3.74	19.54	47.27	72.01	86.08	92.54	95.39	96.66
-6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.19	3.80	19.62	47.33	72.04	86.08	92.54	95.39	96.67
-5.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.25	3.98	19.89	47.53	72.11	86.10	92.55	95.39
-5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.45	4.54	20.71	48.14	72.34	86.15	92.56	95.39
-4.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.10	1.03	6.14	23.00	49.83	72.96	86.30	92.59	95.41
-4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.29	2.47	15.59	28.07	53.38	74.20	86.48	92.58	95.41
-3.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.68	3.00	15.59	34.95	57.53	74.99	85.99	92.23	95.33	96.67
-3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	1.16	7.44	20.19	39.16	53.59	72.43	83.42	91.23	94.97	96.66
-2.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	1.46	8.56	21.74	38.74	53.59	65.86	79.30	90.10	94.97	96.61
-2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	1.46	8.35	20.74	35.28	46.86	58.81	75.96	89.24	94.74	96.55
-1.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	1.19	7.05	18.01	27.19	41.14	54.13	73.76	88.46	94.46	96.47
-1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.81	5.30	14.92	27.19	37.95	51.11	71.89	87.75	94.22	96.41
-0.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.53	4.09	13.02	25.20	35.23	47.73	70.17	87.26	94.04	96.38
0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.40	3.41	11.19	20.96	28.70	42.78	68.71	86.98	94.04	96.37
0.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.30	2.47	7.23	4.78	19.21	38.43	67.89	86.86	94.01	96.36
1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.16	1.02	2.38	4.78	13.78	36.77	67.64	86.83	94.01	96.36
1.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.14	0.41	2.69	12.73	36.52	67.61	86.82	94.01	96.36
2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	0.26	2.57	12.69	36.52	67.61	86.82	94.01	96.36
2.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.04	0.25	2.56	12.70	36.52	67.61	86.82	94.01	96.36
3	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.25	2.56	12.70	36.53	67.61	86.82	94.01	96.36
3.5	0.00	0.01	0.02	0.03	0.04	0.04	0.05	0.25	2.56	12.70	36.53	67.61	86.82	94.01	96.36
4	0.01	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.05	0.25	2.56	12.70	36.53	67.61	86.82	94.01	96.36
4.5	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.05	0.25	2.56	12.70	36.53	67.61	86.82	94.01	96.36
5	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.05	0.25	2.56	12.70	36.53	67.61	86.82	94.01	96.36

* halfwaardetijd = $5.5 \cdot 10^1$ dag (PERSIS_H.XLS) :

	3	3.33	3.67	4	4.33	4.67	5	5.33	5.67	6	6.33	6.67	7	7.33	7.67
-7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.24	4.42	19.33	43.03	66.88	83.51	92.03	95.52	96.84	97.34	97.55
-6.5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.24	4.44	19.36	43.07	66.90	83.51	92.03	95.51	96.84	97.34	97.56
-6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.26	4.49	19.47	43.18	66.97	83.53	92.04	95.51	96.84	97.34	97.56
-5.5	0.00	0.00	0.00	0.01	0.30	4.66	19.79	43.51	67.16	83.60	92.05	95.53	96.84	97.34	97.56
-5	0.00	0.00	0.00	0.02	0.43	5.19	20.78	44.54	67.76	83.81	92.10	95.53	96.85	97.35	97.56
-4.5	0.00	0.00	0.00	0.05	0.83	6.74	23.57	47.32	69.36	84.34	92.19	95.54	96.86	97.36	97.57
-4	0.00	0.00	0.00	0.14	1.96	10.72	29.96	53.15	72.53	85.26	92.20	95.46	96.86	97.37	97.57
-3.5	0.00	0.00	0.01	0.41	4.63	18.04	39.27	60.22	75.57	85.18	91.08	94.74	96.69	97.37	97.57
-3	0.00	0.00	0.02	1.02	8.67	25.47	45.95	63.24	74.46	81.40	87.14	92.68	96.20	97.29	97.56
-2.5	0.00	0.00	0.04	1.82	11.69	28.65	46.72	60.53	68.83	74.60	81.56	89.98	95.51	97.15	97.52
-2	0.00	0.00	0.07	2.27	11.95	26.92	42.50	54.65	62.66	69.06	77.17	87.46	94.57	96.88	97.45
-1.5	0.00	0.00	0.08	2.03	9.55	21.30	35.23	48.24	58.36	65.65	73.22	84.41	93.28	96.50	97.37
-1	0.00	0.00	0.06	1.32	6.05	14.81	28.45	43.93	55.74	61.89	67.70	80.80	92.08	96.20	97.30
-0.5	0.00	0.00	0.03	0.70	3.64	11.12	25.56	41.87	51.99	55.13	60.64	77.88	91.36	96.04	97.27
0	0.00	0.00	0.02	0.40	2.73	10.15	23.59	35.82	41.44	42.99	53.17	75.97	91.00	95.96	97.25
0.5	0.00	0.00	0.01	0.30	2.43	8.38	15.94	20.88	23.45	29.17	47.90	75.05	90.86	95.94	97.25
1	0.00	0.00	0.01	0.22	1.48	3.72	5.53	7.23	11.41	22.61	46.09	74.79	90.82	95.93	97.25
1.5	0.00	0.00	0.00	0.07	0.30	0.55	1.07	2.97	8.49	21.34	45.77	74.74	90.81	95.93	97.25
2	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.12	0.62	2.58	8.24	21.23	45.74	74.73	90.81	95.93	97.25
2.5	0.00	0.00	0.01	0.03	0.04	0.10	0.58	2.53	8.19	21.21	45.73	74.72	90.81	95.93	97.25
3	0.00	0.01	0.03	0.04	0.04	0.10	0.57	2.52	8.18	21.21	45.73	74.72	90.81	95.93	97.25
3.5	0.02	0.03	0.04	0.04	0.04	0.10	0.57	2.51	8.18	21.21	45.73	74.72	90.81	95.93	97.25
4	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.57	2.51	8.18	21.21	45.73	74.72	90.81	95.93	97.25
4.5	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.57	2.51	8.18	21.21	45.73	74.72	90.81	95.93	97.25
5	0.04	0.04	0.04	0.04	0.05	0.10	0.57	2.51	8.18	21.21	45.73	74.72	90.81	95.93	97.25

* halfwaardetijd = 10^2 dag (PERSIS_I.XLS) :

	3	3.33	3.67	4	4.33	4.67	5	5.33	5.67	6	6.33	6.67	7	7.33	7.67
-7	0.00	0.00	0.00	0.07	2.16	13.18	34.04	57.68	76.99	88.87	94.45	96.56	97.28	97.54	97.65
-6.5	0.00	0.00	0.00	0.07	2.16	13.20	34.08	57.71	77.01	88.88	94.45	96.55	97.28	97.55	97.65
-6	0.00	0.00	0.00	0.07	2.19	13.28	34.19	57.80	77.05	88.89	94.45	96.56	97.28	97.54	97.65
-5.5	0.00	0.00	0.00	0.09	2.28	13.54	34.54	58.08	77.19	88.94	94.46	96.56	97.28	97.55	97.66
-5	0.00	0.00	0.00	0.13	2.57	14.32	35.63	58.94	77.60	89.06	94.48	96.57	97.29	97.55	97.65
-4.5	0.00	0.00	0.01	0.26	3.43	16.60	38.63	61.26	78.71	89.38	94.53	96.57	97.31	97.56	97.66
-4	0.00	0.00	0.03	0.66	5.84	22.26	45.27	65.98	80.81	89.80	94.42	96.51	97.32	97.58	97.66
-3.5	0.00	0.00	0.09	1.77	11.27	31.97	54.27	71.26	82.30	89.00	93.24	95.96	97.23	97.58	97.66
-3	0.00	0.00	0.25	4.12	18.88	40.81	59.72	72.28	79.76	84.81	89.72	94.39	96.89	97.53	97.66
-2.5	0.00	0.01	0.59	7.05	23.91	43.50	58.53	67.70	73.43	78.70	85.35	92.30	96.31	97.39	97.62
-2	0.00	0.01	0.97	8.40	23.54	39.54	51.92	60.58	67.75	74.58	81.89	89.88	95.33	97.11	97.55
-1.5	0.00	0.02	1.05	7.21	18.25	30.65	42.75	54.27	64.54	71.74	77.67	86.32	93.89	96.72	97.46
-1	0.00	0.02	0.77	4.53	11.45	21.74	35.83	50.99	62.21	67.21	70.94	82.08	92.56	96.40	97.39
-0.5	0.00	0.01	0.40	2.41	7.21	17.50	33.85	49.31	57.61	58.95	62.68	78.80	91.79	96.24	97.36
0	0.00	0.01	0.20	1.48	5.91	16.78	31.63	42.11	45.57	45.46	54.56	76.78	91.42	96.17	97.35
0.5	0.00	0.00	0.13	1.23	5.49	13.54	20.89	24.43	25.82	30.76	49.05	75.83	91.27	96.14	97.34
1	0.00	0.00	0.10	0.95	3.25	5.73	7.23	8.76	12.86	23.89	47.17	75.55	91.23	96.13	97.34
1.5	0.00	0.00	0.05	0.30	0.64	0.95	1.69	3.93	9.67	22.53	46.83	75.50	91.22	96.13	97.34
2	0.00	0.00	0.02	0.05	0.09	0.28	1.07	3.42	9.34	22.38	46.79	75.49	91.22	96.13	97.34
2.5	0.01	0.01	0.03	0.04	0.06	0.24	1.00	3.33	9.27	22.35	46.78	75.49	91.22	96.13	97.34
3	0.02	0.03	0.04	0.04	0.06	0.22	0.98	3.30	9.25	22.35	46.77	75.48	91.22	96.13	97.34
3.5	0.03	0.04	0.04	0.04	0.06	0.22	0.97	3.29	9.24	22.34	46.77	75.48	91.22	96.13	97.34
4	0.04	0.04	0.04	0.04	0.06	0.22	0.97	3.29	9.24	22.34	46.77	75.48	91.22	96.13	97.34
4.5	0.04	0.04	0.04	0.04	0.06	0.22	0.97	3.29	9.24	22.34	46.77	75.48	91.22	96.13	97.34
5	0.04	0.04	0.04	0.04	0.06	0.22	0.97	3.29	9.24	22.34	46.77	75.48	91.22	96.13	97.34

* halfwaardetijd = $5.5 \cdot 10^2$ dag (PERSIS_J.XLS) :

	3	3.33	3.67	4	4.33	4.67	5	5.33	5.67	6	6.33	6.67	7	7.33	7.67
-7	9.95	10.00	10.81	15.37	27.76	46.60	65.62	80.56	90.29	95.32	97.17	97.63	97.73	97.73	97.74
-6.5	9.95	10.00	10.81	15.38	27.78	46.62	65.64	80.57	90.29	95.32	97.18	97.64	97.73	97.74	97.74
-6	9.95	10.00	10.81	15.40	27.83	46.70	65.71	80.62	90.31	95.33	97.18	97.64	97.73	97.73	97.74
-5.5	9.95	10.00	10.82	15.45	28.00	46.94	65.92	80.75	90.36	95.35	97.18	97.64	97.73	97.74	97.75
-5	9.95	10.00	10.85	15.62	28.50	47.69	66.58	81.14	90.53	95.39	97.20	97.65	97.74	97.74	97.74
-4.5	9.95	10.01	10.94	16.15	30.02	49.84	68.39	82.18	90.93	95.48	97.23	97.67	97.76	97.75	97.76
-4	9.95	10.03	11.23	17.73	34.12	54.99	72.30	84.22	91.55	95.48	97.19	97.72	97.80	97.78	97.77
-3.5	9.95	10.11	12.09	21.88	42.60	63.15	77.13	85.83	91.12	94.49	96.65	97.63	97.83	97.79	97.76
-3	9.94	10.33	14.33	29.88	52.81	69.04	78.13	83.59	87.78	91.79	95.19	97.11	97.70	97.75	97.75
-2.5	9.91	10.91	18.58	38.19	57.23	67.36	72.50	77.28	83.21	88.99	93.25	95.91	97.24	97.62	97.72
-2	9.83	11.98	22.65	39.99	52.41	58.02	63.09	71.21	80.05	86.46	90.23	93.36	96.19	97.33	97.64
-1.5	9.71	12.89	22.53	33.81	41.13	46.69	55.69	67.43	77.09	82.19	84.34	88.79	94.55	96.93	97.55
-1	9.67	12.61	18.55	24.93	31.19	39.75	52.10	64.61	72.62	74.78	75.19	83.55	93.07	96.60	97.49
-0.5	9.82	11.58	14.65	19.08	26.20	37.29	50.65	61.08	65.32	63.83	65.11	79.79	92.23	96.43	97.45
0	9.88	10.61	12.20	15.88	23.75	35.52	46.14	51.31	50.97	48.44	56.09	77.60	91.83	96.35	97.44
0.5	9.55	9.40	9.82	12.60	19.16	26.24	29.86	29.93	29.00	32.61	50.27	76.60	91.68	96.33	97.44
1	8.40	7.05	6.20	7.36	9.48	10.62	10.80	11.37	14.75	25.31	48.29	76.31	91.64	96.32	97.43
1.5	5.80	3.47	2.23	2.01	2.09	2.37	3.21	5.46	11.11	23.80	47.92	76.25	91.63	96.32	97.43
2	2.42	0.89	0.39	0.33	0.51	0.99	2.08	4.63	10.63	23.60	47.86	76.24	91.62	96.32	97.43
2.5	0.57	0.20	0.11	0.14	0.31	0.76	1.84	4.44	10.51	23.56	47.85	76.24	91.62	96.32	97.43
3	0.15	0.08	0.06	0.10	0.25	0.69	1.77	4.38	10.47	23.54	47.85	76.24	91.62	96.32	97.43
3.5	0.07	0.05	0.05	0.08	0.23	0.66	1.75	4.36	10.46	23.54	47.84	76.24	91.62	96.32	97.43
4	0.05	0.05	0.05	0.08	0.23	0.66	1.74	4.35	10.46	23.54	47.84	76.24	91.62	96.32	97.43
4.5	0.05	0.04	0.05	0.08	0.22	0.66	1.74	4.35	10.46	23.54	47.84	76.24	91.62	96.32	97.43
5	0.04	0.04	0.05	0.08	0.22	0.65	1.74	4.35	10.46	23.54	47.84	76.24	91.62	96.32	97.43

* halfwaardetijd = 10^3 dag (PERSIS_K.XLS) :

	3	3.33	3.67	4	4.33	4.67	5	5.33	5.67	6	6.33	6.67	7	7.33	7.67
-7	28.04	28.18	29.32	33.66	43.50	57.96	72.85	84.76	92.50	96.30	97.52	97.75	97.77	97.75	97.74
-6.5	28.04	28.18	29.32	33.67	43.52	57.98	72.87	84.77	92.50	96.31	97.52	97.75	97.78	97.75	97.74
-6	28.04	28.18	29.33	33.68	43.55	58.03	72.91	84.81	92.52	96.31	97.53	97.75	97.78	97.75	97.74
-5.5	28.04	28.19	29.33	33.73	43.67	58.20	73.07	84.90	92.56	96.32	97.53	97.76	97.78	97.75	97.75
-5	28.04	28.19	29.36	33.86	44.03	58.73	73.55	85.19	92.68	96.36	97.55	97.77	97.79	97.76	97.74
-4.5	28.04	28.19	29.45	34.28	45.12	60.25	74.86	85.96	92.99	96.44	97.58	97.80	97.81	97.77	97.76
-4	28.03	28.22	29.71	35.53	48.09	63.97	77.74	87.47	93.42	96.45	97.61	97.87	97.86	97.79	97.77
-3.5	28.02	28.30	30.48	38.83	54.40	70.04	81.28	88.50	92.96	95.76	97.32	97.86	97.90	97.81	97.76
-3	28.00	28.51	32.49	45.34	62.19	74.32	81.53	86.30	90.31	93.87	96.34	97.50	97.79	97.77	97.75
-2.5	27.93	29.08	36.29	51.91	65.30	72.19	76.37	81.26	86.99	91.75	94.70	96.41	97.35	97.64	97.72
-2	27.76	30.14	39.85	53.05	60.75	64.27	69.12	76.70	84.13	88.99	91.53	93.80	96.29	97.35	97.64
-1.5	27.47	31.00	39.57	47.63	51.86	56.06	63.55	72.75	80.13	83.90	85.23	89.08	94.62	96.94	97.55
-1	27.34	30.69	35.89	40.47	44.51	50.39	58.97	68.07	74.31	75.76	75.70	83.72	93.12	96.61	97.49
-0.5	27.51	29.51	32.08	35.06	39.08	45.62	54.76	62.94	66.29	64.40	65.38	79.89	92.28	96.44	97.45
0	27.42	27.87	28.33	29.39	32.85	40.39	48.55	52.53	51.61	48.78	56.26	77.69	91.88	96.37	97.44
0.5	26.24	24.58	22.01	20.69	23.77	28.86	31.30	30.69	29.39	32.82	50.40	76.69	91.73	96.34	97.44
1	22.54	17.46	12.12	10.29	11.17	11.70	11.46	11.74	14.98	25.46	48.41	76.39	91.68	96.33	97.43
1.5	14.37	7.52	3.67	2.69	2.58	2.77	3.51	5.67	11.28	23.93	48.03	76.33	91.67	96.33	97.43
2	5.20	1.56	0.59	0.49	0.69	1.17	2.25	4.78	10.77	23.73	47.97	76.32	91.67	96.33	97.43
2.5	0.95	0.27	0.15	0.21	0.41	0.88	1.97	4.57	10.64	23.68	47.96	76.32	91.67	96.33	97.43
3	0.19	0.09	0.08	0.14	0.32	0.78	1.89	4.51	10.61	23.67	47.96	76.32	91.67	96.33	97.43
3.5	0.08	0.06	0.06	0.11	0.29	0.76	1.86	4.49	10.59	23.66	47.96	76.32	91.67	96.33	97.43
4	0.05	0.05	0.05	0.11	0.28	0.75	1.85	4.48	10.59	23.66	47.95	76.32	91.67	96.33	97.43
4.5	0.05	0.04	0.05	0.10	0.28	0.74	1.85	4.48	10.59	23.66	47.96	76.32	91.67	96.33	97.43
5	0.04	0.04	0.05	0.10	0.28	0.74	1.85	4.48	10.59	23.66	47.95	76.32	91.67	96.33	97.43

* halfwaardetijd = $5.5 \cdot 10^3$ dag (PERSIS_L.XLS) :

	3	3.33	3.67	4	4.33	4.67	5	5.33	5.67	6	6.33	6.67	7	7.33	7.67
-7	79.40	79.54	79.94	80.90	82.79	85.82	89.83	93.87	96.65	97.75	97.91	97.87	97.81	97.78	97.75
-6.5	79.40	79.54	79.94	80.90	82.79	85.83	89.83	93.88	96.65	97.75	97.91	97.86	97.81	97.78	97.75
-6	79.40	79.54	79.94	80.91	82.79	85.84	89.85	93.89	96.66	97.75	97.91	97.86	97.81	97.78	97.76
-5.5	79.40	79.54	79.94	80.91	82.81	85.86	89.88	93.92	96.68	97.76	97.92	97.88	97.82	97.78	97.76
-5	79.40	79.54	79.95	80.93	82.86	85.96	90.00	94.02	96.73	97.79	97.94	97.89	97.83	97.79	97.76
-4.5	79.40	79.54	79.96	80.98	83.01	86.24	90.34	94.29	96.88	97.87	98.00	97.93	97.85	97.80	97.77
-4	79.40	79.54	79.99	81.15	83.44	86.95	91.11	94.80	97.09	97.98	98.11	98.01	97.90	97.83	97.78
-3.5	79.38	79.53	80.09	81.60	84.45	88.27	92.10	95.12	97.01	97.92	98.17	98.11	97.95	97.84	97.77
-3	79.35	79.52	80.34	82.56	85.92	89.24	92.00	94.28	96.11	97.28	97.80	97.93	97.88	97.81	97.76
-2.5	79.25	79.48	80.84	83.69	86.48	88.44	90.27	92.43	94.43	95.74	96.43	96.94	97.45	97.68	97.73
-2	79.00	79.39	81.30	83.76	85.21	86.17	87.51	89.27	91.03	92.29	92.99	94.28	96.38	97.39	97.66
-1.5	78.55	79.24	81.05	82.38	82.68	82.50	82.28	82.86	84.54	85.90	86.18	89.38	94.68	96.98	97.57
-1	78.14	78.93	79.84	79.68	77.98	74.85	72.29	73.31	76.34	76.81	76.22	83.88	93.17	96.65	97.50
-0.5	77.87	77.90	76.93	73.70	67.57	61.30	60.81	65.11	67.32	64.98	65.66	80.00	92.31	96.48	97.47
0	76.73	74.52	69.30	59.91	49.83	47.37	51.35	53.83	52.28	49.13	56.42	77.77	91.91	96.40	97.46
0.5	72.54	64.96	51.59	36.86	30.80	32.15	32.95	31.50	29.79	33.02	50.52	76.77	91.76	96.37	97.45
1	60.87	43.79	24.86	15.26	13.62	13.13	12.24	12.15	15.21	25.61	48.52	76.47	91.71	96.36	97.45
1.5	36.93	16.56	6.34	3.87	3.40	3.33	3.85	5.90	11.44	24.06	48.14	76.41	91.70	96.36	97.45
2	11.31	2.83	1.00	0.84	1.01	1.43	2.44	4.95	10.91	23.86	48.08	76.40	91.70	96.36	97.45
2.5	1.60	0.40	0.27	0.35	0.56	1.03	2.12	4.71	10.78	23.81	48.07	76.40	91.70	96.36	97.45
3	0.25	0.12	0.13	0.21	0.42	0.90	2.02	4.64	10.74	23.79	48.06	76.40	91.70	96.36	97.45
3.5	0.08	0.07	0.09	0.17	0.38	0.86	1.98	4.62	10.73	23.79	48.06	76.40	91.70	96.36	97.45
4	0.05	0.05	0.07	0.15	0.36	0.85	1.97	4.61	10.72	23.78	48.06	76.40	91.70	96.36	97.45
4.5	0.05	0.05	0.07	0.15	0.36	0.85	1.97	4.61	10.72	23.78	48.06	76.40	91.70	96.36	97.45
5	0.04	0.05	0.07	0.15	0.36	0.84	1.97	4.61	10.72	23.78	48.06	76.40	91.70	96.36	97.45

* halfwaardetijd = 10^4 dag (PERSIS_M.XLS) :

	3	3.33	3.67	4	4.33	4.67	5	5.33	5.67	6	6.33	6.67	7	7.33	7.67
-7	88.14	88.23	88.45	88.94	89.88	91.42	93.56	95.84	97.41	97.95	97.96	97.88	97.83	97.78	97.75
-6.5	88.14	88.23	88.45	88.94	89.88	91.42	93.56	95.84	97.41	97.95	97.96	97.87	97.82	97.78	97.75
-6	88.14	88.23	88.45	88.94	89.88	91.42	93.57	95.85	97.41	97.95	97.96	97.88	97.83	97.78	97.76
-5.5	88.15	88.23	88.45	88.94	89.89	91.44	93.59	95.87	97.42	97.96	97.97	97.88	97.83	97.78	97.76
-5	88.14	88.23	88.45	88.95	89.91	91.49	93.66	95.94	97.47	97.99	97.99	97.89	97.84	97.79	97.76
-4.5	88.14	88.23	88.45	88.97	89.98	91.62	93.85	96.11	97.58	98.07	98.05	97.93	97.86	97.80	97.77
-4	88.14	88.22	88.46	89.04	90.18	91.99	94.29	96.45	97.77	98.20	98.17	98.02	97.92	97.83	97.78
-3.5	88.13	88.21	88.48	89.22	90.64	92.66	94.85	96.66	97.77	98.23	98.28	98.13	97.97	97.84	97.77
-3	88.09	88.17	88.55	89.61	91.32	93.14	94.74	96.09	97.13	97.74	97.98	97.97	97.89	97.81	97.76
-2.5	88.00	88.05	88.66	90.06	91.52	92.58	93.50	94.58	95.57	96.25	96.63	97.00	97.47	97.68	97.73
-2	87.76	87.83	88.71	89.97	90.66	90.87	91.01	91.33	91.98	92.68	93.14	94.32	96.39	97.39	97.66
-1.5	87.33	87.54	88.43	88.97	88.56	87.23	85.34	84.33	85.10	86.11	86.28	89.41	94.70	96.98	97.57
-1	86.90	87.19	87.40	86.46	83.60	78.72	74.24	73.99	76.56	76.92	76.28	83.90	93.18	96.65	97.50
-0.5	86.51	86.08	84.38	79.94	71.96	63.53	61.58	65.35	67.43	65.04	65.69	80.00	92.33	96.48	97.47
0	85.13	82.32	75.92	64.55	52.22	48.24	51.66	53.97	52.34	49.16	56.44	77.77	91.93	96.40	97.46
0.5	80.38	71.62	56.28	39.19	31.70	32.53	33.13	31.58	29.83	33.05	50.54	76.77	91.78	96.37	97.45
1	67.28	48.00	26.77	15.93	13.94	13.30	12.32	12.19	15.23	25.63	48.54	76.47	91.73	96.36	97.45
1.5	40.54	17.96	6.73	4.04	3.51	3.40	3.89	5.92	11.46	24.08	48.15	76.41	91.72	96.36	97.45
2	12.25	3.01	1.07	0.89	1.05	1.46	2.46	4.96	10.93	23.87	48.10	76.40	91.72	96.36	97.45
2.5	1.89	0.43	0.29	0.37	0.58	1.05	2.13	4.73	10.79	23.82	48.08	76.40	91.71	96.36	97.45
3	0.25	0.12	0.14	0.22	0.43	0.92	2.03	4.65	10.75	23.80	48.08	76.40	91.71	96.36	97.45
3.5	0.09	0.07	0.09	0.18	0.39	0.87	2.00	4.63	10.74	23.80	48.08	76.40	91.71	96.36	97.45
4	0.05	0.05	0.08	0.16	0.37	0.86	1.99	4.62	10.74	23.80	48.08	76.40	91.71	96.36	97.45
4.5	0.05	0.05	0.07	0.16	0.37	0.86	1.98	4.62	10.73	23.80	48.08	76.40	91.71	96.36	97.45
5	0.04	0.05	0.07	0.16	0.37	0.86	1.98	4.62	10.73	23.80	48.08	76.40	91.71	96.36	97.45

* halfwaardetijd = $5.5 \cdot 10^4$ dag (PERSIS_N.XLS) :

	3	3.33	3.67	4	4.33	4.67	5	5.33	5.67	6	6.33	6.67	7	7.33	7.67
-7	97.88	97.88	97.90	97.93	97.99	98.08	98.21	98.31	98.30	98.17	98.00	97.89	97.83	97.78	97.75
-6.5	97.88	97.88	97.90	97.93	97.99	98.08	98.21	98.31	98.30	98.17	98.01	97.89	97.83	97.78	97.75
-6	97.88	97.88	97.90	97.93	97.99	98.08	98.21	98.32	98.31	98.18	98.01	97.89	97.83	97.78	97.76
-5.5	97.88	97.88	97.90	97.93	97.99	98.09	98.21	98.33	98.32	98.18	98.01	97.90	97.83	97.78	97.76
-5	97.88	97.88	97.90	97.93	97.99	98.09	98.23	98.35	98.35	98.21	98.04	97.91	97.84	97.79	97.76
-4.5	97.88	97.88	97.89	97.93	98.00	98.11	98.27	98.41	98.42	98.28	98.10	97.95	97.86	97.80	97.77
-4	97.87	97.87	97.88	97.92	98.01	98.16	98.37	98.54	98.57	98.44	98.23	98.04	97.92	97.83	97.78
-3.5	97.86	97.85	97.85	97.90	98.03	98.24	98.47	98.63	98.67	98.57	98.38	98.16	97.97	97.84	97.77
-3	97.83	97.79	97.77	97.84	98.04	98.23	98.33	98.33	98.30	98.25	98.15	98.02	97.90	97.81	97.76
-2.5	97.74	97.62	97.57	97.72	97.89	97.84	97.52	97.11	96.84	96.78	96.83	97.05	97.48	97.68	97.73
-2	97.52	97.29	97.29	97.46	97.30	96.51	95.10	93.65	93.02	93.09	93.30	94.37	96.40	97.39	97.66
-1.5	97.11	96.88	96.94	96.68	95.42	92.66	88.76	85.92	85.68	86.34	86.38	89.44	94.70	96.98	97.57
-1	96.66	96.46	95.96	94.15	89.95	82.99	76.32	74.71	76.79	77.03	76.33	83.92	93.18	96.65	97.50
-0.5	96.15	95.21	92.69	86.86	76.75	65.93	62.38	65.60	67.54	65.10	65.72	80.02	92.33	96.48	97.47
0	94.50	90.98	83.20	69.67	54.75	49.14	51.97	54.10	52.41	49.20	56.46	77.79	91.93	96.40	97.46
0.5	89.11	78.99	61.33	41.70	32.64	32.91	33.31	31.66	29.87	33.07	50.55	76.78	91.78	96.37	97.45
1	74.40	52.71	28.87	16.65	14.27	13.48	12.41	12.24	15.26	25.65	48.54	76.48	91.73	96.36	97.45
1.5	44.58	19.46	7.15	4.23	3.63	3.47	3.93	5.95	11.48	24.09	48.16	76.43	91.72	96.36	97.45
2	13.25	3.21	1.15	0.95	1.10	1.49	2.48	4.98	10.94	23.88	48.11	76.41	91.72	96.36	97.45
2.5	1.79	0.45	0.31	0.40	0.60	1.06	2.15	4.74	10.81	23.83	48.09	76.41	91.72	96.36	97.45
3	0.26	0.13	0.15	0.24	0.45	0.93	2.04	4.67	10.77	23.82	48.09	76.41	91.72	96.36	97.45
3.5	0.09	0.07	0.10	0.19	0.40	0.89	2.01	4.64	10.75	23.81	48.09	76.41	91.71	96.36	97.45
4	0.06	0.06	0.08	0.17	0.38	0.87	2.00	4.64	10.75	23.81	48.08	76.41	91.71	96.36	97.45
4.5	0.05	0.05	0.08	0.16	0.38	0.87	2.00	4.63	10.75	23.81	48.08	76.41	91.71	96.36	97.45
5	0.04	0.05	0.08	0.16	0.38	0.87	1.99	4.63	10.75	23.81	48.08	76.41	91.71	96.36	97.45

* halfwaardetijd = 10^5 dag (PERSIS_O.XLS) :

	3	3.33	3.67	4	4.33	4.67	5	5.33	5.67	6	6.33	6.67	7	7.33	7.67
-7	98.91	98.91	98.90	98.89	98.86	98.82	98.73	98.59	98.40	98.19	98.01	97.89	97.83	97.78	97.75
-6.5	98.91	98.91	98.90	98.89	98.86	98.82	98.74	98.60	98.40	98.19	98.01	97.90	97.83	97.78	97.75
-6	98.91	98.91	98.90	98.89	98.86	98.82	98.74	98.60	98.41	98.19	98.01	97.90	97.83	97.78	97.76
-5.5	98.91	98.91	98.90	98.89	98.86	98.82	98.74	98.60	98.42	98.20	98.02	97.90	97.83	97.78	97.76
-5	98.91	98.91	98.90	98.88	98.86	98.82	98.75	98.63	98.44	98.23	98.04	97.91	97.84	97.79	97.76
-4.5	98.91	98.90	98.89	98.88	98.86	98.83	98.78	98.68	98.52	98.30	98.10	97.95	97.86	97.80	97.77
-4	98.91	98.90	98.88	98.87	98.86	98.85	98.84	98.78	98.66	98.47	98.24	98.05	97.92	97.83	97.78
-3.5	98.90	98.87	98.85	98.83	98.84	98.88	98.90	98.86	98.77	98.61	98.39	98.16	97.97	97.84	97.77
-3	98.87	98.81	98.75	98.74	98.79	98.82	98.74	98.58	98.43	98.30	98.17	98.03	97.90	97.81	97.76
-2.5	98.78	98.64	98.53	98.57	98.61	98.44	97.97	97.38	96.97	96.83	96.84	97.06	97.48	97.68	97.73
-2	98.56	98.30	98.22	98.29	98.04	97.13	95.55	93.90	93.12	93.13	93.32	94.38	96.40	97.39	97.66
-1.5	98.15	97.88	97.85	97.52	96.16	93.24	89.13	86.09	85.73	86.36	86.39	89.45	94.70	96.98	97.57
-1	97.70	97.45	96.88	94.98	90.62	83.45	76.56	74.78	76.82	77.04	76.33	83.92	93.18	96.65	97.50
-0.5	97.17	96.18	93.57	87.60	77.22	66.20	62.46	65.62	67.55	65.11	65.72	80.02	92.33	96.48	97.47
0	95.50	91.90	83.98	70.16	55.03	49.23	52.00	54.12	52.42	49.20	56.46	77.79	91.93	96.40	97.46
0.5	90.04	79.76	61.90	41.98	32.74	32.95	33.33	31.67	29.87	33.07	50.55	76.78	91.78	96.37	97.45
1	75.15	53.16	29.07	16.73	14.30	13.49	12.42	12.24	15.26	25.65	48.55	76.48	91.73	96.36	97.45
1.5	43.03	19.63	7.19	4.25	3.64	3.48	3.94	5.95	11.48	24.09	48.16	76.43	91.72	96.36	97.45
2	13.37	3.23	1.16	0.96	1.11	1.49	2.49	4.98	10.94	23.88	48.11	76.41	91.72	96.36	97.45
2.5	1.80	0.46	0.32	0.40	0.61	1.07	2.15	4.74	10.81	23.83	48.09	76.41	91.72	96.36	97.45
3	0.26	0.13	0.15	0.24	0.45	0.93	2.04	4.67	10.77	23.82	48.09	76.41	91.72	96.36	97.45
3.5	0.09	0.07	0.10	0.19	0.40	0.89	2.01	4.65	10.76	23.81	48.09	76.41	91.72	96.36	97.45
4	0.06	0.06	0.08	0.17	0.38	0.87	2.00	4.64	10.75	23.81	48.08	76.41	91.71	96.36	97.45
4.5	0.05	0.05	0.08	0.16	0.38	0.87	2.00	4.64	10.75	23.81	48.08	76.41	91.71	96.36	97.45
5	0.04	0.05	0.08	0.16	0.38	0.87	2.00	4.64	10.75	23.81	48.08	76.41	91.72	96.36	97.45