

Model based monitoring van puttenvelden: meetnetoptimalisatie via systeemanalyse en hydrogeochemische modellering, met Noordbargeres als voorbeeld

Model based monitoring van puttenvelden: meetnetoptimalisatie via systeemanalyse en hydrogeochemische modellering, met Noordbargeres als voorbeeld

KWR 2015.021 | april 2015

Project nummer

400554/042

Projectmanager

Ir. J.W. Kooiman¹

Opdrachtgever

BTO

Kwaliteitsborging

ir. Nico van der Moot³ en dr. ir. Peter van de Maas⁴

Auteur(s)

Prof. dr. Pieter J. Stuyfzand^{1,2}

Met medewerking van: ir. Nico van der Moot³ en dr. ir.
Peter van de Maas⁴

¹ KWR, ² VU University Amsterdam,

³ Waterleidingbedrijf Drenthe,

⁴ Waterlaboratorium Noord

Verzonden aan

Dit rapport is openbaar.

Year of publication

2015

More information:

T +31 (0)6 10945021
E pieter.stuyfzand@kwrwater.nl

PO Box 1072
3430 BB Nieuwegein
The Netherlands

T +31 (0)30 60 69 511
F +31 (0)30 60 61 165
E info@kwrwater.nl
I www.kwrwater.nl

KWR Watercycle
Research
Institute

KWR | October 2014 © KWR

Alle rechten voorbehouden.

Niets uit deze uitgave mag worden veeelvoudigd,
opgeslagen in een geautomatiseerd gegevensbestand,
of openbaar gemaakt, in enige vorm of op enige wijze,
hetzij elektronisch, mechanisch, door fotokopieën,
opnamen, of enig andere manier, zonder voorafgaande
schriftelijke toestemming van de uitgever.



Samenvatting

De bewaking en voorspelling van de grondwaterkwaliteit in wingebieden voor de openbare drinkwatervoorziening kunnen *beter en misschien ook goedkoper*, als er maar meer rekening wordt gehouden met stoffeigenschappen, omgevingscondities als pH en redox, bodemsamenstelling en grondwaterstroming. Hoe dit kan, is onderzocht voor de kwetsbare, freatische winning Noordbargeres nabij Emmen, via de hydrologische en hydrochemische systeemanalyse en hydrogeochemische modellering van stoftransport en bodemuitloging, samen de motor achter 'Model-Based Groundwater (quality) Monitoring' (MBGM) vormend. Noordbargeres vormt een interessant voorbeeld vanwege ondergrondse vuilpluimen vanuit de landbouw, stad en een infiltrerend kanaal, een onbegrepen milde expressie ervan in de ruwwaterkwaliteit, en de aanwezigheid van een in 1999 herzien, goed draaiend meetnet.

De aanpak kende de volgende 7 stappen, die integraal onderdeel uitmaken van MBGM in het algemeen, met tussen haakjes in rood de specifieke in Excel geprogrammeerde tool:

1. beeldvorming van het huidige monitoringprogramma van Noordbargeres, waarbij signalering van vrijwel altijd niet aantoonbare groepen organische microverontreinigingen (OMIVE);
2. een stratificatie-analyse, leidend tot indeling van de ondergrond in 7 zich onderscheidende bodemlagen en waterkwaliteiten (LGC);
3. bepaling van de hydrologische respons curve (HRC) van het puttenveld, incl. verificatie en calibratie op tritium data (1983 en 2004), en berekening van ondergrondse reistijden naar alle putfilters (HRC+);
4. kartering van de ruimtelijke en temporele variaties in grondwaterkwaliteit (HGC), leidend tot identificatie van 4 watersoorten (natuurlijk diep, door landbouw beïnvloed, door stedelijke verontreiniging beïnvloed en Oranjekanaal-infiltraat), kwantificering van hun aandeel in gemengd ruwwater via multitracing (UnMix), en detectie van trendmatige ontwikkelingen;
5. identificatie en kwantificering van bodemreacties en bodemuitloging via chemische massabalansen (R+);
6. voorspelling van de doorbraakcurve van verontreinigingen in het ruwwater (o.a. NO₃, tritium, 1,2-dichloorpropan en 1,4-dioxaan) via de HRC, en die van vele anorganische en organische stoffen globaal via een 2-lagen, worst-case benadering (TRANSATOMIC); en uiteindelijk
7. destillatie van algemene voor freatische puttenvelden geldende en specifieke voor Noordbargeres geldende regels en aanbevelingen voor optimalisatie van het bestaande monitoringprogramma. Deze zijn allemaal besproken in Ch.7 van dit rapport.

Onderdelen 1-4 vormen de systeemanalyse, en onderdelen 3+5+6 de modelmatige kern van MBGM. Voorliggend rapport biedt naast MBGM zicht op een aantal, voor dit project ontwikkelde nieuwe methoden: (i) schematisatie van een puttenveld met niet-circelvormig intrekgebied tot een radiale, asymmetrische situatie, ter verbetering van de berekening van grondwaterstanden en ondergrondse reistijden (onderdeel van HRC+); (ii) verificatie en calibratie van de hydrologische respons curve van het puttenveld op tritium data (onderdeel van HRC+); (iii) inbouw van een variabel ingangssignaal, reactief-transportonderdelen en een tweelagen opbouw van de ondergrond, in de HRC ter verbeterde, snelle voorspelling van de ruwwaterkwaliteit (TRANSATOMIC); (iv) uitbreiding van de chemische massabalansmethode om de uitloosnelheid van reactieve bodembestanddelen te bepalen (R+); en (v) een trial-and-error multitracing methode ter schatting van de kwantitatieve bijdrage van 4 eindleden aan de ruwwatersamenstelling van een put(tenveld) (UnMix).

Met het aldus vernieuwde instrumentarium zijn voorspellingen van de ruwwaterkwaliteit van Noordbargeres gedaan, die t.a.v. nitraat, 1,2-dichloorpropan en 1,4-dioxaan fors afwijken van eerdere voorspellingen. Zij passen echter veel beter bij de recente metingen, waarover eerdere studies niet beschikten. Als oorzaken vallen te noemen de (gemiddeld!) langere reistijden volgens de

met tritium geijkte HRC, de toepassing van redoxafhankelijke halfwaardetijden en de uitloging van de anoxische benedenetage van het aquifersysteem.

Dankzij multitracing en chemische massabalansen, waaronder ook de ^{34}S massabalans, is duidelijk gemaakt dat de rol van pyriet groter is dan gedacht, en mogelijk toenemend in de toekomst omdat pyriet minder snel lijkt uit te logen dan labiele organische stof.

Een belangrijke conclusie is dat de 7-stapsbenadering niet alleen leidt tot betere monitoring, maar ook tot een gestructureerde uitwerking en interpretatie van de verkregen informatie, die het gevreesde datakerkhof omtovert in een datalusthof voor onderzoekers en beleidsmakers! Alleen dat helpt te voorkomen dat de begroting van langjarige meetprogramma's geplunderd wordt tijdens recidiverende bezuinigingsrondes.

Mogelijkheden en beperkingen MBGM

De verbeterde bepaling van ondergrondse reistijden en doorbraakmomenten van probleemstoffen maakt het mogelijk om de analysespakketten en meetfrequenties scherper bij te stellen. Zo heeft het weinig zin om aantoonbaar oud grondwater te analyseren op een breed pakket OMIVE. Ook de indeling in grondwatersoorten en hydrogeochemische zones helpt hierbij, wanneer bekend is dat bepaalde verontreinigingen alleen voorkomen in een specifieke watersoort (b.v. geïnfiltreerd kanaalwater) en zij b.v. in diep anaëroob milieu 100% gegarandeerd afbreken.

Er zijn evenwel ook beperkingen aan de toepassing van MBGM, vooral door de volgende factoren: (i) het verschijnen van goedkope multi-analysepakketten maakt krappe maatwerk-analysepakketten overbodig, (ii) maatwerk staat eenvoudig in procesvoering in de weg en kan tot fouten leiden, (iii) stoffeigenschappen uit handboeken zijn niet zonder meer overdraagbaar naar het te modelleren intrekgebied, (iv) prognoses op basis van modellen kennen een grote, moeilijk te kwantificeren bandbreedte, (v) kennis van metabolieten van afbrekende OMIVE en hun gedrag is zeer beperkt, en (vi) thans voorspelde of gemeten lage concentraties kunnen in de toekomst gevaarlijk hoog blijken, zodat zij niet uitgesloten mogen worden van monitoring (b.v. As waarvan norm verschuift).

Belang voor waterbedrijven:

De ontwikkelde coherente aanpak, ondersteund met diverse in Excel geprogrammeerde modellen zoals LGC, HRC+, HGC, UnMix, R+ en TRANSATOMIC, helpt de waterbedrijven inzicht te krijgen in de mogelijkheden en toepassing van 'model based groundwater monitoring' van kwetsbare, freatische puttenvelden. Een belangrijk extra voordeel is dat het model TRANSATOMIC snel en eenvoudig toekomstverwachtingen biedt van de ruwwaterkwaliteit. Als voor bepaalde OMIVE de fysisch-chemische eigenschappen bekend zijn (dikwijls een knelpunt), kan de toekomstverwachting worden gebruikt om al dan niet of met weloverwogen frequentie te monitoren.

Van belang voor:

- Hydrologen, die met het nieuwe instrumentarium hun winningen kunnen schematiseren en zodoende ook de hydrologische respons curve kunnen verbeteren;
- Asset managers, die waken over putverstopping en corrosie of verstopping van leidingen;
- Waterkwaliteitsmanagers en laboratoria die de resultaten gebruiken om het gedrag en de monitoring van nieuwe stoffen te beoordelen; en
- zuiveringstechnologen die voorspelde kwaliteitsverschuivingen in het ruwe water zuiveringstechnisch moeten opvangen.

Trefwoorden:

Meetnetoptimalisatie, hydrologische responscurve, totale en residuele reistijd, stroombaanreistijd, circumsectie, hydrologische en chemische systeemanalyse, chemische massabalans, bodemuitloging, waterkwaliteit, putverstopping, operationele versus werkelijke halfwaardetijd, tools.

Contents

Samenvatting	3
1 Inleiding	7
1.1 Achtergronden, kader en doelen	7
1.2 Technische benadering in 7 stappen	8
1.3 Proeflokatie Noordbargeres	8
1.4 Knelpunten	11
2 Het huidige monitoringprogramma voor Noordbargeres	13
2.1 Algemene opzet	13
2.2 Kritische en ondersteunende parameters	14
2.3 Hitlijst van geanalyseerde stoffen	14
3 Hydrogeologische en hydrogeochemische karakterisatie van het waterwingebied	17
3.1 Hydrogeologische schematisatie	17
3.2 Geochemische schematisatie	20
3.3 Hydrochemische stratificatie	21
3.4 LithoGeoChemical (LGC)	23
4 Hydrologische systeemanalyse	25
4.1 Isohypsen, grootte en vorm intrekgebied	25
4.2 De Hydrologische Respons Curve	30
4.3 Principe van tritium validatie en calibratie	33
4.4 Resultaten van vergelijking met tritium validatie en calibratie	35
4.5 Reistijdschatting voor elk waarnemingsfilter tot de pompputten	36
4.6 Reistijdschatting van maaiveld tot elk waarnemingsfilter	37
4.7 HRC+	41
5 Hydrochemische systeemanalyse	43
5.1 Materiaal en methoden	43
5.2 Pearson correlatiematrix	45
5.3 Watersoorten onderscheiden naar herkomst	49
5.4 Bepaling van de 4 mengende eindleden in ruwwater 2011	51
5.5 Ruimtelijke kartering van de waterkwaliteit anno 2011	53
5.6 Kwaliteitsontwikkeling ruwwater	64
6 Modelling met chemische massabalansen en analytische transportvergelijkingen	67
6.1 Kwantificering en identificatie van bodemreacties via chemische massabalansen	67
6.2 Kwantificering van bodemuitloging via chemische massabalansen	70
6.3 Voorspelling doorbraak verontreinigingen via inputsignaal en HRC (zonder uitloging aquifer)	71
6.4 Voorspelling doorbraak verontreinigingen via inputsignaal en HRC (met uitloging aquifer)	75
6.5 Voorspelling positief geladen ionen, spore-elementen en radionucliden bij een stapinput	77
6.6 Voorspelling OMIVE bij een stapinput	81
6.7 Uitbreiding van TRANSATOMIC	82
7 Regels voor optimalisatie van het bestaande monitoringprogramma	83
7.1 Enkele algemeen geldende regels	83
7.2 Conclusies uit de hitlijst van stoffen en correlatiematrix (Ch.2 + § 5.2)	89
7.3 Conclusies uit de stratificatie-analyse en hydrologische systeemanalyse (Ch.3-4)	89
7.4 Conclusies uit de hydrochemische systeemanalyse (Ch.5)	90
7.5 Conclusies uit de hydrogeochemische massabalansen (§6.1-6.2)	91
7.6 Conclusies uit de analytische transportberekeningen (§6.3-6.6)	92
7.7 Overige aanbevelingen specifiek voor Noordbargeres	93

8	Algemene conclusies en aanbevelingen	95
9	Referenties	97
	Bijlage 1: Exploratiepakket WMD	101
	Bijlage 2: Bepaling en betekenis van de hydrochemische facies	105
8.1	Introduction	
8.2	Acidity (pH or SIC)	
8.3	Redox environment and redox index	
8.4	Water Pollution index WAPI	
8.5	Radar plot of WAPI	
	Bijlage 3: Lijst van geanalyseerde stoffen en hun hits	115
	Bijlage 4: Poster 'The geohydrochemical screening procedure'	127

1 Inleiding

1.1 Achtergronden, kader en doelen

Achtergronden

Waterbedrijven geven relatief veel geld uit aan de waterkwaliteitsmonitoring van hun bronnen (grond- en oppervlaktewater). Het grootste deel van de inspanning is 'eigen beleid' van het waterbedrijf met als belangrijkste doel inzicht te krijgen in de huidige en toekomstige (potentiële) bedreigingen van de ruwaterkwaliteit.

Het analysespakket, de meetlocaties en meetfrequentie, als onderdeel van de monitoringstrategie, zijn gebaseerd op ondermeer: kennis van het hydrologische systeem, aanwezigheid van verontreinigingsbronnen en (historische) ligging van waarnemingsputten. Als voorbeeld: WMD en WBGR voeren eens per 6-8 jaar een brede screening uit op waarnemingsfilters op tenminste 10-15 jaar reistijd van de drinkwaterbronnen in het bempompte grofzandige deel van het watervoerende pakket. Indien een verontreiniging is aangetroffen op een bepaalde locatie, wordt het verloop van deze stof gevolgd door jaarlijkse monitoring (toetsing). Inzicht in potentiële bedreigingen van oppervlaktewater wordt door WBGR (winning De Punt) verkregen door middel van uitgebreide monitoring, zowel bij het innamepunt als stroomopwaarts, in combinatie met gebiedsgerichte kennis. In de huidige monitoringopzet wordt beperkt en weinig expliciet rekening gehouden met stoffeigenschaften, omgevingscondities als pH en redox, bodemsamenstelling en grondwaterstroming. Deze factoren bepalen echter wel het verloop (mobiliteit en afbraak) van de verschillende stoffen. Dus, als we inzicht hebben in de genoemde factoren (stof- en locatieafhankelijk), kan het verloop van verontreinigingen in het water(bodem)systeem en in de tijd worden voorspeld. De monitoring kan dan gerichter en kritischer worden ingericht, terwijl het inzicht in waterkwaliteit wordt vergroot.

Binnen het BTO en daarbuiten zijn diverse tools/modellen ontwikkeld waarmee het gedrag van verontreinigingen gesimuleerd kan worden. Voorbeelden zijn VOORSP, RESPOND, Respond-ST, WellChem (Phreeqc) en TRANSATOMIC. Deze modellen worden doorgaans ingezet om de doorbraak van verontreinigingen te modelleren, daarbij gebruik makend van beschikbare, vaak beperkte meetdata. In dit project draaien we het om: modellen zetten wij in om te bepalen waar, waarop en wanneer we moeten meten voor optimale kwaliteitsbewaking. In principe kan 'model based monitoring' het zicht op toekomstige (bron)waterkwaliteit vergroten en/of de kosten voor monitoring verlagen.

Kader van het onderzoek

Voorliggend onderzoek is uitgevoerd als thematisch onderdeel van het BTO-onderzoek 2013-2015 voor de Nederlandse waterbedrijven. Dit onderdeel staat te boek als 'Model based monitoring van waterkwaliteit' en omvat 2 casussen: een grondwater- en een oppervlaktewaterwinning. In dit rapport gaat alle aandacht uit naar de mogelijkheden van 'Model based monitoring' van een kwetsbare grondwaterwinning, zoals geïllustreerd aan de hand van de casus Noordbargeres (een puttenveld nabij Emmen in de provincie Drenthe). De oppervlaktewatercasus is opgenomen in het overkoepelend eindrapport (Raat et al., 2015), dat bestaat uit 4 onderdelen: (1) een review van bestaande monitoringprogramma's /strategieën van de waterbedrijven, (2) de grondwatercasus (samenvatting van dit rapport), (3) de oppervlaktewatercasus, en (4) een synthese met kansen en beperkingen van model based monitoring.

Doelen van dit rapport

- Een uitgewerkte toepassing van 'model-based monitoring' voor één grondwaterwinning
- Inzicht in de mogelijkheden en kansen die model based monitoring biedt om te komen tot verbeterde waterkwaliteitsbewaking van bronnen en verlaging van de kosten voor monitoring.
- Inzicht in de beperkingen van het toepassen van model based monitoring voor de kwaliteitsbewaking van een puttenveld voor de drinkwatervoorziening.

1.2 Technische benadering in 7 stappen

Na de selectie van een representatieve grondwaterwinning als case study voor het toepassen van model based monitoring in § 1.3, en vaststelling van de belangrijkste knelpunten bij het verkrijgen van inzicht in de ontwikkeling van de ruw-waterkwaliteit in § 1.4, volgt onderstaande 7-stapsbenadering:

- 1) Beeldvorming van het huidige monitoringprogramma (doel, opzet, kosten), signalering van de belangrijkste kwaliteitsvraagstukken (bedreigende activiteiten en identificatie van probleemstoffen), en evaluatie van het analysenpakket. → Ch.2.
- 2) Hydrogeologische en hydrogeochemische stratificatie (karakterisatie) van het intrekgebied. Daarbij vooral aandacht voor de indeling in bodemlagen. → Ch.3.
- 3) Hydrologische systeemanalyse, waarbij focus op de grondwaterstroming, ouderdomsverdeling en reistijden naar de pomp- en waarnemingsputten → Ch.4.
- 4) Hydrochemische systeemanalyse, bestaande uit de herkenning van specifieke watersoorten door multitracing, 3D-kartering van de waterkwaliteit (enkele kritische parameters, redox zones, watertypen), en trendmatige ontwikkelingen. → Ch.5.
- 5) Identificatie en kwantificering van bodemreacties en bodemuitloging via chemische massabalansen (R+), o.a. ten behoeve van de NO₃, SO₄ en totale hardheid prognose. → Ch.6.
- 6) Voorspelling van de doorbraakcurve van verontreinigingen in het ruwwater via analytische transportvergelijkingen (TRANSATOMIC). Het betreft kationen, enkele spore-elementen, radionucliden en organische microverontreinigingen. → Ch.6.
- 7) Vertaling van de bevindingen in regels voor optimalisatie van het bestaande monitoringprogramma van de geselecteerde winning, en voor monitoringprogramma's van freatische grondwaterwinningen in het algemeen. → Ch.7.

1.3 Proeflokatie Noordbargeres

De grondwaterwinning Noordbargeres van WMD is gelegen rond X/Y-coördinaat 255,7/533,8 km, ten westen van Emmen en oostelijk van het Oranjekanaal (Fig.1.1). Enkele kengetallen van deze winning staan in Tabel 1.1. Noordbargeres is gekozen als proeflokatie om de volgende redenen:

- het betreft een representatief, middelgroot, freatisch en kwetsbaar puttenveld, waar de BTO-begeleidingsgroep, WMD en WLN zich goed in konden vinden;
- het vertoont algemeen voorkomende waterkwaliteitsproblemen door intensieve landbouw, stedelijke invloeden en infiltrerend oppervlaktewater binnen het waterwingebied;
- de winning is in het verleden uitvoerig onderzocht en kan dus bogen op een rijke dataset aan waterkwaliteitsmetingen en hydrologisch onderzoek; en
- het meetsysteem van de winning is eind jaren 90 volledig herzien door het inrichten van nieuwe waarnemingsputten en door vastlegging van een doordacht meetplan.

De zuivering van het ruwwater tot drinkwater geschiedt door achtereenvolgens een voorfiltratie (beluchting en snelfiltratie), ontzuring via 6 kolommen, nafiltratie en tenslotte een intensieve beluchting ter verwijdering van (restanten) 1,2-dcp. De ligging van het intrek-, grondwaterbeschermings- en waterwingebied van Noordbargeres (en het noordelijk ervan gelegen Valtherbos), met punt- en lijnbronnen van potentiële verontreiniging, landgebruik en kwetsbaarheid is weergegeven in Fig.1.2.

TABEL 1.1. Enkele kengetallen van de winning Noordbargeres.

Start winning	1937
Eigenaar	WMD
Type winning	freatisch
Omvang 2004-2013	4.1 Mm3/jaar
Vergunning	5 Mm3/jaar
Diepte onttrekking	46-59 m-MV
Aantal actieve pompputten in 2014	20
Aantal verlaten pompputten in 2013	2
Herziening meetnet	1999
Aantal waarnemingsputten (WPs) meetnet	21
Gemiddeld aantal stijgbuizen per WP	5.4
Maaiveld	22 m +NAP

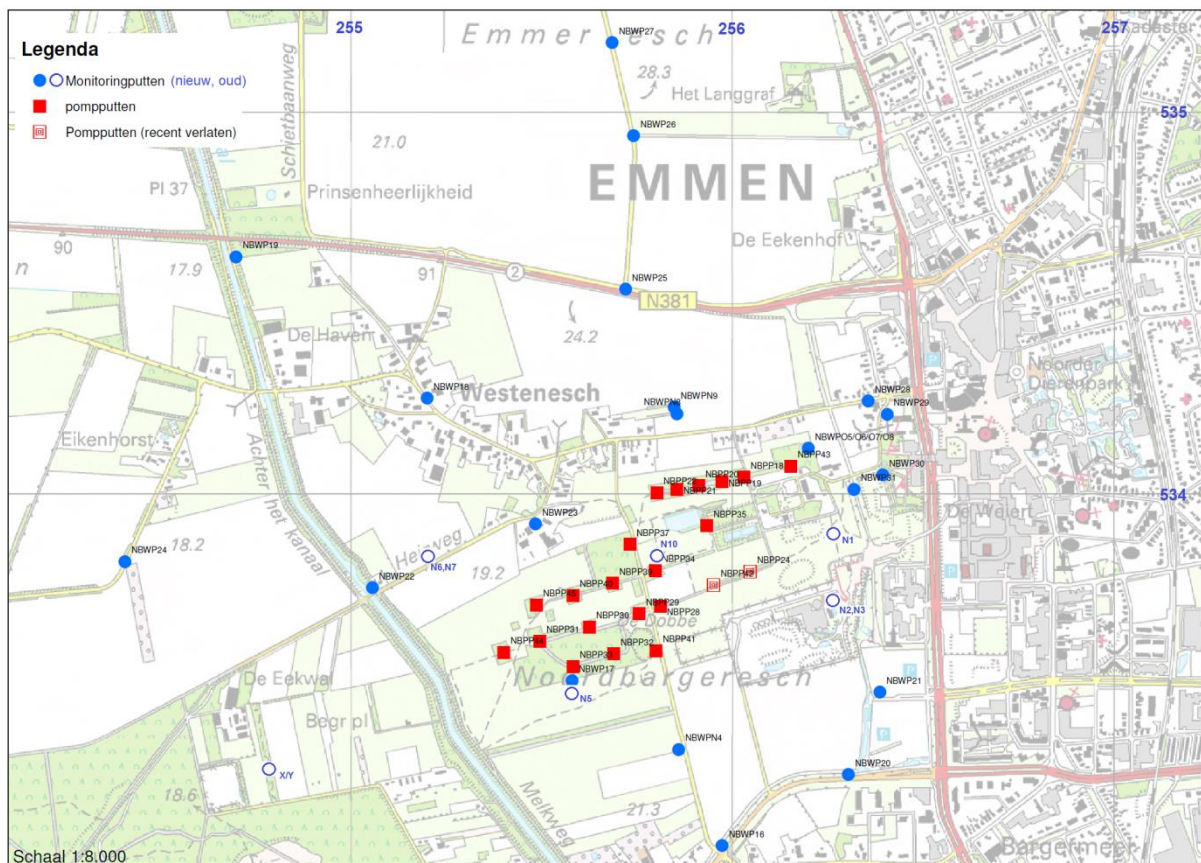


Fig.1.1. Locatiekaart van de pompputten van grondwaterwinning Noordbargeres (NBPP18-45), samen met die waarnemingsputten die het 'nieuwe' meetnet grondwaterkwaliteit vormen (o.a. NBWP16-31) en belangrijke oudere meetpunten (o.a. X/Y, N1-N10).

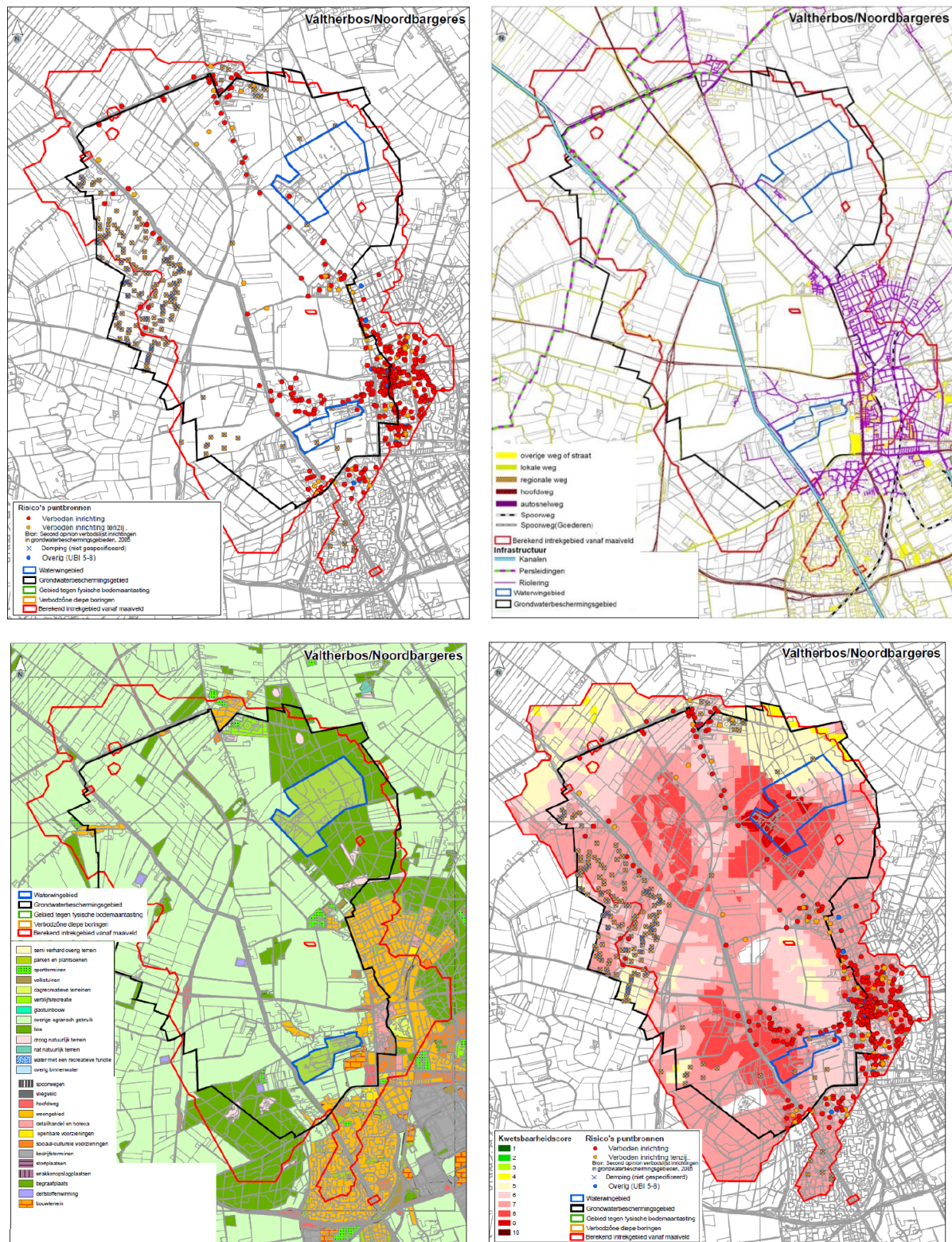


Fig.1.2. Locatiekaart van het gezamenlijke intrekg gebied, grondwaterbeschermingsgebied en waterwingebied van grondwaterwinningen Noordbargeres en Valtherbos, met puntbronnen (Linksboven), lijnbronnen (rechtsboven) van potentiële verontreiniging, landgebruik (linksonder) en kwetsbaarheid (rechtsonder). Iets gewijzigd naar Prov. Drenthe 2011)

1.4 Knelpunten

Belangrijke knelpunten bij de opzet van een meetsysteem waterkwaliteit en het verkrijgen van inzicht in de ontwikkeling van de ruw-waterkwaliteit van kwetsbare freatische winningen zijn:

- A. Gebrek aan (voldoende) kennis van de ondergrondse reistijdverdeling (de hydrologische responscurve) van het water (onverzadigd en verzadigd) naar de pompputten, en van het intrekgebied. De doorgaans gebruikte 3D grondwatermodellen worden meestal alleen geijkt op grondwaterstanden of de waterbalans, zonder onafhankelijke toetsing. Zo'n toetsing geschiedt idealiter via de hydrochemie, dankzij temporele en ruimtelijke variaties die in de winning bijeenkomen. Een speciaal punt van aandacht hierbij vormt het inzicht in kortsluitstroming, die voor onverwachte, nare verrassingen kan zorgen.
- B. Gebrek aan inzicht in de hydrogeologische en hydrogeochemische stratificatie van het intrekgebied. Dat inzicht biedt handvatten om metingen in de ruimte een bepaalde representativiteit toe te dichten.
- C. Gebrek aan inzicht in de verplaatsing van uitloofronten die de verplaatsingssnelheid van verontreinigingen dicteren, b.v. waar uitloogende kalk zuur en zware metalen tegenhoudt en oxiderende organische stof o.a. O_2 , NO_3 en in anoxisch milieu afbreekbare OMIVE tegenhoudt.
- D. Onvoldoende kennis van historische en toekomstige veranderingen in het landgebruik binnen het intrekgebied en de daardoor ontstane veranderingen in het regen- en oppervlaktewater dat het gepompte aquifersysteem voedt.
- E. Onvoldoende kennis van het gedrag van bepaalde verontreinigende stoffen in het aquifersysteem. Dit betreft in het bijzonder vele OMIVE, waarvan de retardatiefactor onvoldoende nauwkeurig in te schatten valt, en met nog meer onzekerheid de afbreekbaarheid in het aquifersysteem. Een aardig voorbeeld vormt bentazon, dat in de aërobe bouwvoor een halfwaardetijd zou hebben van ca. 30 dagen, maar in aquifersystemen (zowel aëroob als anaëroob) nauwelijks afbreekt (Stuyfzand & Lüers, 1997). Een tweede probleem bij de afbreekbaarheid van veel stoffen (moedercomponenten) vormt de onbekendheid van de degradatieroute en dan de aard en eigenschappen van de metabolieten (dochterproducten).
- F. Altijd weer, het vinden van een compromis tussen wat wenselijk en (financieel) haalbaar is. Daarbij ook de keus tussen een periodieke, oneindig brede en dure screening met risico van te weinig 'hits' (Fig.1.3), en het missen van ongewenste ontwikkelingen.

In deze bijdrage ligt het accent op het verkrijgen van meer inzicht in de punten A, B en C door toepassing van modellen.

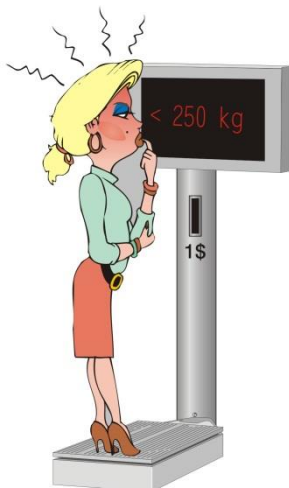


FIG. 1.3. Het gevoel van 'geldverspilling' ontstaat bij de meeste meetsystemen van de grondwaterkwaliteit, doordat een database volloopt met veel dure analysegegevens beneden een aanvaardbare of, erger, een te hoge onderste analysegrens. Naar Stuyfzand (1996, 1998).

2 Het huidige monitoringprogramma voor Noordbargeres

2.1 Algemene opzet

Algemene filosofie WMD m.b.t. kwaliteitsbewaking kwetsbare winningen

WMD heeft recentelijk rond haar kwetsbare winningen monitoringssystemen voor de grondwaterkwaliteit ingericht. Momenteel zijn deze operationeel rond Valtherbos (vanaf 1998), Noordbargeres (vanaf 1999), Leggeloo (vanaf 2001), Gasselte (vanaf 2004) en Beilen (boring monitoringssystemen najaar 2010; eerste exploratieonderzoek voorjaar 2012).

Deze monitoringssystemen omvatten onderzoek van de pomp- en waarnemingsputten. De waarnemingsputten zijn rond de winning geplaatst, waar de verwachte reistijd van het grondwater in het gepompte deel van het watervoerende pakket 10 à 15 jaar bedraagt. Eénmaal in de 6 jaar worden de pomp- en waarnemingsputten onderworpen aan een uitgebreid *exploratietoetsing*, waarbij wordt gekeken naar alle mogelijke (verwachte en niet-verwachte) verontreinigingen. De 5 daaropvolgende jaren wordt dit onderzoek gecontinueerd met een *toetsingonderzoek*, waarbij in de pomp- en waarnemingsputten jaarlijks naast de algemene kwaliteitsparameters met name de kritische parameters gevolgd worden. *Kritische parameters* vertonen een concentratie boven de drinkwaternorm en bestaan dikwijls ook uit grondwatervreemde parameters met concentratie boven de analysegrens volgens het uitgebreide exploratieonderzoek. Het analysepakket dat bij het exploratieonderzoek wordt gebruikt (2010), is nader gespecificeerd in Bijlage 1 (bron: Waterlaboratorium Noord).

Noordbargeres

De waterkwaliteitsbewaking van puttenveld Noordbargeres omvat periodieke analyse van grondwater bemonsterd uit waarnemingsputten, individuele pompputten, het verzamelde ruwwater uit 2 strengen, en het reine water (drinkwater af pompstation). Het navolgende programma wordt gehanteerd (overigens voor alle kwetsbare wingebieden van WMD):

- Eens per 6 jaar een exploratieronde op alle waarnemingsfilters van het nieuwe meetnet (21 waarnemingsputten met gemiddeld 5.4 peilbuizen per put). Het betreft een brede screening van de 'hele' waterkwaliteit (macroparameters, zware metalen en organische microverontreinigingen o.a. via LC-MS / GC-MS; zie Tabel 2.1).
- Wanneer een verontreiniging is aangetroffen, worden de betreffende waarnemingsfilters in principe eens per 2 jaar bemonsterd om het concentratieverloop te volgen. Bij Noordbargeres worden in afwijking daarvan specifieke verontreinigingspluimen (bijv. chloridazon desfenyl) jaarlijks getoetst.
- Bij pompputten waar een verontreiniging is aangetroffen geldt een jaarlijkse toetsing.

De orde van grootte van de kosten / meetomvang bij Noordbargeres is als volgt op basis van het Water Analyse Punten systeem (1 WAP = ~1.70 € excl. bemonstering):

- Waarnemingsfilters: Exploratieronde ca. 150.000 WAP (eens per 6 jaar), toetsing gemiddeld ca. 17.000 WAP per jaar; en
- Pompputten: Exploratieronde ca. 40.000 WAP (eens per 6 jaar), toetsing gemiddeld ca. 6.000 WAP per jaar

2.2 Kritische en ondersteunende parameters

De definities zijn volgens Van der Moot & Zeewuster (2000) als volgt:

- **Kritische parameter:** een parameter waarvan de concentratie / het niveau de norm voor reinwater overschrijdt (Waterleidingbesluit / Vewin aanbeveling).
- **Ondersteunende parameter:** een parameter waarvan het verloop van de concentratie in de tijd een trend vertoont.

In de bronnen zijn als kritische parameters gedetecteerd 1,4-dioxaan en 1,1-dichloorethaan, alsmede de DD-componenten 1,2-dichloorpropaan (1,2-dcp) en 1,2,3-trichloorpropaan (1,2,3-tcp). Van der Moot (2014) meldde tijdens de review van dit rapport de recente ontdekking door WLN van chloridazon-desfenyl, de belangrijkste metaboliet van chloridazon (althans qua concentratieniveau; concentraties >1 µg/L, zijnde de drinkwaternorm).

Niet kritisch maar wel accessorisch zijn: (i) tetrahydrofuraan, biphenyl, biphenylether en 1,1,1-trichloorethaan, bij 1,4-dioxaan; en (ii) diverse gechloteerde propaan en propeen verbindingen, bij 1,2-dcp. Van deze accessorie stoffen wordt alleen tetrahydrofuraan regelmatig aangetroffen. Merkwaardig genoeg werd de stof 1,1,1-trichloorethaan in de jaren 80 nog algemeen waargenomen in de meeste waarnemingsputten (>0.1 tot enkele µg/L), maar sedert 1999 niet meer (<0.05 µg/L).

In meerdere monitoringputten zijn bovendien fenylureumherbiciden (wp22, wp23, wpN4, wpN8 en wpO5-O8), aromaten (wp19 en wp22) en polycyclische aromaten (wp22) aangetroffen.

In de meeste monitoringputten worden in de bovenste waarnemingsfilters (in het afdekkende fijnzandige deel van het watervoerende pakket) tot een diepte van circa 40 m-mv hoge tot zeer hoge nitraatconcentraties waargenomen, tot (ver) boven de norm van 50 mg NO₃/L.

Parameters met een trend zijn o.a. SO₄, Ca en Cl (zie voorts § 5.6).

2.3 Hitlijst van geanalyseerde stoffen

In de periode 1977-2014 zijn door WLN in totaal 634-753 verschillende waterkwaliteitsparameters geanalyseerd op monsters uit waarnemingsputten (WPs), pompputten (PPs) en ruwwater (Ruw). Bijlage 3 geeft hiervan een opsomming met vermelding van de parameterklasse (0-5), parameternaam, eenheid van analyseresultaat, aantal waarnemingen incl. die met <MDL (Minimum Detectie Limiet), aantal data >MDL, aantal data <MDL, % waarnemingen >MDL, gemiddelde concentratie op basis van waarnemingen >MDL, en de maximum concentratie.

Data met als resultaat <MDL zijn niet aantoonbaar. Dit betekent dat het niveau zich onder de rapportagegrens bevindt, maar voor anorganische stoffen niet nul is (immers concentratie '0' bestaat niet voor deze groep natuurlijke stoffen) en voor organische microverontreinigingen wel nul kan zijn (b.v. in oud grondwater).

De lange listing is gesorteerd op achtereenvolgens parameterklasse 1-5 en daarna klasse 0 (Tabel 2.1):

- klasse 0 = voornamelijk organische microverontreinigingen (OMIVE) als berekende somparameter, of OMIVE met gemiddelde concentratie = 0 of met % >MDL = 0;
- klasse 1 = algemene parameters, zoals EC, pH, temp, geur, kleur etc.;
- klasse 2 = macrokationen en macro-anionen, plus SiO₂;
- klasse 3 = spore-elementen (n = 10-11);
- klasse 4 = OMIVE met gemiddelde concentratie ≥0.01 µg/L en % >MDL ≥1%;
- klasse 5 = microbiologische parameters;

Binnen de klassen 3-5 zijn de parameters gesorteerd op afnemend % >MDL en vervolgens op afnemende gemiddelde concentratie. Deze ranking vormt een soort *hitlijst van stoffen* binnen deze klassen (→ Bijlage 3).

Van bovengenoemde grote aantallen parameters dienen nog te worden afgetrokken: de omstandigheden waaronder gemeten is of de vermelde extractiemethode (20x), somparameters die bogen op de som van individuele bepalingen (39x), vermeldingen in verschillende eenheden (8x) en resultaten berekend op basis van gemeten concentraties. Dan komen we uit op ca. 560-680 parameters, nog steeds een kolossaal aantal. Daarvan bestaat veruit het leeuwendeel uit klasse 0 OMIVE (Tabel 2.1). Klasse 4 OMIVE, die er veel meer toe doen, zijn in § 5.1.3 verder geselecteerd voor nader onderzoek. Het betreft een 24 tal OMIVE.

Voor belangrijke conclusies en aanbevelingen m.b.t. de monitoring → § 7.1.

Alle waterkwaliteitsgegevens zijn door WLN in 3 zeer overzichtelijke Excel-bestanden aangeleverd: [NO waarnemingsfilters.XLSX](#), [NO pompputten.XLSX](#) en [NO ruwwater.XLSX](#)

TABEL 2.1. *Overzicht van parameterklassen met de ongecorrigeerde aantallen geanalyseerde waterkwaliteitsparameters daarbinnen, voor monsters ruwwater, monsters uit pompputten en uit waarnemingsputten. Gebaseerd op data in Bijlage 3. OMP = Organic MicroPollutant (= OMIVE). MDL = Minimum Detectie Limiet.*

Class	Parameter group	Raw	PPs	WPs
0	mainly OMPs with conc <MDL or calculated OMPs	556	647	463
1	General parameters, e.g.: EC, pH, temp, color, TOC, 3H	22	22	24
2	Main cations, main anions, SiO ₂	22	28	28
3	Trace elements: Al, As, Ba, Cd, Cr, Cu, Hg, Ni, Pb, Se, Zn	10	11	11
4	OMPs with conc ≥0.01 ug/L and % >MDL >1%	13	37	126
5	Microbiological parameters	9	3	0

3 Hydrogeologische en hydrogeochemische karakterisatie van het waterwingebied

3.1 Hydrogeologische schematisatie

Op basis van de vele literatuur (o.a. Ter Wee 1972, RID 1975, Van der Moot 1991, Foppen & Kremers 1997, Van Vugt & Van der Eijnden 1999) is de ondergrond van de winning Noordbargeres geschematiseerd als aangegeven in Fig.3.1. Er zijn 9 aquiferlagen (A t/m H) en 4 aquiferzones (onverzadigd, 1, 2 en 3) onderscheiden van maaiveld (gemiddeld op 22 m+NAP, doch variërend van 18-27 m+NAP) tot 130 m-NAP.

Laag A en gedeeltelijk ook laag B liggen in de onverzadigde zone. Laag A bestaat uit keileem waarvan de doorlatendheid relatief groot is, zodat deze althans hydrologisch als onderdeel van het freatische systeem kan worden opgevat (zie ook Van der Moot, 1991).

Aquiferzone 1 is opgebouwd uit lagen B, C en D, welke fijnzandig zijn. De bemppte, grofzandige aquiferzone 2 is opgebouwd uit fluviatiele Pleistocene lagen E en F. Aquiferzone 3 bestaat uit laag G, een complex van zeer fijnzandige, mariene lagen uit het Plioceen. Aquitard H aan de basis van de freatische aquifer (zones 1-3) is opgebouwd uit zandige Miocene klei.

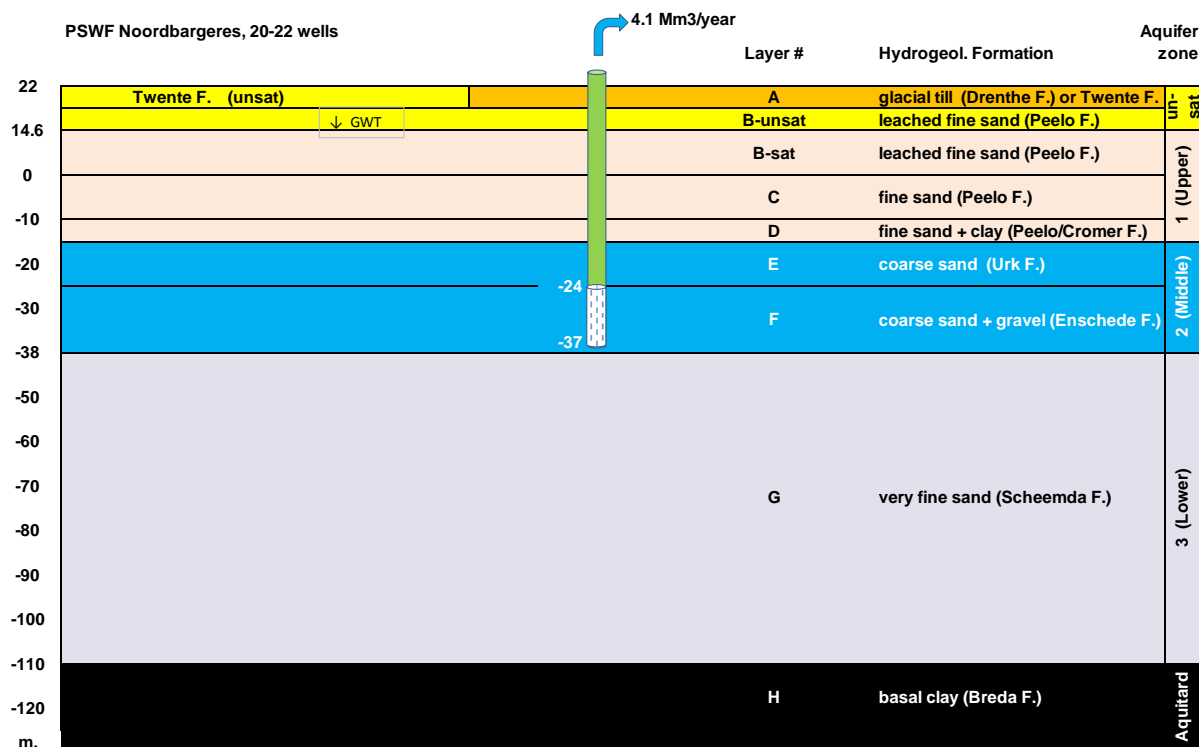


FIG. 3.1. Schematisatie van de hydrogeologische opbouw van de ondergrond van de winning Noordbargeres.

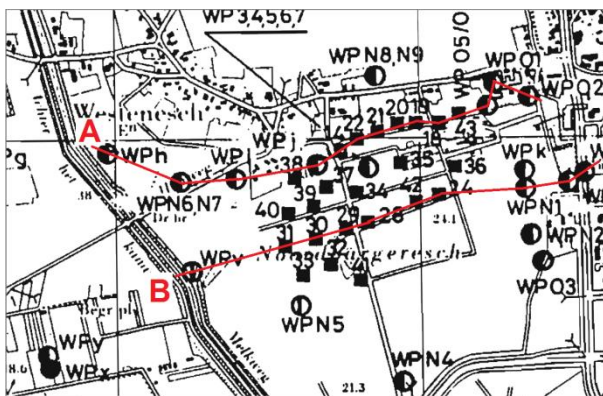
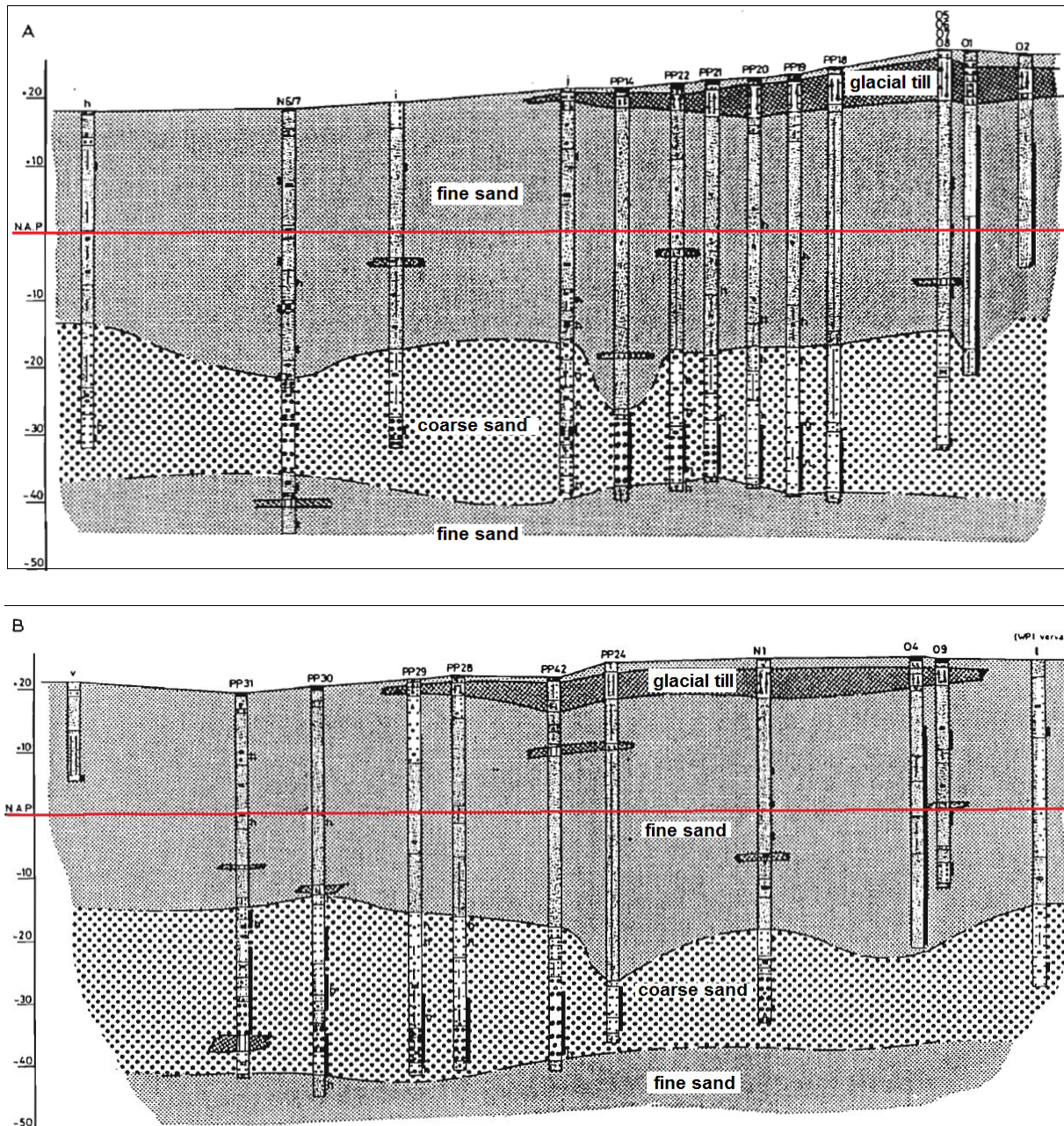


FIG. 3.2. Hydrogeologische doorsnedes A (boven) en B (beneden) over puttenveld Noordbargeres. Ontleend aan WMD 1985 (in Janssen & Puijker 1991). Grondwaterstand ca. 10.5 m+NAP bij de pompputten onder de keileem (glacial till), ca 13 m+NAP aan de linker (=west) zijde en ca. 11.5 m+NAP aan de rechter (=oost) zijde.

Fig.3.3. Locatie van doorsnedes A en B over het puttenveld Noordbargeres.

TABEL 3.1. Kenmerken van de bodemopbouw en onttrekking door puttenveld Noordbargeres. ASL = Above Sea Level = ~NAP. Gele cellen = in te vullen in Excel; Donker blauwe band = bepompte, grove aquiferzone. NB: De verticale doorlatendheid (K_v) is via een empirische formule afhankelijk gesteld van de K_h -waarde. Dit is slechts een 1^e benadering, die overigens in dit onderzoek weinig gewicht heeft.

Well construction and hydrogeology				Well field =	Noordbargeres	X-Coordinate =	255753	Y-Coordinate =	533784	Owner =	WMD				
Hydrogeol. Unit	Lithostratigraphy	Unit	Depth to base	Layer Thickness	Median grain size	Porosity by volume	K_h	K_v	c	Redox	pH	Aquifer system	Well screen	Qout screen	$\sqrt{(Khc)}$
				H [m]	d_{50} [um]	n [-]	m/d	m/d	d	level	level	Pumped Aq = A	m	m ³ /h	m
Land Surface Altitude		m ASL	22.0												
Unsaturated zone	See layer A + B	m ASL	14.6	7.4	50	0.30	1.1	0.21	35.3	O	4.8	U			
Layer A, base	glacial till (Drenthe F.) or Twente F.	m ASL	17	5.0	20	0.20	0.24	0.03	157.6	S	5	U	0	0.00	13.6
Layer B, base	leached fine sand (Peelo F.)	m ASL	0	14.6	200	0.38	10.54	6.7	2.2	S	5.2	U	0	0.00	18.3
Layer C, base	fine sand (Peelo F.)	m ASL	-10	10	190	0.36	9.68	5.7	1.8	S	5.5	U	0	0.00	13.0
Layer D, base	fine sand + clay (Peelo/Cromer F.)	m ASL	-15	5.0	105	0.35	3.64	1.1	4.4	S/A	6.5	U	0	0.00	9.0
Layer E, base	coarse sand (Urk F.)	m ASL	-26	11	625	0.35	69.1	49.3	0.22	A	6.8	A	1.5	43.7	13.0
Layer F, base	coarse sand + gravel (Enschede F.)	m ASL	-38	12	720	0.30	87.2	62.3	0.19	A	7.1	A	11.4	425.5	14.2
Layer G, base	very fine sand (Scheemda F.)	m ASL	-110	72	100	0.33	3.4	1.0	71.5	A	7.15	L	0	0.00	131.5
Layer H, base	basal clay (Breda F.)	m ASL	-250	140	10	0.30	0.1	0.01	17162.6	D	7.2	L	0	0.00	425.0
Aquifer zone 1		m ASL	-15	29.6	181	0.37	9.1	5.4	2.4						
Aquifer zone 2	Coarse grained, pumped aquifer zone	m ASL	-38	23	675	0.32	78.5	56.1	0.2						
Aquifer zone 3		m ASL	-110	72	100	0.33	3.4	1.0	71.5						
Pumped aquifer, top		m ASL	-15												
Pumped aquifer, base		m ASL	-38												
Transmissivity aquifer		KD	2300				1807								
Fresh/brackish interface	300 mg Cl/L	m BLS	115												
Various	Pumping rate PSWF	Qtot	m ³ /h	469.3											
	Top of well screen	m ASL	-24.5												
	Base of well screen	m ASL	-37.4												
	Number of pumping wells	n	20												

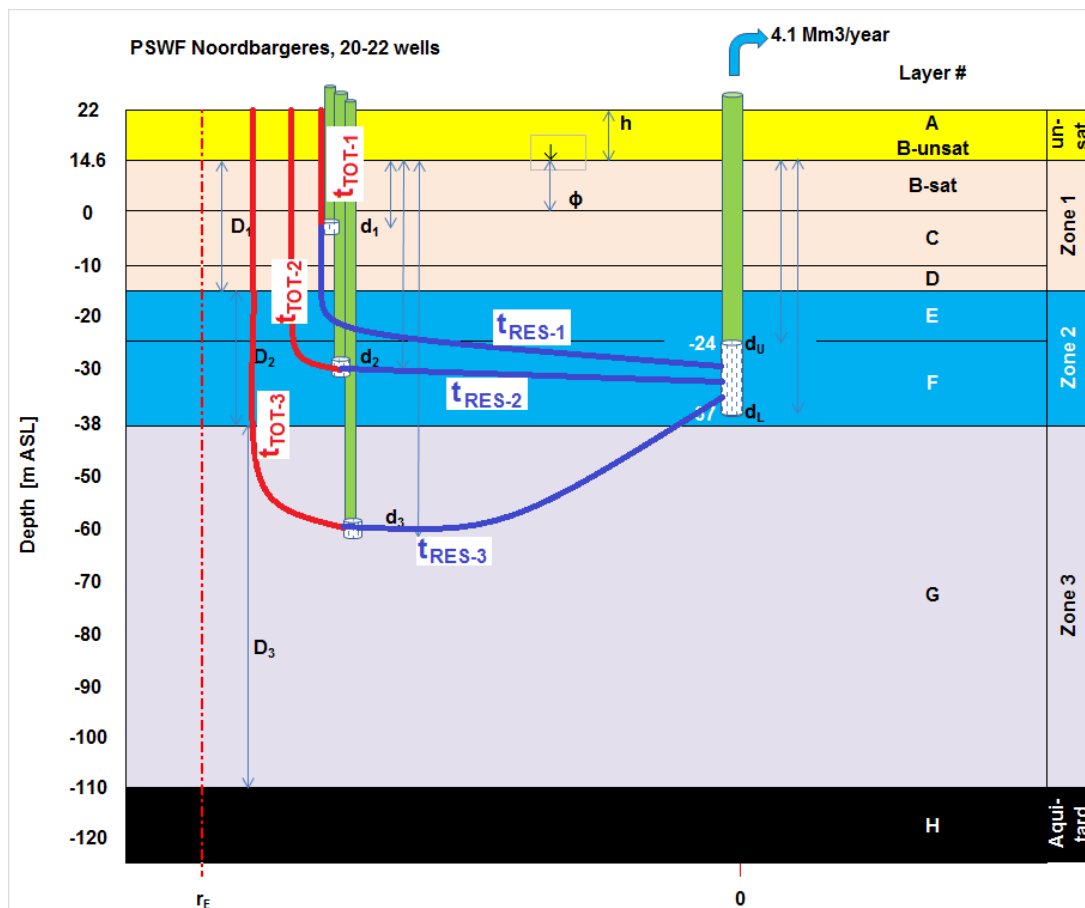


FIG. 3.4. Schematisatie van de hydrogeologische opbouw van de ondergrond van de winning Noordbargeres, met definitie van belangrijke dikte- en diepteparameters en met verduidelijking van de totale en residuele reistijd tot/van een meetpunt. r_E = straal van cirkelvormig waterwingebied. ASL = Above Sea Level = ~NAP.

$$CEC_{\text{CALC}} = 5.6 L + 5.1 (\text{pH} - 1.16) C_{\text{ORG}} \quad (3.1)$$

waarin: CEC in meq/kg droge stof, L (lutumgehalte; <2 µm) en C_{ORG} in % droge stof.

Uit Tabel 3.2 volgt dat de ondergrond grotendeels ontkalkt is en geen pyriet bevat tot ~10 m-NAP. Dit is bijgevolg de uitgeloopte, zure en relatief aërobe zone. In de keileem komen evenwel kalkrijke zones voor, zoals uit de hydrochemie van het onderliggende grondwater blijkt (Vogelaar 1990). Aquiferlagen D en E bevatten gemiddeld 2-3% kalk en 400-600 ppm pyriet. In deze zuurbufferende zone zien we dan ook de overgang van geel/bruin naar grijs gekleurd sediment, ten teken van anaërobie (Van Vugt & Van den Eijnden, 1999).

Aquiferzone 3 (laag G) bevat opvallend veel pyriet, en is in elk geval tot 44 m-NAP ontkalkt.

TABEL 3.2. Geochemische eigenschappen van de ondergrond rond puttenveld Noordbargeres. Gebaseerd op diverse gegevens in Van Vugt & Van den Eijnden (1999), Van der Grift (1999)

Zone	Hydrogeol. Unit	Lithostratigraphy	Unit	Depth	Lutum	pH-H2O	C-org	CaCO3	FeS2	CEC
				(to base)	% d.w.	% d.w.	% d.w.	% d.w.	meq/kg	
	Land Surface Altitude		m ASL	22.0						
	Unsaturated zone	See layer A + B	m ASL	14.6	1.5	4.8	0.03	0	0	9.0
1	Layer A , base	Twente F.	m ASL	17	1.5	5	0.05	0	0	9.4
	Layer A , base	glacial till (Drenthe F.)	m ASL	17	20	5.2	0.15	0.1-1	0	115.1
	Layer B , base	Leached fine sand (Peelo F.)	m ASL	0	1.5	5-7	0.02	0	0	8.8
	Layer C , base	fine sand (Peelo F.)	m ASL	-10	2	5.5-7	0.03	0	0	11.9
	Layer D , base	fine sand + clay (Peelo/Cromer F.)	m ASL	-15	4	6.5-7	0.06	3	0.06	24.0
2	Layer E , base	coarse sand (Urk F.)	m ASL	-26	1.5	6.8-7.2	0.05	2	0.04	9.8
	Layer F , base	coarse sand + gravel (Enschede F.)	m ASL	-38	0.7	6.5-7.3	0.05	0	0.02	5.4
3	Layer G , base	very fine sand (Scheemda F.)	m ASL	-110	10	6.6-7.7	0.10	0 ##	0.40	59.1
	Layer H , base	basal clay (Breda F.)	m ASL	-250						

##: in upper meters decalcified, at greater depth calcareous

3.3 Hydrochemische stratificatie

Ook de hydrochemische stratificatie van de ondergrond in Tabel 3.3 (macroparameters, sporelementen, isotopen en berekende parameters) en Tabel 3.4 (OMIVE) volgt in grote lijnen de hydrogeologische stratificatie in Tabel 3.1. De gegevens in Tabellen 3.3-3.4 onthullen het volgende patroon:

- **Ondiep, in aquiferlagen B en C**, zijn de concentraties het hoogste van O₂, CH₄, NO₃, NH₄, DOC, Al, As, Be, Cd, de zeldzame aarden (REE: vooral Dy, Er, Eu, Gd, Ho, La, Nd, Pr, Sm, Tb, Y en Yb), ²H, ¹⁸O, ³⁴S, en relatief veel verschillende pesticiden. De concentraties van Co, Ni en Zn en MOC+ (Modified Oxidation Capacity) lopen in laag C hoog op. Daarentegen is de pH het laagste en zijn de concentraties van Fe, Mn en F het laagste in B en C. De hoogste waarden van enerzijds O₂ en NO₃ en anderzijds CH₄ doen zich voor op verschillende plaatsen, resp. in gebieden zonder en met veen nabij maaiveld (Fig.3.5). Lagen B en C zijn grotendeels ontkalkt en pyrietloos, en bijgevolg zuur en doorgaans aëroob. Doordat het water relatief jong is, vertonen oudere, mobiele verontreinigingen zoals 1,2-dichloorpropan, 1,4-dioxaan en bentazon lagere concentraties dan in lagen D en E.
- **Middeldiep, in aquiferlagen D en E**, zijn de concentraties het hoogste van de meeste hoofdbestanddelen (Cl, SO₄, HCO₃, K, Ca, Mg), B, Ba, Co, Li, Mo, Ni, Se, Sr en U, ¹⁵N, 1,2-dichloorethaan, 1,2-dichlooretheen, 1,2-dichloorpropan, 1,4-dioxaan, 1,2,3-trichloorpropan, bentazon en tri, en zien we de minst negatieve verzadigingsindex van kalk (SI_c) en mangaancarbonaat (rhodochrosiet; SI_R). De concentraties van O₂, NO₃ en CH₄ zijn scherp gedaald, terwijl de concentraties van PO₄ en NH₄ tot de laagsten behoren.

TABEL 3.3. Gemiddelde concentraties van macroparameters, spore-elementen, isotopen en berekende parameters voor de 6 onderscheiden aquiferlagen (B t/m G), zoals weergegeven in Fig.3.1. m ASL = m+NAP.

Parameter	Unit	Aquifer layer					
		B	C	D	E	F	G
Depth	m ASL	14.6 - 0	0 to -10	-10 to -15	-15 to -26	-26 to -38	-38 to -110
Samples	n	32	23	14	28	26	15
O2	mg/L	4.6	2.9	0.4	0.6	0.4	0.3
CH4	mg/L	0.7	0.5	0.04	0.05	0.04	0.04
EC-20	uS/cm	479	543	738	602	434	267
Temp	oC	11.2	11.0	11.0	11.0	10.7	10.6
pH-Lab		6.21	6.27	6.56	7.12	6.93	6.85
Na	mg/L	40.1	34.9	39.4	31.4	20.6	13.5
K	mg/L	7.8	11.8	21.3	12.3	3.1	2.5
Ca	mg/L	47.6	61.0	89.1	78.8	51.4	23.5
Mg	mg/L	7.3	11.6	18.7	12.2	6.9	3.2
Fe	mg/L	1.635	2.134	4.445	4.049	17.856	19.918
Mn	mg/L	0.212	0.577	0.460	0.416	0.655	0.540
NH4	mg NH4/L	0.780	0.108	0.059	0.176	0.404	0.212
SiO2	mg SiO2/L	16.5	18.7	18.5	14.2	19.3	17.2
Cl	mg/L	59.2	58.7	87.2	61.1	42.5	23.1
SO4	mg/L	41.6	94.4	125.7	97.2	66.3	30.2
HCO3	mg/L	110	91	195	190	126	87
NO3	mg NO3/L	37.1	46.1	12.4	0.4	0.3	0.2
NO2	mg NO2/L	0.003	0.004	0.057	0.004	0.003	0.002
PO4-t	mg PO4/L	0.373	0.155	0.130	0.140	1.066	0.796
PO4-O	mg PO4/L	0.418	0.139	0.092	0.120	0.782	1.199
F	mg/L	0.06	0.03	0.06	0.06	0.09	0.17
DOC	mg/L	4.6	3.4	3.1	3.6	2.5	1.7
Al	ug/L	143.4	25.0	3.8	3.9	2.7	7.2
As	ug/L	4.2	1.8	0.8	1.9	1.1	1.9
B	ug/L	43	62	77	60	13	20
Ba	ug/L	34	47	72	38	36	47
Be	ug/L	0.30	0.52	0.04	0.03	0.03	0.03
Cd	ug/L	0.15	0.60	0.35	0.08	0.05	0.07
Co	ug/L	1.8	14.8	13.4	0.8	0.5	0.5
Cr	ug/L	0.9	0.6	0.6	0.4	0.5	0.5
Cu	ug/L	2.5	2.4	1.9	2.0	2.3	2.4
Gd	ug/L	0.16	0.21	0.02	0.01	0.01	0.01
La	ug/L	0.23	0.56	0.08	0.02	0.01	0.03
Li	ug/L	4.2	8.2	9.5	4.7	3.9	3.3
Mo	ug/L	0.06	0.13	0.09	0.42	0.13	0.20
Nd	ug/L	0.46	0.72	0.10	0.05	0.04	0.06
Ni	ug/L	4.9	35.5	24.4	94.2	0.6	0.6
Pb	ug/L	0.6	0.7	0.4	0.4	0.5	0.6
Rb	ug/L	3.1	3.3	2.4	2.9	1.7	2.7
Sb	ug/L	0.06	0.09	0.10	0.03	0.35	<0.05
Se	ug/L	0.7	0.6	0.8	0.3	0.3	0.3
Sr	ug/L	120	263	311	215	182	154
Th	ug/L	0.03	0.07	0.03	0.03	0.08	0.03
U	ug/L	0.03	0.02	1.71	1.24	0.01	0.01
V	ug/L	2.0	0.5	0.5	0.2	0.6	0.1
Y	ug/L	0.9	1.4	0.2	0.1	0.1	0.1
Zn	ug/L	11.4	40.6	10.4	5.0	4.2	4.0
2H	‰ SMOW	-44.1	-47.1	-47.5	-45.8	-49.4	-48.4
18O	‰ SMOW	-6.6	-7.1	-7.0	-6.8	-7.4	-7.3
15N-NO3	‰	5.8	17.4	20.8	7.2	4.5	
34S-SO4	‰	11.1	3.0	2.6	5.0	-3.0	-12.4
Watertype		F1CaMix+	F1CaMix+	F2CaMix+	F2CaMix+	F2CaMix+	g1CaHCO3o
SI-C	calcite	-1.69	-1.65	-0.92	-0.40	-0.92	-1.44
SI-S	siderite	-0.94	-0.88	0.02	0.55	0.85	0.71
SI-R	rhodochrosite	-1.54	-1.17	-0.68	-0.15	-0.30	-0.57
TIC	mmol/L	4.68	3.54	5.41	3.72	2.71	1.97
Acidity	pH-class	c	c	c	c	c	c
	SI-class	a	a	c	c	c	a
Redox type		2.7	2.7	3.5	5	5	5
Redox code		m	m	m	r	r	r
HYSA code		mf	mf	mf	rf	r	r
MOC+	me/L	6.09	10.62	10.09	7.04	4.47	1.82

TABEL 3.4. Gemiddelde concentraties van organische microverontreinigingen voor de 6 onderscheiden aquiferlagen (B t/m G), zoals weergegeven in Fig.3.1. m ASL = m+NAP. 0.000 = <MDL.

Parameter	Compound	unit	Aquifer layer					
			B	C	D	E	F	G
Depth		m ASL	14.6 - 0	0 to -10	-10 to -15	-15 to -26	-26 to -38	-38 to -110
Samples		n	25	18	10	22	24	14
11dcea	1,1-Dichloorethaan	µg/L	0.000	0.000	0.000	0.000	0.343	0.000
11dcee	1,1-Dichlooretheen	µg/L	0.000	0.000	0.009	0.006	0.130	0.000
12dcee	1,2-dichlooretheen (cis)	µg/L	0.000	0.014	0.030	0.048	0.000	0.000
12dcea	1,2-dichloorethaan	µg/L	0.000	0.009	0.000	0.016	0.003	0.000
12dcpa	1,2-dichloorpropaan	µg/L	0.014	0.162	0.011	1.214	0.101	0.000
14diox	1,4 dioxaan	µg/L	0.000	0.041	0.056	1.014	0.225	0.000
123tcpa	1,2,3-trichloorpropaan	µg/L	0.001	0.008	0.000	0.040	0.000	0.000
124tmben	1,2,4-trimethylbenzeen	µg/L	0.001	0.003	0.000	0.002	0.000	0.002
2c1prope	2-chloor-1-propeen	µg/L	0.000	0.000	0.000	0.005	0.001	0.000
34nfenol	3+4-nitrofenol	µg/L	0.031	0.028	0.016	0.016	0.012	0.016
bam	2,6-dichloorbenzamide	µg/L	0.003	0.007	0.000	0.006	0.000	0.000
bentazon	bentazon	µg/L	0.017	0.023	0.093	0.023	0.051	0.004
biph.eth	biphenylether	µg/L	0.031	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
bromacil	bromacil	µg/L	0.009	0.003	0.000	0.000	0.000	0.000
carbenda	carbendazim	µg/L	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
clidazon	chloridazon	µg/L	0.008	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
diuron	Diuron	µg/L	0.081	0.181	0.000	0.000	0.000	0.000
ethofmst	ethofumesaat	µg/L	0.015	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
glyfosaa	glyfosaat	µg/L	0.006	0.011	0.011	0.008	0.004	0.000
mcpp	mecoprop	µg/L	0.005	0.011	0.021	0.010	0.024	0.004
per	tetrachlooretheen (per)	µg/L	0.018	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
thf	tetrahydrofuraan	µg/L	0.015	0.021	0.018	0.006	0.000	0.000
tri	trichlooretheen (tri)	µg/L	0.008	0.004	0.000	0.200	0.000	0.000
vinylchl	chlooretheen (vinylchloride)	µg/L	0.039	0.041	0.023	0.000	0.478	0.000

Lagen D en E zijn kalk- en pyriethoudend, hetgeen de duidelijke afname van zuur en oxidatoren verklaart alsmede de toename van o.a. Ca, HCO₃ en Sr vanuit kalk, en van SO₄, Co en Ni vanuit pyriet. De hogere ouderdom van het water (t.o.v. de ondiepere aquiferlagen) verklaart waarom oudere, mobiele verontreinigingen zoals 1,2-dichloorpropaan, 1,4-dioxaan en bentazon hogere concentraties vertonen dan in lagen B en C.

- **Diep, in aquiferlagen F en G,** zijn de concentraties het hoogste van Fe, Mn, PO₄ en F, en is de verzadigingsindex van ijzer(II)carbonaat (sideriet; Si₂) het hoogst. De concentraties van de meeste hoofdelementen, spore-elementen en organische microverontreinigingen bereiken in laag G de laagste waarde. Het water is het oudst en minst verontreinigd.

Voor belangrijke conclusies en aanbevelingen m.b.t. de monitoring → § 7.3.

3.4 LithoGeoChemical (LGC)

In Excel zijn door de auteur bouwstenen geprogrammeerd voor een model dat enerzijds sedimentologische of lithologische kenmerken en aanvullende informatie uit een pompproef omrekent in horizontale en verticale doorlatendheid, porositeit en bergingscoëfficiënt voor te onderscheiden aquiferlagen, en anderzijds geochemische analyseresultaten (b.v. van XRF, thermogravimetrie en diverse extracties) vertaalt in reactieve bodembestanddelen (zoals bulk organisch materiaal, pyriet, CEC, kalk, ferrihydriet en diverse silicaatmineralen). In samengesmede vorm zou deze tool LithoGeochemical mogen heten. Dit vergt echter nog enig werk.

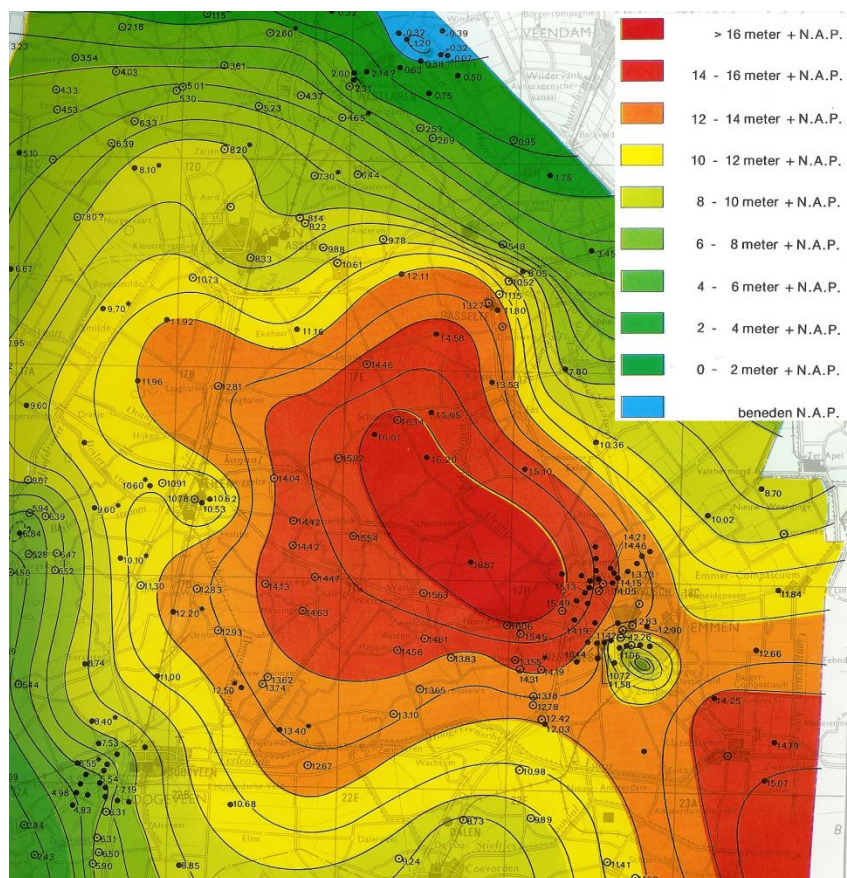
4 Hydrologische systeemanalyse

Het hydrologische systeem van een puttenveld wordt, na het bereiken van hydrologisch evenwicht (geen verdere expansie van de afpompingskegel), grotendeels gedictieerd door het intrekgebied (waterwingebied), de Hydrologische Respons Curve (HRC; zijnde de cumulatieve reistijdverdeling) en de positie van het kunstmatige winsysteem in het (supra)regionale (grotere) hydrologische systeem, zijnde het glaciële plateau systeem (Engelen et al., 1988).

4.1 Isohypsens, grootte en vorm intrekgebied

4.1.1 Isohypsens en stijghoogten

Isohypsenskaarten van de grondwaterstand in en rond het intrekgebied zijn gepresenteerd door RID (1975), Beugelink (in Janssen & Puijker 1986) en Van der Moot (1991). Hun afbeeldingen zijn weergegeven in resp. Fig.4.1-4.2, 4.3 en 4.4. Deze figuren tonen in de bebompte aquifer een regionale stromingsrichting vanuit het noordwesten, terwijl de grondwaterwinning door puttenveld Noordbargeres (4.1 Mm³/j) westelijk van Emmen en die door ENKA (5.5 Mm³/j) en DOMO (0.5 Mm³/j) zuidelijk van Emmen voor een grote, tweedelige afpompingskegel zorgen.



De stijghoogteverdeling in de verticaal (Fig.4.5) laat slechts een geringe verlaging in de bebompte aquiferzone 2 zien. Dit wijst op geringe hydraulische weerstand van aquifer zones 1 en 3, en een hoge doorlatendheid van zone 2. De afdekkende keileem in het oostelijk deel van het intrekgebied (Fig.3.5) ligt boven de freatische grondwaterspiegel, maar zou tijdelijk of plaatselijk kunnen leiden tot een schijngrondwaterspiegel.

FIG. 4.1. Fragment van de isohypsenskaart door RID (1975) van het grondwater in het grove, bebompte pakket d.d. 28-4-1971.

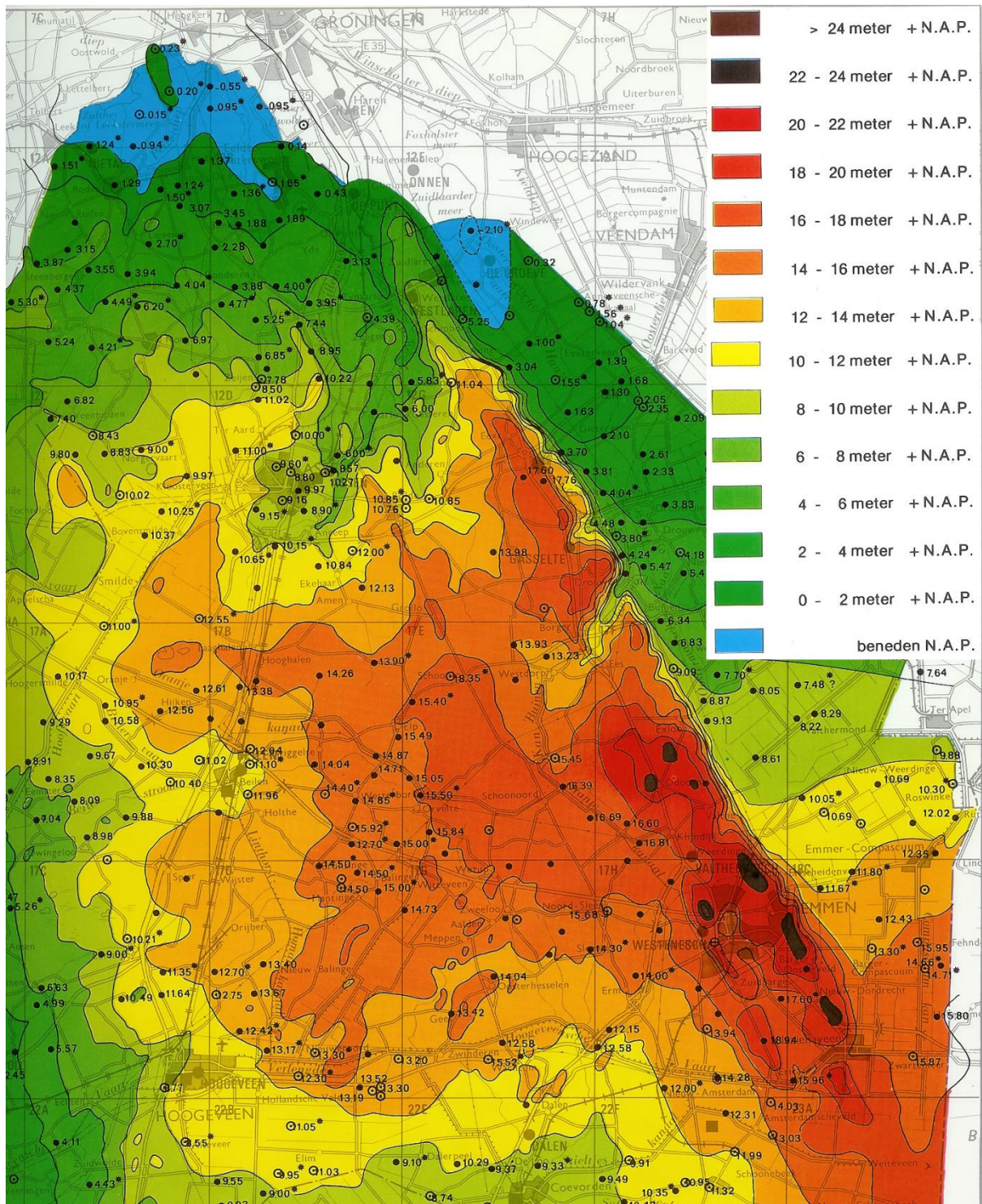


FIG. 4.2. Fragment van de isohypsenkaart door RID (1975) van het fretische grondwater d.d. 28-4-1971.

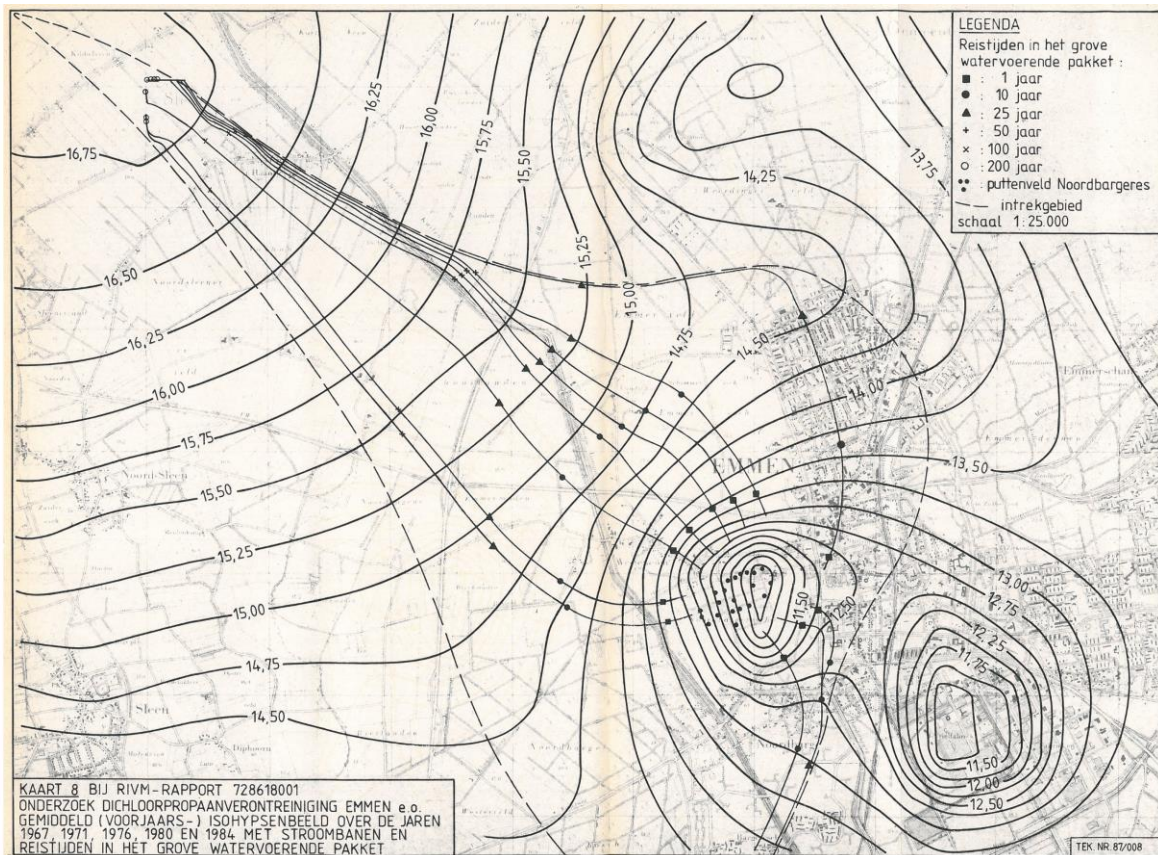


FIG. 4.3. Isohypsens, stroombanen en residuele reistijden van het grondwater in het grove, gepompte pakket. Naar Beugelink (1987).

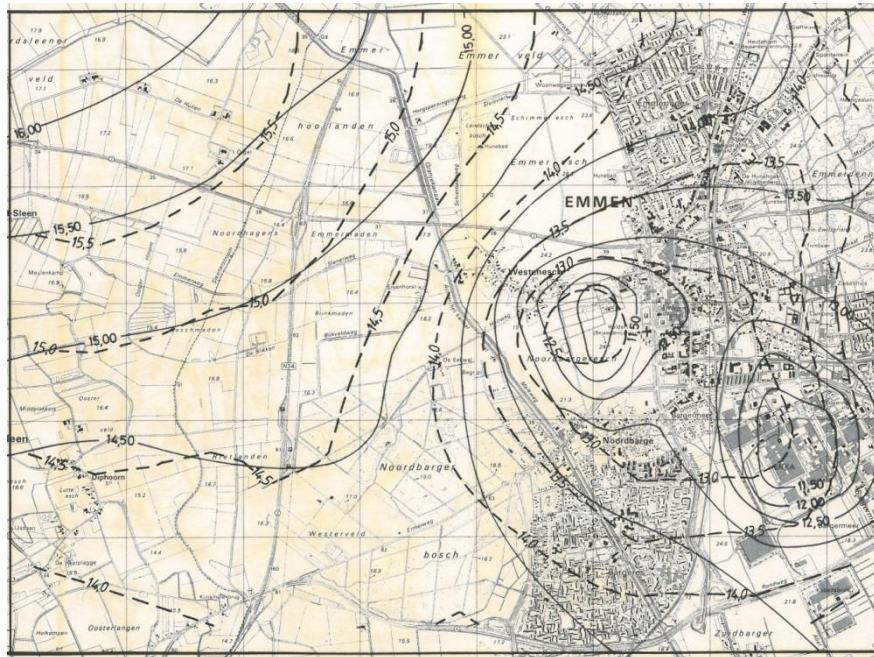


FIG. 4.4. Isohypsens in het bovenste fijne pakket in m+NAP, op basis van meetwaarden (doorgetrokken lijnen) en modelberekening (streeplijnen) voor de periode 1967-1984. Naar Van der Moot (1991).

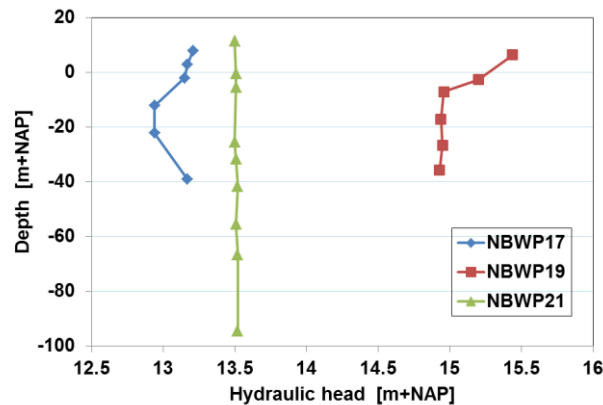


FIG. 4.5. Verloop van de voor 2011 gemiddelde stijghoogte met de diepte op 3 meetpunten binnen het waterwingebied Noordbargeres. Waarnemingsput 17 is gelegen dicht bij de zuidelijke pompputten, 19 relatief ver noordwestelijk, en 21 relatief ver zuidoostelijk van het puttenveld.

4.1.2 Grootte en vorm intrekgebied

De grootte van het intrekgebied (A ; m^2) kan, indien cirkelvormig, benaderd worden met de volgende vergelijking:

$$A = Q / R = \pi r_E^2 \quad (4.1)$$

waarin: Q = totale waterwinning puttenveld [m^3/d]; r_E = straal van cirkelvormig intrekgebied [m]; R = grondwateraanvulling [m/d].

Invulling van $Q = 11263 \text{ m}^3/d$ en $R = 0.30 / 365.25 = 0.00082 \text{ m/d}$ levert op $A = 13.71 \text{ km}^2$ en $r_E = 2089 \text{ m}$. Het isohypsenpatroon en het hier gehanteerde isochronenpatroon (Fig.4.8) onthullen evenwel dat de vorm niet cirkelvormig is, maar bij grove benadering ellipsoidaal, met een excentrisch epicentrum (Fig.4.6).

De in Fig.4.6 weergegeven vorm is uit de cirkel met straal r_E verkregen door deze cirkel in 360 segmenten te verdelen en elk segment zodanig uit te rekken of in te korten totdat de gewenste vorm ontstaat, waarbij het epicentrum van de winning gehandhaafd blijft en ook het totale oppervlak gelijk blijft. Fig.4.6 met bijbehorende tabel verklaart hoe dit werkt. In dit geval is gewerkt met 6 cirkelsegmenten waarvoor de vervormingsfactor F gedefinieerd is (via trial and error) en waarbij de tussenliggende cirkelsegmenten lineair geïnterpoleerd zijn.

De resulterende vervorming leidt tot uitrekking van het intrekgebied in noordwestelijke richting en compressie in zuidoostelijke richting. Naventant worden ook de isohypsen en isochronen vervormd en dienovereenkomstig berekend.

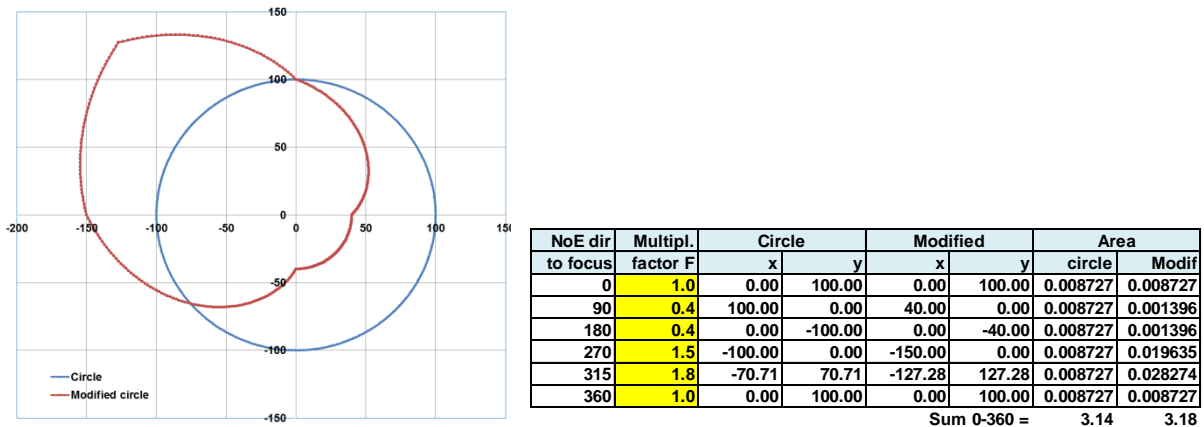


FIG. 4.6. Transformatie van het denkbeeldige cirkelvormige intrekgebied met straal r_c (100 = 2089 m) in de waargenomen vorm (afgeleid uit isohypsenpatroon Eijsink, 1985), waarbij $X=Y=0$ de positie van het epicentrum van de winning aangeeft. De vervormingsfactor F verandert lineair tussen de aangegeven cirkelsegmenten: b.v. tussen 0 en 90 N°E neemt F af met $(1.0 - 0.4)/90 = 0.00667$ per graad.

4.1.3 Grondwaterstanden

De ligging van de grondwaterspiegel is tevens van belang voor de reistijden van water in zowel de onverzadigde als verzadigde zone. Omdat van alle meetpunten in 2011 de grondwaterkwaliteit geanalyseerd is in de 6-jaarlijkse exploratieronde, zijn ook de gemiddelde gemeten grondwaterstanden in 2011 beschouwd (verkregen via DINO-loket). Om te controleren of de cirkeltransformatie goed werkt, zijn de grondwaterstanden berekend met Thiem's oplossing, waarbij de cirkelvormige verlaging op vergelijkbare wijze getransformeerd is volgens:

$$\phi_x = Q/(2 \pi K_2 D_2) * \ln(F_\alpha r_x) + 8 \quad [m+NAP] \quad (4.2)$$

Waarin: ϕ_x = grondwaterstand [m+NAP]; Q = totale waterwinning puttenveld [m^3/d]; $K_2 D_2$ = transmissiviteit aquiferzone 2 in Fig.3.1 [m^2/d]; r_x = (radiale) afstand van meetpunt X tot epicentrum puttenveld [m]; F_α = vormfactor F in Fig.4.6, variërend van 0.4 -1.8 in afhankelijkheid van de kompasrichting α_x [N°E] van meetpunt x t.o.v. epicentrum puttenveld [-]; 8 = geschatte ϕ op 1 m afstand van epicentrum puttenveld [m+NAP].

Het *epicentrum van het puttenveld* met coördinaat X_0, Y_0 is berekend als naar afvoer gewogen gemiddelde van de X en Y coördinaten van elke put afzonderlijk. De afstand (r_x ; m) van meetpunt x met coördinaat X,Y [m] tot het epicentrum X_0, Y_0 [m] bedraagt:

$$r_x = \sqrt{(X - X_0)^2 + (Y - Y_0)^2} \quad (4.3)$$

De kompasrichting α_x [N°E] van elk meetpunt tot het epicentrum van de winning hangt als volgt af van het cirkelkwadrant:

$$\begin{aligned} \alpha_x &= \text{DEGREES}(\text{ATAN}(\text{SLOPE}(X:X_0, Y:Y_0))) \text{ als } X > X_0, Y > Y_0 \\ \alpha_x &= 180 + \text{DEGREES}(\text{ATAN}(\text{SLOPE}(X:X_0, Y:Y_0))) \text{ als } X < X_0, Y < Y_0 \text{ of als } X > X_0, Y < Y_0 \\ \alpha_x &= 360 + \text{DEGREES}(\text{ATAN}(\text{SLOPE}(X:X_0, Y:Y_0))) \text{ als anders.} \end{aligned} \quad (4.4)$$

De resultaten van berekening kunnen vergeleken worden met meetresultaten voor 14 waarnemingsputten in Fig.4.7. De correlatie tussen beiden is goed te noemen, waarbij de toegevoegde term F_α aanzienlijk bijdraagt aan het goede resultaat.

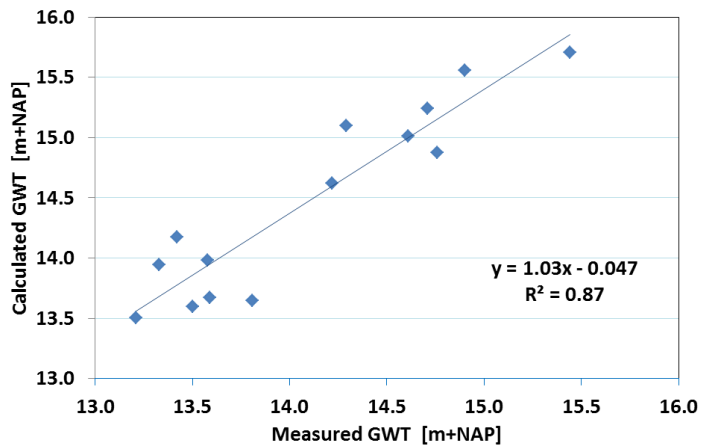


FIG. 4.7. Gemeten en met Eq.4.2 berekende grondwaterstand (GWT) binnen het intrekgebied Noordbargeres. De gemeten GWT betreft de gemiddelde stand in 2011.

4.2 De Hydrologische Respons Curve

4.2.1 Definitie en analytische berekening

De Hydrologische Respons Curve (HRC) van een puttenveld bestaat uit zijn cumulatieve reistijdverdeling, van maaiveld tot en met putfilter, tijdens stationaire afpompings. In onderstaande Eq.4.5 wordt een eenvoudige analytische oplossing gepresenteerd, welke gebaseerd is op de *residuele reistijdverdeling* naar een put met volkomen filter in een freatische aquifer, conform o.a. Raats (1978), van Ommen (1985) en Broers (2002), doch nu met verdiscontering van extra reistijd in zowel de onverzadigde zone (t_{UNS}) als de verzadigde zone tot de bovenkant van het putfilter (t_v):

$$t_{TOT-1} = t_{UNS} + \frac{nD}{R} \ln \left(\frac{1}{1 - (r/r_E)^2} \right) + t_v \quad (4.5)$$

$$t_{UNS} = (hV + \varepsilon c) / R \quad (4.6)$$

waarin: t_{TOT-1} = totale reistijd van maaiveld t/m pompput [j]; t_{UNS} = gemiddelde reistijd in onverzadigde zone [j]; t_v = extra verticale reistijd in verzadigde zone om bovenkant onvolkomen putfilter te bereiken [j]; n = effectieve porositeit aquifer [volumefractie]; D = gemiddelde totale dikte waterverzadigde zone in hele aquifer [m]; R = grondwateraanvulling [m/j]; r = radiale afstand tot put [m]; r_E = radiale afstand tot rand intrekgebied [m]; h = gemiddelde dikte onverzadigde zone [m]; V = gemiddelde vochtgehalte onverzadigde zone [volumefractie]; ε = porositeit volcapillaire zoom [volumefractie]; c = dikte volcapillaire zoom [m].

In Eq.4.5 (zonder t_{UNS} en zonder t_v) veronderstellen we dat het gepompte aquifersysteem homogeen, isotroop, van beperkte omvang en met uniforme voeding is, en dat het puttenveld geschematiseerd kan worden tot een enkele winput met putfilter over de hele dikte van de (waterverzadigde) aquifer en met gelijke waterlevering over de diepte. Volgens Broers (2002), die verschillende scenario's doorrekende en met een 3D model controleerde, maakt een al dan niet gelaagde bodemopbouw

(evenwel zonder echte aquitards) of een al dan niet volkomen putfilter weinig verschil, zodat Eq.4.5 voor Noordbargeres een redelijke benadering vormt ondanks een duidelijk gelaagde bodemopbouw en een erg onvolkomen putfilter (Fig.3.1).

Toch zal het relatief diepliggende, onvolkomen putfilter moeten leiden tot (enige) verhoging van de reistijd in de verzadigde zone. Deze verhoging is opgenomen in Eq.4.5 als term t_v . De waarde hiervan is geschat aan de hand van de kortste reistijd tot het puttenveld volgens Foppen & Kremers (1997), zijnde 9.1 jaar.

Bij de bepaling van t_{UNS} is aangenomen dat de dikte van de onverzadigde zone relatief constant is en hierin propstrooming heerst. Van Lanen (1984) geeft details over hoe V te berekenen valt uit de modale korrelgrootte van de onverzadigde zone en het jaartotaal van de neerslag (N ; m/j). Daaruit volgen voor Noordbargeres met fijnzand en $N = 0.8$ m/j: $V = 0.10-0.15$, $\epsilon = 0.3$ and $c = 0.5$ m.

Invulling van $(r/r_E)^2 = 0.01P_X$, waarin $P_X =$ percentiel X [0-99.999], in Eq.4.5 geeft na herschrijven:

$$t_{TOT} = t_{UNS} - \frac{nD}{R} \ln(1 - 0.01P_X) + t_v \quad (4.7)$$

Resultaten van berekening met Eq.4.7 zijn gepresenteerd in Tabel 4.2 en worden besproken in samenhang met de resultaten van 3D-modeluitkomsten en toetsing aan tritiummetingen in § 4.4.

4.2.2 3D modeluitkomsten

Eijsink (1985), Beugelink (1987), Van der Moot (1991) en Foppen & Kremers (1997) presenteerden de *residuele reistijden* in de grove, gepompte aquifer (zone 2 in Fig.3.1) en/of de totale ondergrondse verblijftijden vanaf de grondwaterspiegel (dus zonder reistijd in de onverzadigde zone) tot de bovenzijde van aquiferzone 2 of tot de pompputten, op basis van 3D modelberekeningen. Eijsink (1985) gebruikte FLOP om de residuele reistijdverdeling te bepalen (Fig.4.8). De resultaten van Beugelink (1987) in Fig.4.3 betreffen eveneens de residuele reistijd en komen bij benadering overeen met die van Eijsink. Van der Moot (1991) gebruikte MODFLOW in combinatie met BOUFLOW, en Foppen & Kremers (1997) gebruikten een aangepast MODFLOW model (voortbordurend op Van der Moot's model), om de reistijd van het grondwater vanaf de grondwaterspiegel tot en met de bovenzijde van de grove, gepompte aquifer (top van laag E) te bepalen.

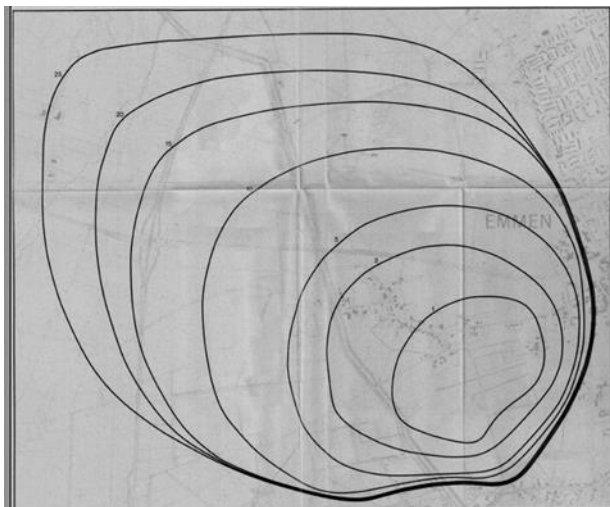


FIG. 4.8. Isolijnen voor de residuele reistijd in de grove, gepompte aquifer (lagen E en F) naar de pompputten. Naar Eijsink (1985).

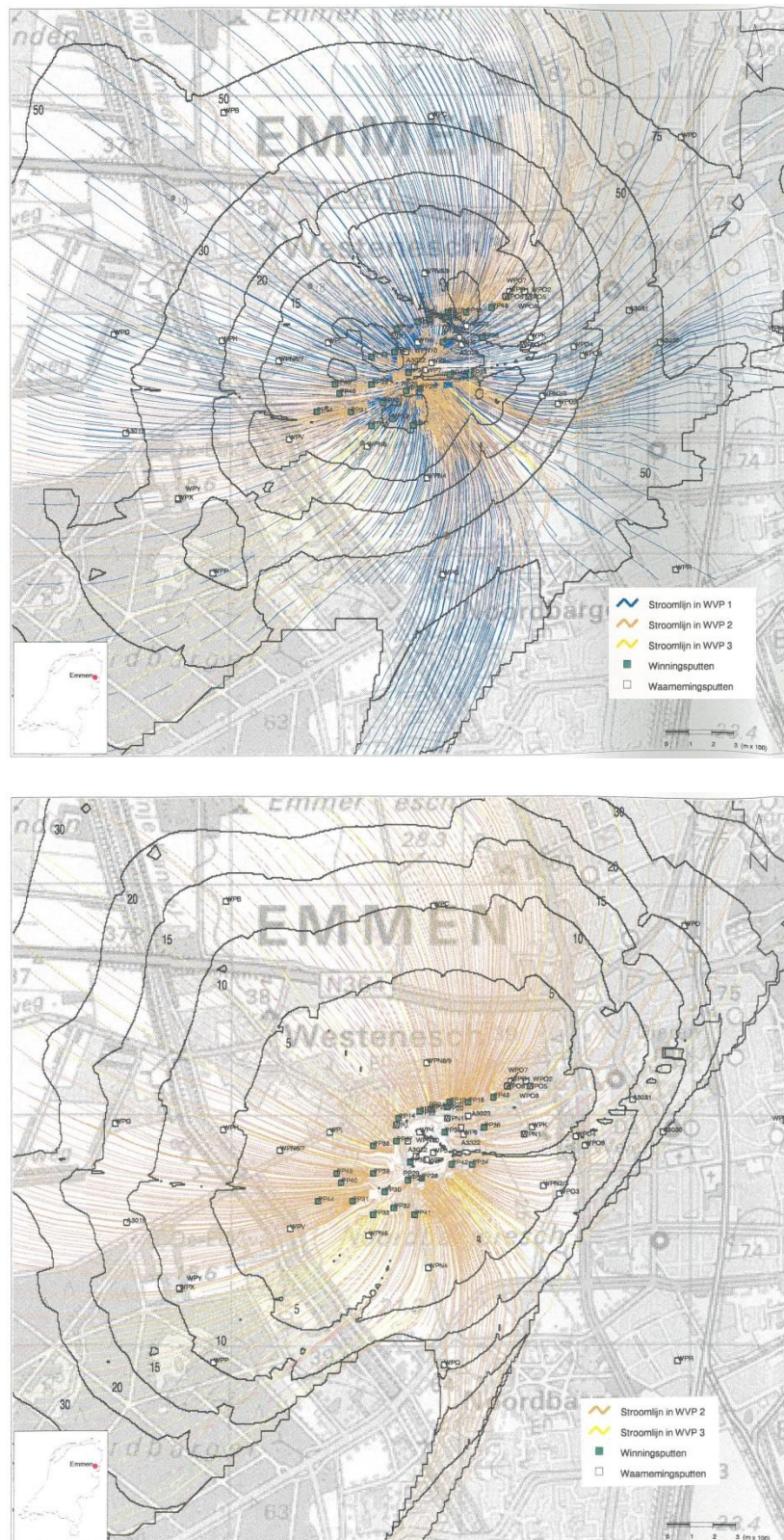


FIG. 4.9. Boven: Isolijnen voor de reistijd van grondwater vanaf de grondwaterspiegel tot en met de bovenzijde van de grove, gepompte aquifer (top van laag E). Onder: Isolijnen voor de 'residuele reistijd' in de grove, gepompte aquifer (lagen E en F) naar de pompputten. Naar Foppen en Kremers (1997).

De resultaten van Van der Moot stemmen grosso modo overeen met die van Foppen & Kremers, welke zijn weergegeven in Fig.4.9 Boven. De door laatstgenoemden tevens berekende residuele reistijden zijn gepresenteerd in Fig.4.9 Onder. Zij zijn ruim 2 maal langer dan die volgens Eijsink. Het is onduidelijk wat dit grote verschil verklaart, omdat de auteurs geen nadere informatie verschaften over belangrijke parameters zoals de effectieve porositeit, positie van de putfilters (volkomen of onvolkomen, diepteligging indien onvolkomen), rol van aquiferzone 3 (zie Fig.3.1) etc.

Foppen & Kremers (1997) presenteerden als enigen de volledige HRC (Fig.4.11), alsmede ook de bijdrage van verschillende typen landgebruik/water aan de HRC (Tabel 4.1). Daarbij zijn onderscheiden: regenwater op landbouw areaal, bos en stedelijk gebied, en oppervlaktewater vanuit het Oranjekanaal en sloten.

TABEL. 4.1. Bijdrage van verschillende typen landgebruik aan de HRC. Data ontleend aan grafieken van Foppen & Kremers (1997).

year	Rain			Total	Rest		Overall
	Agric	Urban	Forest	rain	canal	ditches	Sum
	%	%	%	%	%	%	%
5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.0
10	3.64	0.00	0.00	3.64	0.11	0.04	3.8
15	23.64	0.00	0.00	24.18	0.76	0.25	25.2
20	30.91	0.00	0.55	30.91	0.97	0.32	32.2
30	40.00	0.91	1.82	42.73	1.34	0.45	44.5
50	56.36	8.18	2.73	67.27	2.11	0.70	70.1
75	64.55	17.27	3.64	85.46	2.69	0.90	89.0
100	67.27	20.00	4.18	91.46	2.87	0.96	95.3
150	69.09	21.82	4.55	95.46	3.00	1.00	99.5

4.3 Principe van tritium validatie en calibratie

In 1983 en in 2004 is het ruwwater van Noordbargeres geanalyseerd op tritium (^3H , de zwaarste en tevens enige radioactieve isotoop van waterstof, in H_2O). Dit biedt een handvat bij het valideren en calibreren van de hydrologisch bepaalde HRC van een put of puttenveld (Mendizabal & Stuyfzand, 2009). Regenwater kent n.l. een bijzonder verloop sedert 1950 toen bovengrondse kernproeven de activiteit verhoogden terwijl de ban op bovengrondse proeven in een sterke daling resulteerde sinds 1966. Dit verloop (Fig.4.10) is op veel lokaties in Nederland teruggevonden in het ondiepe grondwater (Meinardi 1993, Stuyfzand, 1993) dankzij quasi-conservatief gedrag van tritium in de bodem. Quasi-conservatief omdat tritium natuurlijk wel radioactief verval kent ($t_{1/2} = 12.264$ j), maar geen andere bronnen van af- of toename. Het ^3H -inputsignaal moet derhalve gecorrigeerd worden tot een specifieke referentiedatum (t_R), meestal zijnde de datum van het vergelijkende onderzoek, volgens:

$${}^3H_R = {}^3H_A e^{-0.6931(t_R - t_A)/12.264} \quad (4.8)$$

waarin: t_A = digitale datum van tritiumanalyse (b.v. 30 augustus 1983 = 1983.66); 3H_A = tritium activiteit op analysedatum; 3H_R = tritiumactiviteit gecorrigeerd voor verval tot referentiedatum.

De meetwaarde van het ruwwater (3H_M) dient vervolgens vergeleken te worden met de voorspelde tritiumactiviteit (${}^3H_{HRC}$) op basis van de hydrologisch bepaalde HRC en het verloop van de jaargemiddelde tritium input (gecorrigeerd voor verval tot het jaar van meting van ruwwater) volgens:

$${}^3H_{HRC} = 0.01[({}^3H_{IN})_1 + ({}^3H_{IN})_2 + \dots + ({}^3H_{IN})_{99} + ({}^3H_{IN})_{100}] \quad (4.9)$$

waarin: ${}^3H_{HRC}$ = met HRC voorspelde gemiddelde tritiumactiviteit voor puttenveld op referentiedatum t_R (TU); $({}^3H_{IN})_X$ = voorspelde tritiumactiviteit voor percentiel X op referentiedatum t_R (TU).

Bij het bepalen van ${}^3H_{HRC}$ dienen alle datums afgerond te worden op hele jaren ten behoeve van de zoekfunctie in Excel en ter aansluiting op de beschikbare tritium inputgegevens (jaargemiddelden). Ter verdiscontering van dispersie, is gewerkt met het 5 jaars 'Centralized Moving Average' van de tritiuminput en de ${}^3H_{HRC}$ bepaling met intervallen van 1 jaar.

Als ${}^3H_{HRC}$ significant afwijkt van 3H_M , dan zijn er 2 opties: (i) de parameters in Eq.4.7 ter berekening van de HRC worden bijgesteld totdat een betere overeenkomst wordt bereikt, of (ii) de reistijden volgens de HRC worden vermenigvuldigd met $({}^3H_{HRC} / {}^3H_M)$. Optie i verdient de voorkeur vanwege te verkrijgen inzicht in de parameterwaarden.

Een belangrijk kengetal in de HRC is het percentage 'jong' grondwater (%Y), gedefinieerd als water dat infiltreerde na 1953 en daardoor (nog steeds) een significante (meetbare) tritiumactiviteit vertoont (Fig.4.10) en dus relatief veel moderne verontreinigingen. Dit %Y kan direct berekend worden uit de HRC, door herschrijven van Eq.4.7 tot:

$$\%Y = 100 (1 - \exp(R\{t_{UNS} + t_V - \Delta t\}/nD)) \quad (4.10)$$

waarin: $\Delta t = t_s - 1953.0$ [jaar]; t_s = digitale datum bemonstering [jaar]; 1953.0 = datum waarvóór tritium in regenwater vrijwel natuurlijk was en na verblijf in de bodem of monsterfles in b.v. 1983 vrijwel verwaarloosbaar.

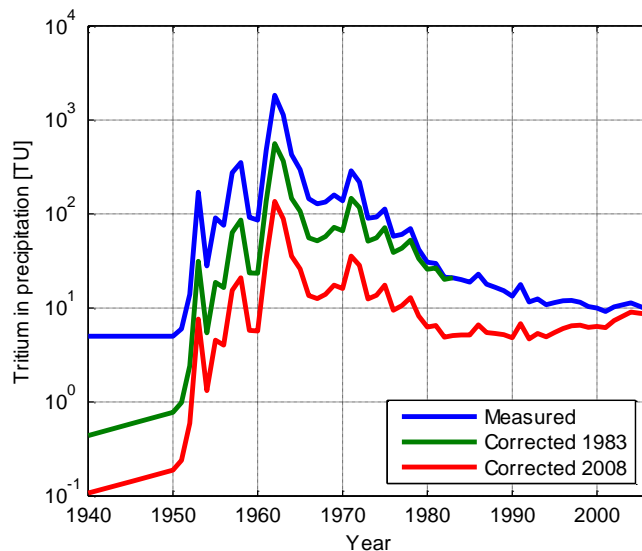


Fig.4.10. Tritiumactiviteit van bulk regenwater op meetstation Groningen zonder en met correctie voor radioactief verval in 1983 en 2008. Periode 1940-1969 = reconstructie volgens Stuyfzand (1993); period 1970-2006 = data verkregen via database WISER van International Atomic Energy Agency (IAEA).

4.4 Resultaten van vergelijking met tritium validatie en calibratie

De HRC volgens het 3D-model van Foppen & Kremers (1997) kan in Tabel 4.2 vergeleken worden met de analytisch berekende HRC volgens Eq.4.7, waarbij 10 scenario's zijn onderscheiden op basis van de invoerparameters R, n, V en diepteligging van de basis van de aquifer. Scenario #2 wijkt vooral af van scenario's 3-11 door de onderzijde van aquiferzone 2 als hydrologische basis van de aquifer te nemen. Deze setting levert de beste vergelijking op met het 3D-model (Fig.4.11). Zowel het 3D-model als scenario #2 leidt echter tot een slechte voorspelling van de in 1983 gemeten tritiumactiviteit (Tabel 4.2). Scenario #9 presteert op dit punt het beste, aanzienlijk beter dus dan het 3D-model. Het komt erop neer dat het 3D-model qua korte reistijden (P_0 - P_{10}) nog redelijk overeenkomt met de analytische berekeningen, maar qua langere reistijden tekort schiet, hetgeen de te hoge tritiumvoorspelling door het 3D-model verklaart. De overeenkomst tussen het 3D-model en scenario #2 doet vermoeden dat aquiferzone 3 in beide gevallen niet/onvoldoende meedoet.

De met scenario's 6 en 7 berekende tritiumactiviteit in 2004 benadert de meetwaarde het beste, maar de verschillen met de andere scenario's zijn te gering om hieraan veel gewicht te geven. Met andere woorden, de tritiumverificatie en calibratie aan de meting in 1983 is aanzienlijk gevoeliger en waardevoller dan die in 2004.

Vergelijking van de voorspelde residuele reistijd volgens het analytische model en de 3D modellen van TNO (Foppen & Kremers 1997) en KWR (Eijsink 1985) in Fig.4.12, leert dat het TNO-model juist ~1,5 maal langere reistijden voorspelt in de grove, bepompte aquifer zone 2 dan het KWR model en analytische model.

TABEL 4.2. De responscurve volgens het 3D model van Foppen en Kremers (#1) en volgens 10 scenario's (#2-#11) waarvoor de responscurve berekend is volgens Eq.4.7. Tevens aangegeven is de gemeten en met de bijbehorende responscurve berekende tritiumactiviteit in 1983 en 2004. %Y30 en %Y51 = % water jonger dan 30 en 51 jaar in resp. 1983 en 2004, en dus vrijwel tritiumloos. #9 = beste benadering.

#	Ground	GWT	Screen depth		R	Aquifer		eff.	Soil	3H [T.U.]				t-UNS
	Surface		Upper	Lower		Top	Base	por	Moisture	Meas	calc '83	Meas	calc '04	
		m ASL			m/a	m ASL		n	V	1983	HRC	2004	HRC	year
1	22.0	14.6	-24.3	-36.7	0.300			0.30	0.15	11.9	47.6	5.5	12.9	4.0
2	22.0	14.6	-24.3	-36.7	0.365	-14.6	-38	0.30	0.10	11.9	37.7	5.5	12.6	2.3
3	22.0	14.6	-24.3	-36.7	0.500	14.6	-110	0.37	0.15	11.9	20.1	5.5	6.9	2.4
4	22.0	14.6	-24.3	-36.7	0.400	14.6	-110	0.30	0.15	11.9	19.8	5.5	7.0	3.0
5	22.0	14.6	-24.3	-36.7	0.365	14.6	-110	0.30	0.10	11.9	19.4	5.5	6.3	2.3
6	22.0	14.6	-24.3	-36.7	0.300	14.6	-110	0.30	0.15	11.9	15.2	5.5	5.5	4.0
7	22.0	14.6	-24.3	-36.7	0.300	14.6	-110	0.30	0.10	11.9	15.3	5.5	5.5	2.8
8	22.0	14.6	-24.3	-36.7	0.250	14.6	-110	0.25	0.15	11.9	14.9	5.5	5.3	4.6
9	22.0	14.6	-24.3	-36.7	0.300	14.6	-110	0.34	0.15	11.9	12.8	5.5	8.9	4.0
10	22.0	14.6	-24.3	-36.7	0.365	14.6	-110	0.30	0.15	11.9	18.6	5.5	6.5	3.2
11	22.0	14.6	-24.3	-36.7	0.365	14.6	-110	0.35	0.10	11.9	16.1	5.5	5.6	2.4
#	PHREATIC HRC													
	t-UNS	HRC	HRC	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P
	year	30	51	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90	99.5
1	4.0	38.5	64.1	13.1	15.8	18.2	22.9	31.3	38.7	47.2	56.4	71.0	96.3	154.0
2	2.3	42.2	64.4	11.3	15.9	20.9	26.7	33.4	41.3	50.9	63.4	80.9	110.8	240.4
3	2.4	22.2	38.1	11.4	21.2	32.0	44.3	58.5	75.4	95.9	122.5	159.8	223.7	500.0
4	3.0	20.6	36.6	12.0	21.8	32.8	45.3	59.7	76.7	97.6	124.5	162.4	227.1	507.1
5	2.3	20.7	35.4	11.3	22.1	34.2	47.8	63.6	82.3	105.1	134.6	176.1	247.1	553.9
6	4.0	14.0	27.3	13.0	26.1	40.8	57.4	76.6	99.3	127.1	163.0	213.5	299.9	673.1
7	2.8	16.4	29.4	11.8	24.9	39.6	56.2	75.4	98.2	126.0	161.8	212.3	298.7	672.0
8	4.6	12.5	26.0	13.6	26.8	41.4	58.1	77.3	100.0	127.8	163.7	214.2	300.5	673.8
9	4.0	12.4	24.5	13.0	27.9	44.5	63.4	85.2	110.9	142.4	183.0	240.3	338.2	761.2
10	3.2	18.3	33.5	12.2	23.0	35.1	48.8	64.6	83.2	106.1	135.5	177.1	248.1	554.9
11	2.4	17.9	31.2	11.4	24.0	38.0	54.0	72.4	94.2	120.8	155.2	203.7	286.5	644.4

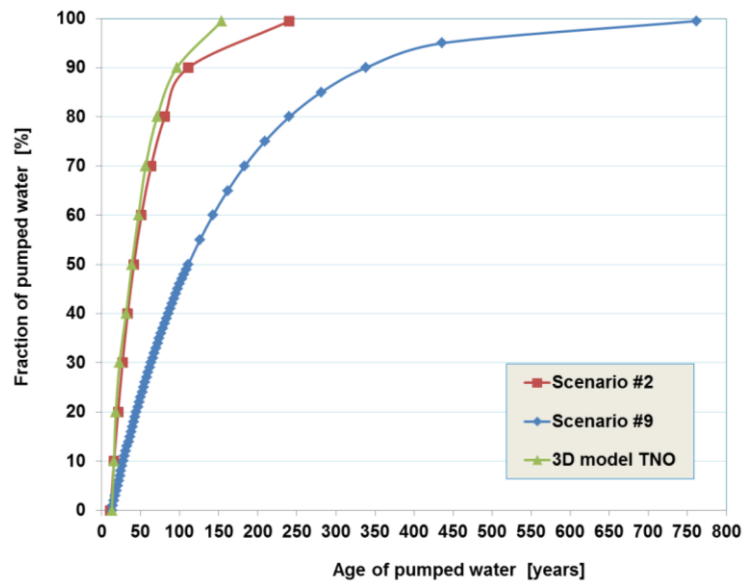


Fig.4.11. De hydrologische respons curve volgens het 3D TNO-model van Foppen & Kremers (1997), scenario #2 uit Tabel 4.2 (met verwaarlozing van aquiferzone 3) en scenario #9 uit Tabel 4.2. De in 1983 gemeten tritiumactiviteit wordt met scenario #9 het beste benaderd, en verdient derhalve de voorkeur.

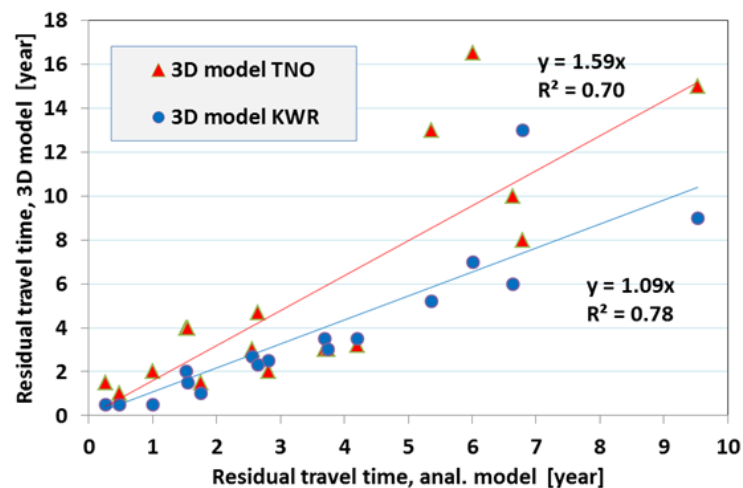


FIG. 4.12. Vergelijking van de residuele reistijd volgens het analytische model en de 3D modellen van TNO (Foppen & Kremers 1997) en KWR (Eijsink 1985). De meetpunten betreffen vrijwel alle waarnemingsputten in aquiferzone 2, waarvoor de waarden analytisch berekend zijn dan wel afgelezen uit de isochronenplots afkomstig van de 3D modellen.

4.5 Reistijdschatting voor elk waarnemingsfilter tot de pomputten

De *residuele reistijd* van grondwater ter plaatse van elk waarnemingsfilter tot het epicentrum van puttenveld Noordbargeres (t_{RES}) is als volgt analytisch berekend (zie ook Fig.3.4 voor parameters):

$$t_{RES} = t_{ZONE-2} + t_{ZONE-1} - t_S \quad (4.11)$$

$$t_{ZONE-2} = f \frac{\pi n_2 D_2 X_1^2}{Q F_\alpha} \quad f = 0.5 (1 + \nu(X_2 / X_1)) \quad (4.12)$$

$$t_{ZONE-1} = \begin{cases} \frac{92.36}{8.88 - \ln(X_1)} - 19 & \text{als } X_1 \geq 271 \text{ en als } d \leq D_1 \\ 9.1 & \text{als } X_1 < 271 \text{ en als } d \leq D_1 \\ 0 & \text{als } d > D_1 \end{cases} \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned}
 t_s &= d/D_1 t_{\text{ZONE-1}} && \text{als } d \leq D_1 \\
 t_s &= 0 && \text{als } D_1 < d \leq D_1 + D_2 \\
 t_s &= -(d - D_1 - D_2)/D_3 K_{V1}/K_{V3} t_{\text{ZONE-1}} && \text{als } d > D_1 + D_2
 \end{aligned}
 \tag{4.14}$$

Waarin: n_x = effectieve porositeit aquifer zone X [-]; D_x = dikte waterverzadigde in aquiferzone X [m]; X_1 = horizontale afstand van waarnemingspunt tot epicentrum puttenveld [m]; X_2 = horizontale afstand van waarnemingspunt tot meest nabije pompput van puttenveld [m]; Q = gemiddeld jaartotaal onttrekking puttenveld [m^3/j]; d = diepte meetpunt beneden grondwaterspiegel [m]; K_{V1} , K_{V3} = verticale doorlatendheid van aquifer zone 1 en 3 [m/d].

De totale reistijd in aquiferzone 1 ($t_{\text{ZONE-1}}$) is een best fit (Fig.4.13) met de reistijd volgens het 3D model van Foppen & Kremers (1997). Het is nog een uitdaging om deze reistijd op onafhankelijke wijze te benaderen via een analytische oplossing. Beugelink (1987) presenteerde een analytische benadering die evenwel teveel mathematische capriolen vergt om praktisch te zijn.

De totale reistijd in zone 1 kan niet berekend worden met de veel-gebruikte Eq.4.15 minus t_{UNS} , omdat de verticale potentiaalval dichter bij de pompputten toeneemt.

De resulterende residuele reistijden voor elk meetpunt zijn opgenomen in Excel worksheet 'ALL' van 'Model Noordbargeres.XLSX'. Zij zijn tevens geplott in bovenaanzicht voor aquiferlaag F (Fig.4.14) en in circumsectie (Fig.4.15; voor ligging profiel zie Fig.4.14).

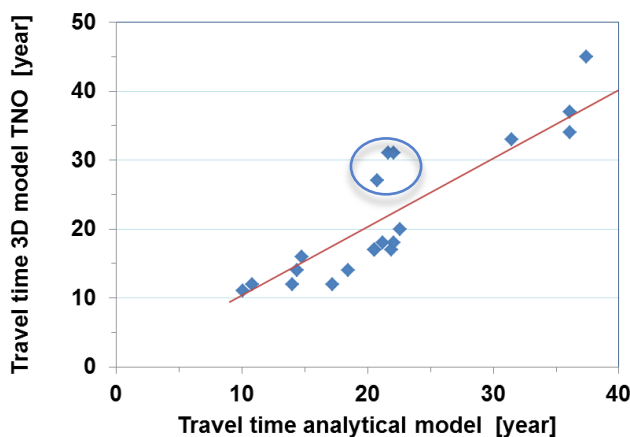


FIG. 4.13. *Vergelijking van de totale reistijd in aquiferzone 1 volgens het gefitte analytische model en het 3D model van TNO (Foppen & Kremers 1997). De meetpunten betreffen vrijwel alle waarnemingsputten, waarvoor de waarden analytisch berekend zijn (op diepte 15 m-NAP) dan wel afgelezen uit de isochronenplot afkomstig van het 3D model.*

De 3 omcirkelde punten liggen in de zuidoosthoek van het studiegebied, mogelijk net buiten het intrekgebied. De rode lijn geeft de 1:1 relatie weer.

4.6 Reistijdschatting van maaiveld tot elk waarnemingsfilter

4.6.1 Voordat de winning begon

De gemiddelde *totale reistijd* van maaiveld tot elk waarnemingsfilter (t_{TOT} ; jaar) op diepte d (m-GWT; GWT = grondwaterspiegel) in een freatische aquifer, voordat de winning (via een puttenveld) begon, kan berekend worden volgens Vogel (1967) met (zie ook Raats (1978), van Ommen (1985), Broers (2002) en Appelo and Postma, 2005)):

$$t_{\text{TOT-0}} = t_{\text{UNS}} + \frac{nD}{R} \ln\left(\frac{D}{D-d}\right)
 \tag{4.15}$$

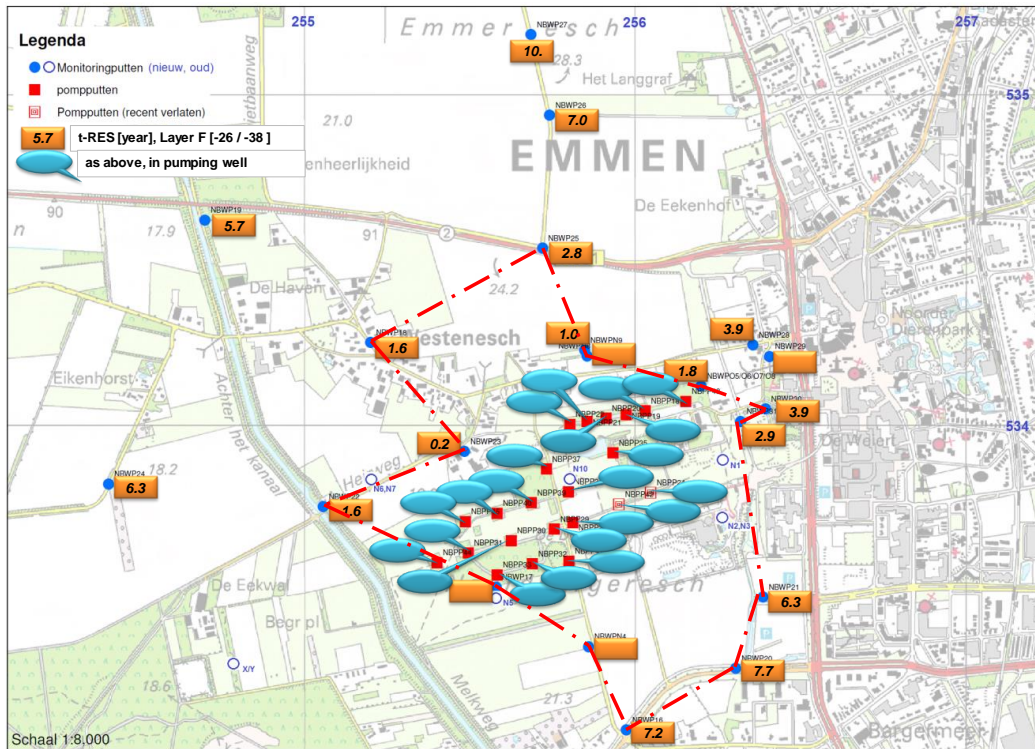


FIG. 4.14. Residuele reistijden (in jaar) van waarnemingsfilters in aquiferlaag F t/m de pompputten. De rode lijn duidt de ligging aan van de circumsectie in Fig.4.15.

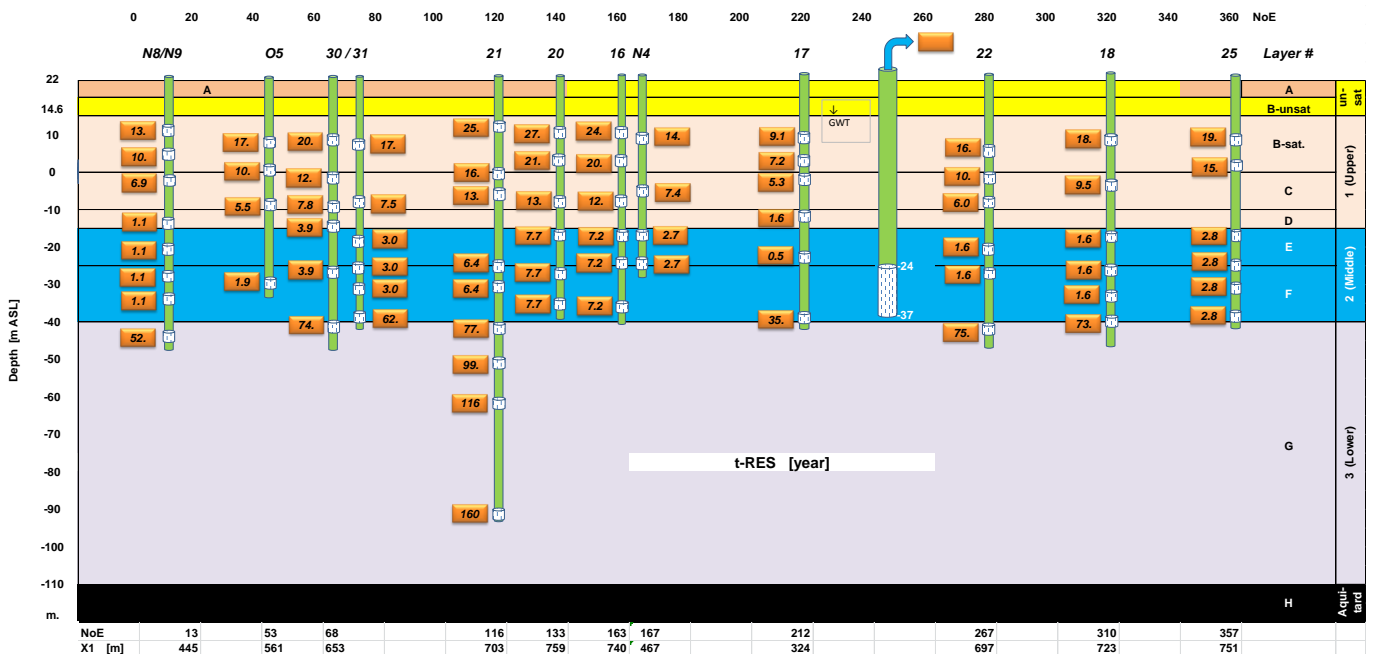


FIG. 4.15. Circumsectie met de berekende residuele reistijden (t-RES) van de waarnemingsfilters t/m pompputten. Voor ligging van profiel zie Fig.4.14. N^oE, X₁ = resp. kompasrichting en afstand tot epicentrum winning. A* = keileem.

Deze veelgebruikte vergelijking geldt in principe voor parallelle stroming in een homogeen, isotroop aquifersysteem van beperkte omvang met uniforme voeding en volkomen drainage parallel aan de stroomopwaarts gelegen lineaire grondwaterscheiding. Niettemin benadert Eq.4.15 de ouderdomsverdeling voldoende goed in freatische aquifers met onvolkomen winning nabij de grens (waterscheiding) van het wingebed. Dichter bij het puttenveld wordt de verticale ouderdomsverdeling te ernstig verstoord door de verdiepende afpompijgskegel waardoor de met Eq.4.15 voorspelde ouderdom boven het onttrekkingsfilter te hoog en eronder te laag uitpakt. De resulterende totale reistijden voor elk meetpunt zijn opgenomen in Excel worksheet 'ALL' van 'Model Noordbargeres.XLSX'. Zij zijn tevens geplot in circumsectie (Fig.4.16).

4.6.2 Tijdens stationaire winning

De totale reistijd van maaiveld tot elk waarnemingsfilter (t_{TOT-d} ; jaar) op diepte d (m-GWT; GWT = grondwaterspiegel) in een freatische aquifer, tijdens stationaire winning (via een puttenveld), is benaderd volgens:

$$t_{TOT-d} = t_{UNS} + \frac{R t_{ZONE-1} (t_{TOT-0} - t_{UNS})}{nD \ln\left(\frac{D}{D-D_1}\right)} \quad (4.16)$$

waarin: D = dikte hele aquifersysteem = $D_1 + D_2 + D_3$ [m]; D_x = dikte aquiferzone x [m]; d = diepte waarnemingsfilter [m-GWT].

In Eq.4.16 is de versnelde reistijd (t.o.v die zonder winning) evenredig gemaakt aan de verhouding van de reistijd in zone 1 tijdens winning (t_{ZONE-1} volgens Eq.4.13) tot die zonder winning ($nD/R \ln\{D/(D-D_1)\}$) volgens Eq.4.15).

De resulterende totale reistijden voor elk meetpunt zijn opgenomen in Excel worksheet 'ALL' van 'Model Noordbargeres.XLSX'. Zij zijn tevens geplot in circumsectie (Fig.4.17).

Controle via de HRC

Als we voor elke waarnemingsput de *stroombaanreistijd* van maaiveld via waarnemingsfilter tot pompput nemen, dus $t_{TOT-d} + t_{RES}$, dan krijgen we in totaal 113 stroombanen die een indruk geven van de HRC. Deze indruk valt eenvoudig te berekenen in Excel met de percentiel functie. Nu is het echter zo, dat deze 113 meetpunten ruimtelijk onevenredig verdeeld zijn, en wel relatief dicht bij het epicentrum van de winning. Een goede maat voor de oppervlakte-representativiteit is de mediane Ω waarde van een verzameling meetpunten binnen een (vervormde) cirkel. De parameter Ω is als volgt gedefinieerd:

$$\Omega = (X_1 / \{r_E / F_\alpha\})^2 \quad (4.17)$$

waarin: X_1 = horizontale afstand van waarnemingspunt tot epicentrum puttenveld [m]; r_E = straal van een equivalent cirkelvormig intrekgebied volgens Eq.4.1 [m]; F_α = vormfactor F in Fig.4.6, variërend van 0.4 -1.8 in afhankelijkheid van de kompasrichting α_x [N°E] van meetpunt x t.o.v. epicentrum puttenveld [-].

Als de mediaan van Ω voor alle 113 meetpunten ongeveer 0.50 bedraagt, dan bieden zij een redelijke benadering van de HRC. Dit is echter niet het geval, want de mediane stroombaanreistijd kent een $\Omega = 0.29$ (Tabel 4.3). NB: Het zou natuurlijk nog beter zijn als de hele verdeling van afstanden zou matchen, maar dat maakt de zaak erg ingewikkeld.

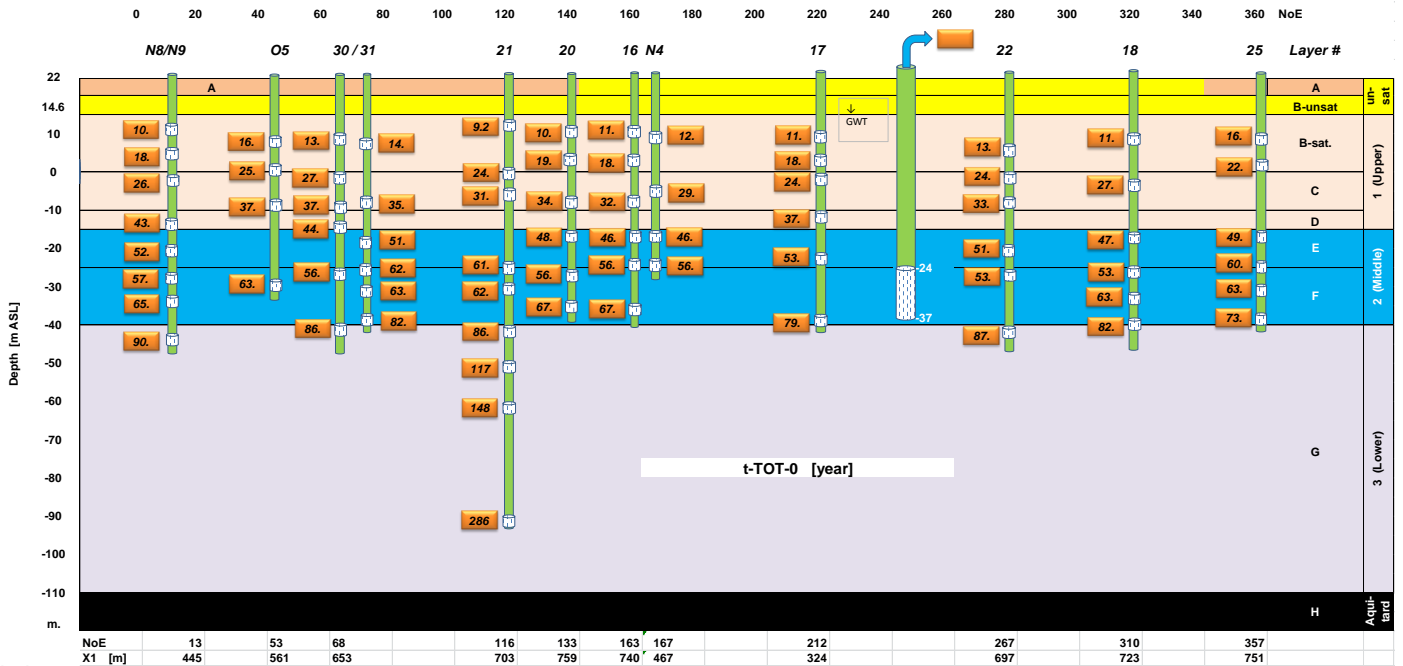


FIG. 4.16. Circumsectie met de berekende totale reistijden voordat de winning begon (t_{TOT-0}) van maaiveld tot de waarnemingsfilters. Voor ligging van profiel zie Fig.4.14. $N^{\circ}E$, X_1 = resp. kompasrichting en afstand tot epicentrum winning. A* = keileem.

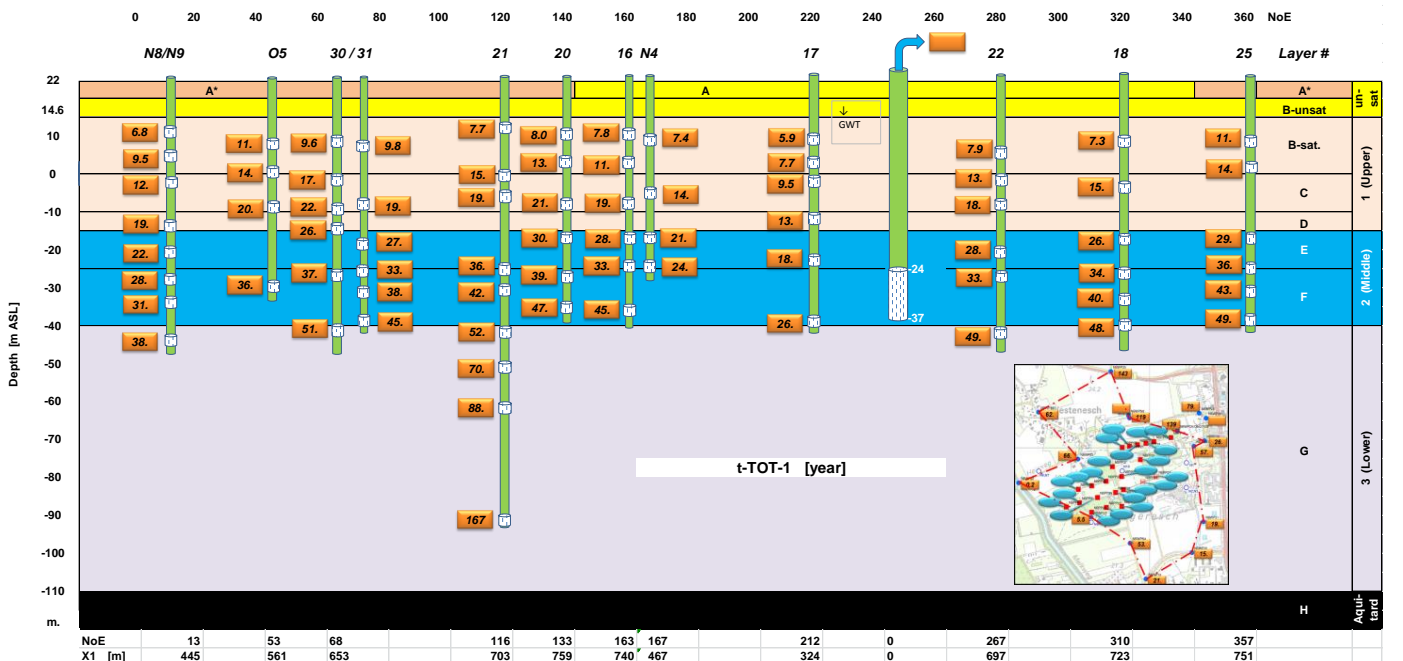


FIG. 4.17. Circumsectie met de berekende totale reistijden na bereiken van stationaire stroming tijdens winning (t_{TOT-1}) van maaiveld tot de waarnemingsfilters. Voor ligging van profiel zie Fig.4.14. $N^{\circ}E$, X_1 = resp. kompasrichting en afstand tot epicentrum winning. A* = keileem.

TABEL 4.3. *Vergelijking van de HRC op basis van de berekende stroombaanreistijd (t_{WHOLE}) langs de 113 stroombanen door alle waarnemingsfilters t/m de pompputten, met de HRC zoals berekend met Eq.4.7 met de parameters uit scenario #9 in Tabel 4.2. Voor de 113 stroombanen geldt een betere (maar niet perfecte !) overeenkomst als we niet de percentielschaal nemen maar de Ω waarde als percentielschaal.*

113 flowlines				Eq.4.7 scen. #9	
Percentile	t_{WHOLE}	Ω	HRC	Percentile	HRC
	year	[-]	year		year
0.001	13.2	0.00	13	0.001	13
0.01	13.4	0.01	15	0.01	15
0.05	15.1	0.03	17	0.05	20
0.1	20.0	0.04	19	0.1	28
0.2	25.4	0.05	20.4	0.2	45
0.3	30.0	0.12	31.2	0.3	64
0.4	32.4	0.17	39.4	0.4	85
0.5	35.0	0.29	61.5	0.5	111
0.6	42.3	0.31	65.5	0.6	143
0.7	45.4	0.36	76.1	0.7	183
0.8	54.7	0.40	85	0.8	240
0.9	104.7	0.77	221	0.9	338
0.95	146.1	0.80	240	0.95	436
0.99	226.1	0.82	255	0.99	663
0.995	271.1	0.82		0.995	761

In dat geval moeten de percentielwaarden behorende bij de berekende 113 stroombaanreistijden gekoppeld worden aan de bijbehorende Ω , welke vergeleken kan worden met de HRC zoals berekend met Eq.4.7 met de parameters uit scenario #9 in Tabel 4.2.

Het resultaat van deze exercitie staat in Tabel 4.3, waaruit een verbeterde overeenkomst volgt tussen t_{WHOLE} (de stroombaanreistijd) en de HRC, indien we niet de percentielschaal van de stroombaanreistijd nemen maar de Ω waarde als percentielschaal. Zo past de $t_{\text{WHOLE}} = 54.7$ met percentiel 0.8 en $\Omega = 0.4$ beter bij de HRC van percentiel 0.40 (85 jaar) dan bij de HRC van percentiel 0.8 (240 jaar).

De waarden van t_{WHOLE} liggen echter gemiddeld wel lager dan die volgens de HRC. De verklaring daarvoor is dat de verticale spreiding van de waarnemingsfilters waarschijnlijk tekort doet aan aquiferzone 3 waarin de reistijden aanzienlijk langer zijn.

Voor belangrijke conclusies en aanbevelingen m.b.t. de monitoring → § 7.2.

4.7 HRC+

In Excel zijn door de auteur bouwstenen geprogrammeerd voor een model dat enerzijds het intrekgebied en de Hydrologische Respons Curve voor een grondwaterwinning berekent incl. ijking op tritium gegevens, en anderzijds de ondergrondse reistijden (totaal en residueel) bepaalt tot waarnemingsputten. Deze tool is HRC+ gedoopt, maar vergt nog enig werk.

5 Hydrochemische systeemanalyse

Het hydrochemische systeem van een puttenveld wordt, na het bereiken van hydrologisch evenwicht (geen verdere expansie van de afpompingskegel), grotendeels gedictieerd door de kwaliteit van regenwater en eventueel infiltrerend oppervlaktewater, het landgebruik (met alles wat daarbij hoort) binnen het intrekgebied, de bijdrage van infiltrerende en/of exfiltrerende waterlopen aan de waterbalans, de initiële/natuurlijke geochemische en hydrochemische stratificatie van het aquifersysteem, de dikte van de onverzadigde zone en de winning zelf (o.a. grootte, diepte, ruimtelijke verdeling, startdatum). Deze determinanten vertonen meestal sterke fluctuaties of trendmatige ontwikkelingen in de tijd.

Vogelaar (1990) en Van der Moot & Zeewuster (2000) hebben het hydrochemische systeem min of meer in beeld gebracht voor resp. het jaar 1989 en 1999. In dit hoofdstuk wordt vooral de situatie anno 2011 belicht, op basis van de meest recente exploratieronde. Daarnaast worden ook enkele trendmatige ontwikkelingen getoond.

De hydrochemische systeemanalyse dient de verbreiding van genetisch verwante watersoorten en chemische zones binnen die watersoorten in kaart te brengen, zowel in ruimte als tijd. Daartoe wordt min of meer de procedure volgens Stuyfzand (1993, 2005) gevolgd. Een korte toelichting hierop staat in Bijlage I.

5.1 Materiaal en methoden

5.1.1 Data aangeleverd door WLN

Door WLN zijn 3 hydrochemische databestanden aangeleverd in Excel, op basis waarvan de hydrochemische systeemanalyse is uitgevoerd. Het betreft:

- **NO waarnemingsfilters.XLSX**, met data van 1958 t/m oktober 2014 voor in totaal 2200 watermonsters. Onderzocht zijn maximaal (!!) 26 macroparameters, 10 spore-elementen (SEn) en 180 organische microverontreinigingen (OMIVE);
- **NO pompputten.XLSX**, met data van 1958 t/m augustus 2014 voor in totaal 4134 watermonsters. Onderzocht zijn maximaal (!!) 30 macroparameters, 13 SEn, ~650 OMIVE en 6 microbiologische parameters;
- **NO ruwwater.XLSX**, met data van 1977 t/m november 2014 voor in totaal 864 watermonsters. Onderzocht zijn maximaal (!!) 30 macroparameters, 13 SEn, ~650 OMIVE, 6 microbiologische parameters en 4 radiologische parameters.

In deze databestanden zitten ook de anorganisch chemische gegevens van een beperkt aantal waarnemingsputten, die beschouwd zijn door Vromans (2011) en verzameld door WLN in 2010. Deze bestanden omvatten echter niet de ~50 bijzondere SEn die via een ICP-OES/MS scan zijn geanalyseerd en ook niet de isotopen ^2H (in H_2O), ^{18}O (in H_2O), ^{15}N (in NO_3) en ^{34}S (in SO_4). Deze analyses zijn toegevoegd aan voorliggend onderzoek, en zo ook vergelijkbare data van het ruwwater in 2008 zoals verzameld door Mendizabal (2011).

5.1.2 Dataverwerking hydrochemie

In dit hoofdstuk gaat de aandacht vooral uit naar de situatie anno 2011, de macroparameters, sporelementen, isotopen en die OMIVE die voldoende vaak aantoonbaar waren in 2011 (zie § 5.1.3).

Deze chemische analyseresultaten zijn opgeslagen en verwerkt met HydroGeoChemical (HGC 2.1), een programma in Excel spreadsheet, voor opslag, management, controle, correctie en interpretatie van waterkwaliteitsgegevens (Stuyfzand, 2012). Manual en programma zijn downloadbaar via:

<http://hydrology-amsterdam.nl/valorisation/Valorisation.html>

Tabel 5.1 biedt een overzicht van de diverse berekeningen uitgevoerd in HGC. Speciaal voor dit onderzoek zijn die OMIVE toegevoegd die voldoende vaak aantoonbaar waren

TABLE 5.1. Overzicht van de diverse berekeningen in HGC 2.1. Uit: Stuyfzand (2012).

Ch.	Category	Parameters involved
3	Data control	conversion to standard unit, values <MDL, IB, EC, missing values, bird dropping correction (BDC), filtration bias correction (FBC)
4	Base exchange and nonmarine concentrations	BEX, Na, K, Ca, Mg, Cl, SO ₄ , B, Br, F, I, Li, Mo, Rb, Sr, 18O
5	Chemical watertype	Chlorinity, alkalinity, dominant cation & anion, BEX
6	Mineral equilibria	Saturation index for calcite, dolomite, siderite, rhodochrosite, gypsum, barite, fluorite; TIC, CO ₂
7	Ratios	Cl/Br, Cl/Na, Ca/Mg, Ca/Sr, HCO ₃ /Ca, HCO ₃ /ΣA, Fe/Mn, COD/TOC, MONC, SUVA, 2H/18O
8	Hydrochemical facies	pH-class, redox index, BEX, pollution index WAPI
9	TDS contributing processes	TDS, % Marine, % Atm pollution, % Bulk Organic Matter, % Mineral dissolution (silicates and carbonates)
10	Various calculated parameters	O ₂ -sat, oxid capacity, trace element groups, Wirdum, SAR, ESR, EPI, water density, viscosity, O-18 corrected for salinity effects
11	Normalization of analytical data	Spider plot, WAPI radar plot, norm exceedance
12	Complexation of 2+ trace metals in fresh water	free conc., inorg and org complexed: Ba, Cd, Co, Cu, Ni, Pb, Zn
13	Simple statistics	Descriptive (min, mean, max, n), Pearson Correlation Matrix
14	Report	Select samples and parameters for Table

BEX = Base Exchange index; EC = Electrical conductivity; IB = Ionic Balance; MDL = Minimum Detection Limit; MOC = Modified Oxidation/reduction Capacity; NA = Not Available; SAR = Sodium Adsorption Ratio; SI = Saturation Index; TDS = Total Dissolved Solids; TIC = Total Inorganic Carbon; TIN = Total Inorganic Nitrogen ions; TotH = Total Hardness; WAPI = WAter Pollution Index;

5.1.3 Selectie van OMIVE in HGC

Van de ca. 650 geanalyseerde OMIVE (zie Bijlage 3 en § 2.3) zijn er 24 geselecteerd voor opname in HGC ter nadere inspectie. De criteria voor selectie van een OMIVE waren als volgt: In de bestanden [NO waarnemingsfilters.XLSX](#), [NO pompputten.XLSX](#) en [NO ruwwater.XLSX](#) waren voor het jaar 2011 >95 analyses van de in totaal 137 monsters aanwezig, was het percentage analyses boven de aantoonbaarheidsgrens >1.5%, en was de gemiddelde concentratie van de analyses boven de aantoonbaarheidsgrens >0.02 µg/L.

De geselecteerde 24 OMIVE zijn gelist in Tabel 5.2 samen met hun fysisch-chemische eigenschappen (voor zover bekend). Missende waarden kunnen geschat worden met ChemAxon software (MarvinSketch 14.9.22.0., <http://chemaxon.com>).

De zeer recentelijk aangetoonde metaboliëten van chloridazon, te weten chloridazon-desfenyl en chloridazon-methyl-desfenyl (Van der Moot, 2014), zijn ondanks hoge concentraties in ondiepe waarnemingsputten (chloridazon-desfenyl tot 16 µg/L, chloridazon-methyl-desfenyl een factor 10-20 lager) niet verdere in beschouwing genomen. Dit vanwege late kennisname tijdens bespreking van het concept-rapport. Een vergelijkbare situatie geldt voor de kunstmatige zoetstof acesulfaam-K, die vooral geassocieerd lijkt met geïnfilterd Oranjekanaalwater (Van de Maas, mond. meded.).

TABEL 5.2. De 24 geselecteerde OMIVE met hun fysisch-chemische eigenschappen (voor zover bekend).

Abbrev.	Compound	Origin / use	molecular weight [g/mol]	Solubility mg/L	drinking water standard	log K _{OW} with K _{OW} kg C/L	log K _{OC} with K _{OC} kg C/L	pK _a	t _{1/2} [d]		
									(sub)oxic	anoxic	deeply anoxic
11dcea	1,1-Dichloorethaan		98.96	400 [*25]	1	1.79	1.52				
11dcee	1,1-Dichlooretheen		96.9	8690-8850 [*25]	1	2.13	2.18 / 1.81 [*25]		28-183 [*29]	81-173 [*29]	-
12dcea	1,2-dichloorethaan		99	8690-8850 [*25]		1.45	1.51 [*23]	-	100-183 [*29]	400-730 [*29]	9999
c12dcee	1,2-dichlooretheen (cis-)	pesticide	98.96	4.300 [*18]	0.1	2.55	-		28-183 [*29]	112-730 [*29]	720
12dcpa	1,2-dichloorpropaan		113	2.700 [*23]	1	1.99	1.66 [*23]		167-1280 [*29]	668-5150 [*29]	-
14diox	1,4-dioxaan		88.1		1	-0.27/-0.42					
123tcpa	1,2,3-trichloorpropaan		147.43	1750	1	1.98-2.27	1.7 / 1.99				
124tmben	1,2,4-trimethylbenzeen					3.65	3.34				
2c1prope	2-chloor-1-propreen										
34nfenol	3+4-nitrofenol		139.1		-			7.16			
bam	2,6-dichloorbenzamide	metabolite			0.1						
bentazon	bentazon		240.3	500-570 [*25/18]	0.1			2.9-3.2	14-60 [*11]; <30 [*25]		
biph.eth	biphenylether				15	4.2					
bromacil	bromacil		261.1	815 [*18]	0.1				>180 [*28]		
carbenda	carbendazim		191.2	7-8 [*18]	0.1				25-100 [*11]	90-180 [*11]	
clidazon	chloridazon				0.1						
diuron	diuron		233.1	42 [*18]	0.1	2.81	2.60 [*11]	2.16	240	20-30	<25
ethofmst	ethofumesaat	herbicide			0.1						
glyfosaa	glyfosaat		169.1	12.000 [*18]	0.1				7-80 [*10]; <60 [*28]		
mcpp	mecoprop		214.6	620 [*18]	0.1		2.11 [*23]	3.21-3.78	7-28 [*11]; 7-10 [*29]	28-183 [*29]	
per	tetrachlooretheen (per)		165.8	150-160 [*25]			2.32-2.60 [*23]		183-365 [*29]	98-1644 [*29]	
thf	tetrahydrofuraan		72.1	300		0.46					
tri	trichlooretheen (tri)		131.4	1000-1070 [*25]		2.35	2.2 [*25]		183-365 [*29]	98-1645 [*29]	<0.2-31
vinylchl	chlooretheen (vinylchloride)		62.5	1100 [*23]		1.38	4-1.7 [*16]; 1.75		28-183 [*29]	30 [*16]; 112-730 [*29]	

5.2 Pearson correlatiematrix

Een correlatiematrix biedt een eerste verkenning van een dataverzameling bestaande uit vele monsters en vele (micro)parameters (zoals hier), door relaties tussen parameters en clusters van met elkaar correlerende parameters te identificeren. Er zijn betere clustertechnieken, maar die zijn tijdrovender. De Pearson correlatiematrix is gebaseerd op lineaire regressie van dataparen, met 'pairwise deletion'. Laatstgenoemde betekent dat als in een spreadsheet b.v. L34 mist en M34 niet, de correlatiecoëfficiënt tussen L en M berekend wordt zonder monster 34. HGC genereert de matrix automatisch, samen met een zogenaamde '*correlatie score plot*'.

Van alle geanalyseerde grondwatermonsters in exploratieronde 2011 (n = 113) èn voor die in de meetronde 2010 van Vromans (2011) is een Pearson, lineaire correlatiematrix berekend met HGC in Excel. De resultaten staan in resp. Tabel 5.3 en 5.4, terwijl Fig.5.1 en 5.2 tonen met hoeveel parameters elke parameter correleert binnen een bepaalde klasse van correlatiecoëfficiënt R (boven 0,5 of onder -0,5). In Fig.5.1 en 5.2 zijn de parameters naar links opklimmend gesorteerd op hun correlatiescore CS:

$$CS = n_{0,9}^2 + n_{0,7} + \sqrt{n_{0,5}} \quad (5.1)$$

Waarin: $n_{0,9}$ = aantal met $R > 0.9$ en $R < -0.9$; $n_{0,7}$ = aantal met $R = 0.7$ tot 0.9 en $R = -0.9$ tot -0.7 ; $n_{0,5}$ = aantal met $R = 0.5$ tot 0.7 en $R = -0.7$ tot -0.5 .

De correlatiematrices in Tabel 5.3 en Tabel 5.4 tonen de volgende clustering van parameters (-X houdt een negatieve correlatie in, X een positieve):

- **positie meetpunt t.o.v. NAP:** -diepte, O_2 , NO_3 , -pH, -Fe, - SI_R en - SI_S , Al en REE (zeldzame aarden). Met andere woorden, met toenemende diepte nemen op significante wijze O_2 , NO_3 , Al en REE af, en de pH, Fe, saturatie-index rhodochrosiet (= $MnCO_3$) en saturatie-index sideriet (= $FeCO_3$) toe. Dit is het logische gevolg van met de diepte toenemende anaërobie, zuurbuffering en oplossing van Fe en Mn. Voor meer informatie over de verticale zonering van de waterkwaliteit zie § 3.3.
- **diep anoxisch milieu:** CH_4 , NH_4 , PO_4 , DOC, V, Zr, 2H , ^{18}O , ^{34}S , - SO_4 , thf (tetrahydrofuraan), ethomst (ethofumesaat), bipheth (biphenylether), carbendazim en clidazon (chloridazon). In diep anoxisch milieu wordt SO_4 gereduceerd hetgeen de SO_4 afname en toename van ^{34}S verklaart, komen CH_4 , NH_4 , PO_4 en DOC vrij uit oxiderende organische stof, zijn V en Zr

blijkbaar beter oplosbaar of meer beschikbaar, en zijn genoemde OMIVE mogelijk moeilijk afbreekbaar. Het diep anoxische milieu komt vooral ondiep voor in de noordwesthoek en westzijde van het studiegebied waar dun veen dicht aan maaiveld ligt (Fig.3.5) en waar het infiltrerende Oranjekanaal voor voeding zorgt. Openwater-verdamping kan daar de verhoogde ^2H en ^{18}O concentraties verklaren.

- **totale zoutgehalte:** EC, Cl en Na. Deze parameters zijn onderling verbonden via opgelost keukenzout (NaCl) dat de aquifer bereikt via (i) pekel als strooizout op wegen, (ii) lekkende riolering of (iii) 'irrigation-return flow' (berekening met oppervlakte- of grondwater waarna verdamping). In de kleinere dataset van Vromans (Tabel 5.4) correleren aanzienlijk meer parameters met het totale zoutgehalte, deels vanwege een groter aantal geanalyseerde spore-elementen met genetische relatie met zout (zoals Li en Br) en deels mogelijk berustend op toeval voortvloeiend uit een kleinere, contrastrijkere populatie meetpunten.
- **kalk-koolzuur-zwavelzuur parameters:** EC, SO_4 , Ca, (Mg), HCO_3 , TIC, Sr (spore-element in kalk), pH en SI_c (calciet verzadigingsindex). Deze parameters zijn logischerwijs aan elkaar gerelateerd via het kalk-koolzuur evenwicht, waarbij verhoogde SO_4 concentraties wijzen op pyrietoxidatie met zuurbuffering door kalk. Hoge concentraties leiden vervolgens tot een hoge EC. Uit de dataset Vromans volgt dat tevens Ba en U meedraaien in het cluster, hetgeen moeilijk te verklaren valt en derhalve op toeval kan berusten.
- **in zuur milieu oplossende spore-elementen/zware metalen:** Cd, Zn, -pH. Cadmium en zink vormen bovendien geochemische tweelingen, wat hun samenhang mede verklaart. Uit de dataset van Vromans (2011) met 27 monsters (Tabel 5.4, Fig.5.2), volgt dat de concentraties van Al, Be, Rb en de zeldzame aarden ook zeer significant toenemen met afnemende pH. Dit is normaal (Stuyfzand, 1991). Zie ook § 3.3.

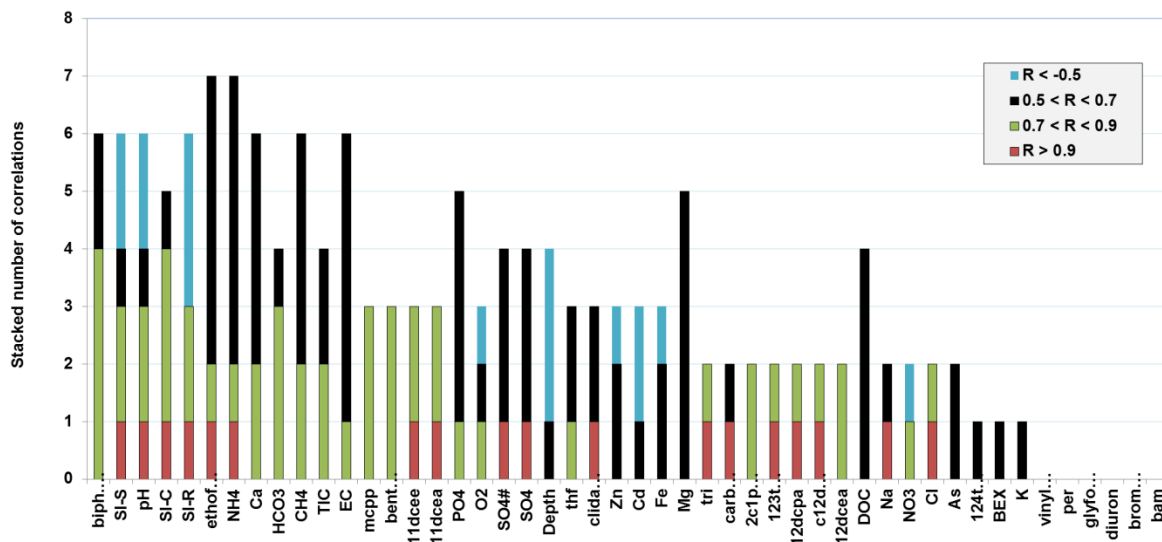


FIG. 5.1. Plot van parameters en het gestapelde aantal correlaties (>0.5 of <-0.5) van elk met alle andere parameters. De parameters zijn gerangschikt van hoogste naar laagste correlatiescore CS (zie tekst). Correlatie score plot voor alle 113 grondwatermonsters uit waarnemingsputten behorende tot het meetnet van Noordbargeres, in exploratieronde 2011. Berekend met HGC.

TABEL 5.3. Pearson correlatiematrix voor alle 113 grondwatermonsters uit waarnemingsputten behorende tot het meetnet van Noordbargeres, in exploratieronde 2011. Berekend met HGC.

Parameter	Depth	O2	CH4	EC	pH	Cl	SO4	HCO3	NO3	PO4	Na	K	Ca	Mg	Fe	Mn	NH4	Al	As	Cd	Cr	Ni	Zn	BEX	SO4#	SI-C	SI-R			
Depth	1.00																													
O2	0.51	1.00																												
CH4	0.20	-0.12	1.00																											
EC	0.30	0.22	-0.15	1.00																										
pH	-0.37	0.12	0.06	0.02	1.00																									
Cl	0.21	-0.10	-0.03	0.71	-0.36	1.00																								
SO4	0.09	-0.11	-0.24	0.57	0.04	0.10	1.00																							
HCO3	0.02	0.21	-0.02	0.49	0.67	-0.09	0.32	1.00																						
NO3	0.46	0.71	-0.11	0.29	-0.09	0.01	0.06	0.03	1.00																					
PO4	-0.29	-0.27	0.64	-0.40	0.10	-0.16	-0.35	-0.21	-0.26	1.00																				
Na	0.26	-0.02	-0.01	0.69	-0.34	0.91	0.09	-0.07	0.09	-0.17	1.00																			
K	0.21	-0.14	-0.05	0.39	-0.37	0.38	0.30	-0.06	0.07	-0.21	0.28	1.00																		
Ca	0.19	0.35	-0.16	0.68	0.49	0.03	0.62	0.85	0.32	-0.38	0.03	-0.01	1.00																	
Mg	0.20	0.06	-0.14	0.63	-0.08	0.35	0.56	0.33	0.15	-0.36	0.15	0.54	0.46	1.00																
Fe	-0.58	-0.39	0.01	-0.37	0.09	-0.13	-0.22	-0.22	-0.38	0.55	-0.20	-0.24	-0.40	-0.31	1.00															
Mn	-0.21	-0.43	-0.10	-0.14	-0.26	0.10	-0.04	-0.32	-0.26	0.13	0.00	0.29	-0.39	0.04	0.43	1.00														
NH4	0.10	-0.19	0.59	-0.24	0.09	-0.07	-0.28	-0.09	-0.18	0.57	-0.06	-0.08	-0.26	-0.20	0.14	0.04	1.00													
Al	0.17	-0.03	-0.03	0.06	-0.37	0.15	-0.04	-0.17	0.12	-0.07	0.13	0.20	-0.10	-0.06	-0.10	0.05	-0.05	1.00												
As	0.08	-0.09	0.13	-0.08	0.08	-0.04	-0.09	-0.01	-0.09	0.18	-0.02	-0.03	-0.08	-0.07	-0.03	0.02	0.62	-0.03	1.00											
Cd	0.20	0.03	-0.06	0.20	-0.52	0.37	0.12	-0.34	0.18	-0.17	0.21	0.24	-0.11	0.47	-0.23	0.17	-0.11	0.08	-0.05	1.00										
Cr	0.20	0.20	-0.06	0.20	-0.08	-0.04	0.15	0.15	0.48	-0.11	0.10	-0.06	0.25	0.10	-0.12	-0.14	-0.08	-0.01	-0.05	-0.01	1.00									
Ni	0.02	-0.03	-0.03	-0.01	-0.06	0.03	-0.01	-0.04	-0.04	-0.03	0.01	0.01	-0.06	0.08	0.05	0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.05	-0.03	1.00								
Zn	0.25	0.01	-0.06	0.08	-0.54	0.15	0.24	-0.33	0.15	-0.16	0.11	0.26	-0.13	0.30	-0.23	0.11	-0.10	0.31	-0.04	0.60	-0.03	0.08	1.00							
BEX	0.24	0.12	-0.07	0.24	0.01	-0.24	0.48	0.32	0.29	-0.30	-0.05	0.44	0.32	0.42	-0.43	-0.09	-0.11	-0.08	-0.02	-0.04	0.35	0.01	0.20	1.00						
SO4#	0.06	-0.10	-0.24	0.46	0.10	-0.06	0.99	0.34	0.06	-0.32	-0.05	0.24	0.62	0.51	-0.20	-0.06	-0.27	-0.07	-0.09	0.06	0.15	-0.01	0.22	0.52	1.00					
SI-C	-0.25	0.21	0.03	0.23	0.95	-0.26	0.20	0.81	-0.01	-0.02	-0.27	-0.28	0.69	0.14	0.02	-0.30	0.02	-0.33	0.05	-0.42	0.01	-0.04	-0.46	0.11	0.25	1.00				
SI-R	-0.62	-0.57	0.09	-0.07	0.76	-0.22	0.07	0.44	-0.53	0.25	-0.28	-0.15	0.18	0.01	0.40	0.23	0.18	-0.31	0.13	-0.37	-0.26	0.01	-0.43	-0.08	0.11	0.70	1.00			
SI-S	-0.63	-0.46	0.12	-0.18	0.79	-0.33	0.01	0.42	-0.49	0.35	-0.36	-0.35	0.15	-0.16	0.52	0.05	0.20	-0.31	0.10	-0.53	-0.17	0.02	-0.48	-0.15	0.06	0.71	0.91			
TIC	0.23	0.19	-0.07	0.65	0.20	0.17	0.41	0.81	0.13	-0.33	0.13	0.19	0.76	0.59	-0.34	-0.22	-0.18	0.16	-0.06	0.04	0.23	0.01	-0.02	0.38	0.39	0.45	0.11			
DOC	0.27	-0.30	0.64	-0.15	-0.10	0.06	-0.25	-0.17	-0.17	0.32	0.06	0.23	-0.32	-0.05	-0.08	0.06	0.65	0.15	0.35	-0.02	-0.10	0.32	0.05	0.03	-0.26	-0.13	0.08			
11dcea	-0.07	-0.03	-0.01	0.01	0.04	-0.01	-0.02	0.08	-0.05	0.01	-0.02	-0.02	0.03	0.03	0.01	-0.04	-0.03	-0.01	-0.02	-0.04	-0.03	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.06	0.07			
11dcee	-0.07	-0.03	-0.01	0.03	0.04	0.00	-0.01	0.08	-0.05	0.00	-0.01	0.00	0.04	0.06	0.01	-0.04	-0.03	-0.01	-0.02	-0.04	-0.03	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.06	0.07			
12dcea	0.00	-0.07	-0.03	0.16	-0.02	0.11	0.16	0.06	0.04	-0.05	0.06	0.15	0.09	0.28	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01	-0.05	0.14	-0.02	-0.01	0.13	0.14	0.04	0.00				
c12dcee	0.01	-0.08	0.04	0.16	-0.01	0.18	0.11	0.06	-0.07	-0.05	0.05	0.27	0.04	0.38	-0.01	0.03	0.00	-0.02	0.00	-0.05	-0.04	-0.02	-0.02	0.05	0.08	0.04	0.07			
12dcpa	-0.03	-0.04	-0.03	-0.08	0.10	-0.05	-0.01	-0.06	-0.08	-0.07	-0.03	-0.06	-0.05	-0.06	-0.07	-0.07	-0.07	-0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.05	-0.01	0.05	-0.02	0.00	0.05	0.06		
14diox	-0.06	-0.11	0.05	-0.01	0.05	0.08	-0.14	0.06	-0.15	-0.08	0.00	-0.08	-0.02	0.05	-0.02	-0.07	-0.05	-0.04	-0.02	-0.02	-0.08	0.13	-0.07	-0.19	-0.15	0.10	0.14			
123tcpa	-0.01	-0.02	-0.03	-0.08	0.09	-0.04	-0.02	-0.06	-0.04	-0.06	-0.02	-0.04	-0.05	-0.09	-0.08	-0.06	-0.01	-0.01	-0.03	-0.02	-0.04	-0.01	0.06	-0.03	-0.02	0.04	0.03			
124tmben	0.04	-0.05	-0.02	-0.10	-0.21	-0.04	0.08	-0.16	-0.06	-0.01	-0.05	-0.04	-0.10	0.09	-0.01	-0.02	-0.06	-0.01	-0.02	0.23	0.06	0.41	0.55	0.03	0.08	-0.19	-0.14			
2c1prope	-0.05	-0.03	-0.02	0.03	0.12	-0.01	-0.03	0.01	-0.06	-0.03	0.00	-0.06	0.00	-0.07	-0.06	-0.09	-0.04	-0.02	-0.04	-0.03	-0.02	-0.03	-0.03	-0.05	-0.03	0.09	0.06			
34nfenol	0.27	-0.10	0.15	-0.03	-0.42	0.26	-0.11	-0.33	-0.13	0.09	0.26	0.16	-0.31	-0.09	-0.16	0.07	0.14	0.16	0.11	0.25	-0.10	0.10	0.40	-0.07	-0.15	-0.43	-0.32			
bam	0.08	0.08	-0.04	0.02	-0.08	0.01	0.02	-0.05	0.17	-0.07	-0.01	0.28	-0.03	0.14	-0.06	0.04	-0.03	-0.02	-0.02	0.16	-0.05	-0.02	0.03	0.20	0.02	-0.08	-0.10			
bentazon	-0.03	-0.14	0.21	-0.05	0.14	-0.06	-0.15	0.18	-0.16	0.06	-0.03	-0.10	0.00	-0.03	0.01	-0.09	0.12	-0.04	0.07	-0.11	-0.07	0.01	-0.09	0.02	-0.14	0.14	0.21			
biph.eth	0.22	-0.09	0.79	-0.11	0.06	-0.02	-0.19	-0.01	-0.08	0.74	-0.01	-0.02	-0.13	-0.11	0.01	-0.08	0.81	-0.02	0.39	-0.06	-0.05	-0.02	-0.04	-0.04	-0.19	0.03	0.08			
bromacil	0.20	-0.09	-0.04	-0.21	-0.17	-0.08	-0.11	-0.19	-0.04	-0.02	0.06	0.03	-0.20	-0.17	0.00	0.26	-0.01	-0.01	-0.03	0.02	-0.05	-0.02	-0.03	-0.03	-0.10	-0.24	-0.10			
carbenda	0.17	-0.07	0.49	-0.09	0.04	-0.02	-0.16	-0.01	-0.06	0.17	0.02	-0.01	-0.10	-0.09	-0.08	-0.08	0.37	-0.02	-0.02	-0.05	-0.04	-0.02	-0.04	0.01	-0.15	0.02	0.04			
clidazon	0.18	-0.08	0.47	-0.12	0.05	-0.03	-0.18	-0.02	-0.07	0.14	0.01	-0.02	-0.13	-0.12	-0.08	-0.10	0.53	-0.02	-0.02	-0.05	-0.04	-0.02	-0.04	0.01	-0.18	0.02	0.04			
diuron	0.15	0.29	-0.03	-0.04	0.08	-0.11	-0.14	0.17	0.02	-0.05	-0.08	-0.06	0.08	-0.03	-0.10	-0.07	-0.03	-0.02	0.00	-0.06	-0.04	-0.02	-0.05	0.05	-0.12	0.10	-0.08			
ethofmst	0.26	-0.12	0.64	-0.16	0.08	-0.04	-0.24	0.03	-0.11	0.49	-0.01	-0.03	-0.17	-0.15	-0.10	-0.07	0.90	-0.03	0.66	-0.07	-0.06	-0.03	-0.06	-0.03	-0.23	0.04	0.11			
glyfosaa	0.10	-0.15	0.18	-0.14	0.08	-0.05	-0.22	-0.02	-0.08	0.18	-0.04	0.10	-0.16	-0.08	-0.08	0.07	0.34	-0.04	0.40	0.03	-0.09	-0.04	-0.05	0.03	-0.21	0.02	0.17			
mcpp	-0.08	-0.12	0.21	-0.11	0.15	-0.04	-0.19	-0.07	-0.15	0.07	-0.04	-0.09	-0.07	-0.07	0.00	-0.06	0.10	-0.04	0.06	-0.10	-0.08	-0.03	-0.08	-0.06	-0.19	0.13	0.21			
per	0.14	0.05	-0.03	0.07	-0.23	0.14	0.05	-0.14	0.02	-0.06	0.19	0.01	-0.09	0.02	-0.08	-0.04	-0.04	0.01	-0.02	0.11	-0.03	0.00	0.01	0.05	0.02	-0.20	-0.19			
thf	0.17	-0.09	0.75	-0.08	0.01	0.05	-0.20	-0.04	-0.10	0.55	-0.02	-0.03	-0.13	-0.07	0.02	-0.06	0.40	-0.03	0.16	0.01	-0.06	-0.02	-0.04	-0.14	-0.20					

TABEL 5.4. Pearson correlatiematrix voor alle 26 grondwatermonsters uit waarnemingsputten behorende tot het meetnet van Noordbargeres, in meetronde Vromans 2010. Berekend met HGC.

Table with columns: Parameter, Depth, O2, CH4, EC, pH, Cl, SO4, HCO3, NO3, PO4, Na, K, Ca, Mg, Fe, Mn, NH4, SiO2, F, DOC, Al, As, B, Ba, Be, Br, Cd, Ce, Co, Cr, Cs, Cu. It contains a large matrix of Pearson correlation coefficients between various parameters.

- **aan grondontsmettingsmiddel DD gerelateerde OMIVE:** 12-dcp (1,2-dichloorpropaan), 123-tcpa (1,2,3-trichloorpropaan) en 2c1prope (2-chloor-1-propeen). Deze OMIVE komen als verontreiniging voor in DD (met 1,3-dichloorpropeen als werkzame stof) en zijn dus logischerwijs onderling verbonden, ondanks in de tijd wijzigende verhoudingen (zie Eijsink, 1985) en verschillen in afbreekbaarheid.
- **OMIVE groep bentazon, mcpp, 11dcea, 11dcee.** De herbiciden bentazon en MCP (mecoprop) komen vaak samen voor, o.a. in het middel Basagran P (Stuyfzand & Lüers 1996). Dat geldt ook voor de industriële, vluchtige gechloreerde koolwaterstoffen 11dcea (1,1-dichloorethaan) en 11dcee (1,1-dichlooretheen). Waarom deze 4 stoffen samen voorkomen is onduidelijk, maar oppervlaktewater (Oranjekanaal) zou een gemeenschappelijke bron kunnen vormen.
- **OMIVE groep tri, 12dcee, 12dcea.** De industriële vluchtige gechloreerde koolwaterstoffen tri (trichlooretheen), 12dcee (1,2-dichlooretheen) en 12dcea (1,2-dichloorethaan) komen vaak samen voor in stedelijke omgeving.

Het zou mooi geweest zijn, als de relatief kostbare analyse van OMIVE of spore-elementen afhankelijk zou kunnen worden gesteld van een goedkoop meetbare screeningsparameters zoals de EC of pH. De correlatiematrix in Tabel 5.3 toont evenwel dat er slechts een beperkt aantal aanknopingspunten hiervoor is. **Voor belangrijke conclusies hieruit → § 7.1 en 7.2.**

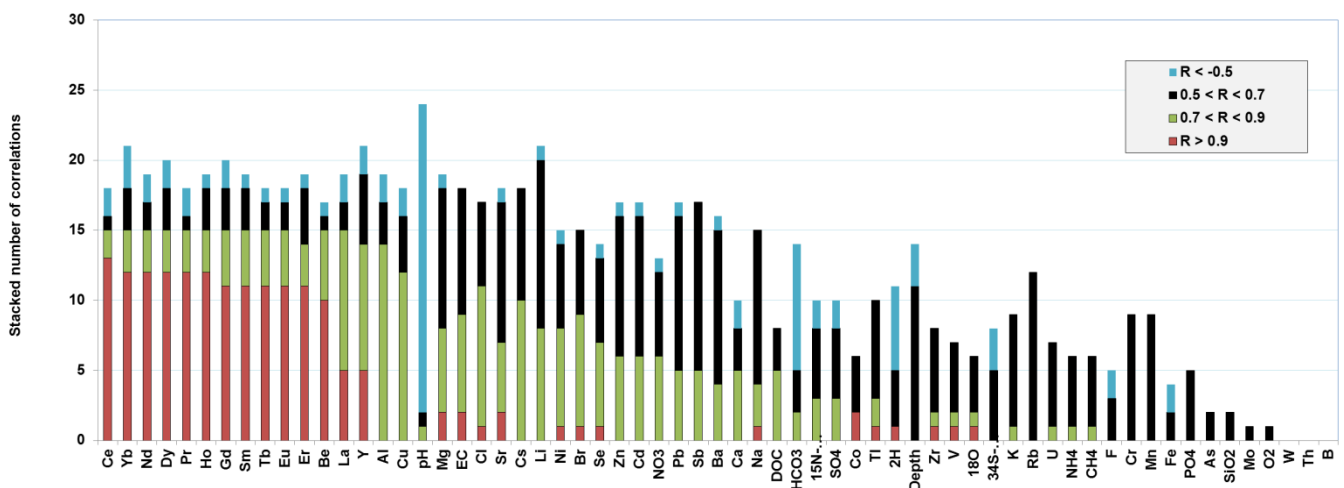


FIG. 5.2. Plot van parameters en het gestapelde aantal correlaties (>0.5 of <-0.5) van elk met alle andere parameters. De parameters zijn gerangschikt van hoogste naar laagste correlatiescore CS (zie tekst). Correlatie score plot voor alle 26 grondwatermonsters uit waarnemingsputten behorende tot het meetnet van Noordbargeres, in meetronde Vromans 2010. Berekend met HGC.

5.3 Watersoorten onderscheiden naar herkomst

In de onderhavige situatie zijn de volgende hoofdgrondwatersoorten (eindleden) onderscheiden: (A) door landbouw beïnvloed water, (C) geïnfiltreerd oppervlaktewater, voornamelijk vanuit het Oranjekanaal; (N) natuurlijk, schoon geïnfiltreerd regenwater; en (U) water geïnfiltreerd in stedelijk (urbaan) gebied. De chemische samenstelling daarvan, van mengvormen en ruwwater is weergegeven in Tabel 5.5 (macroparameters, spore-elementen, isotopen en berekende parameters) en Tabel 5.6 (OMIVE).

TABEL 5.5. Gemiddelde concentraties van macroparameters, spore-elementen, isotopen en berekende parameters voor 4 eindleden (A, C, N en U), 4 mengvormen (Ac, An, Au, Nu), ondiep natuurlijk grondwater (Ns) en ruwwater (PS-raw) in 2011. BGL = beneden maaiveld. Cijfers in rood = data van Mendizabal (2011).

Type	unit	A	Ac	An	Au	C	N	Ns	Nu	U	PS--Raw
Samples	n	36	11	15	14	12	10	6	3	29	1
Top	m BGL	-34.2	-27.6	-50.4	-31.3	-38.2	-73.7	-17.0	-56.0	-32.6	-46.5
Base	m BGL	-36.0	-29.6	-52.4	-33.3	-40.0	-75.6	-19.0	-58.0	-34.6	-59.4
O2	mg/L	2.7	0.6	0.2	4.2	0.4	0.3		0.2	1.5	0.3
CH4	mg/L	0.01	1.96	0.1	0.01	1.04	0.036	0.00	0.0	0.02	0.044
EC-20	uS/cm	581	367	278	602	397	239	123	274	795	442
Temp	oC	10.5	11.4	10.8	11.3	11.1	10.3	10.6	11.3	11.4	10.4
pH-Lab		6.88	7.02	6.64	6.62	6.96	6.90	5.16	6.62	6.33	6.9
Na	mg/L	23.5	29.7	14.9	30.7	27.7	11.6	3.7	17.3	62.1	20.1
K	mg/L	8.5	5.0	2.3	5.3	3.2	2.8	8.0	2.1	23.2	4.1
Ca	mg/L	86.6	34.3	24.4	79.7	44.1	20.9	9.4	23.9	73.6	52.5
Mg	mg/L	10.2	5.4	3.5	12.2	7.1	2.9	2.8	3.1	17.9	6.8
Fe	mg/L	3.85	6.51	19.94	8.51	7.11	16.29	0.07	18.41	3.86	14.94
Mn	mg/L	0.30	0.34	0.72	0.31	0.31	0.69	0.12	0.42	0.71	0.52
NH4	mg NH4/L	0.09	2.27	0.35	0.19	0.16	0.27	0.03	0.64	0.11	0.24
SiO2	mg SiO2/L	16.9	13.6	16.6	15.6	18.4		15.9	22.4	17.5	16.4
Cl	mg/L	38.7	44.3	27.7	41.7	45.3	15.8	4.4	29.0	126.2	38.7
SO4	mg SO4/L	103.3	23.9	43.6	93.9	35.5	18.8	34.7	36.5	100.1	66.4
HCO3	mg/L	163	132	74	165	139	95	5	64	156	136
NO3	mg NO3/L	32.6	0.2	0.2	53.2	0.3	0.3	7.7	0.2	16.0	0.2
NO2	mg NO2/L	0.017	0.003	0.002	0.003	0.003	0.003	0.003	0.003	0.009	0.003
PO4-t	mg PO4/L	0.41	1.04	0.63	0.12	0.30	0.82	0.08	1.74	0.08	0.51
PO4-O	mg PO4/L	0.16	1.15	0.93	0.31	0.23	1.51	0.03	1.69	0.12	0.68
F	mg/L	0.08	0.13	0.12	0.03	0.07		0.03	0.09	0.04	0.11
DOC	mg/L	2.4	9.6	2.6	1.7	5.4	1.7	2.6	3.4	3.2	2.2
Al	ug/L	115	4	8	6	6	9	29	5	26	3
As	ug/L	1	12	1	1	1	2	0	1	2	1
B	ug/L	18	59	11	56	128	20	36	10	58	17
Ba	ug/L	36	26	34	41	36		37	19	65	42.0
Be	ug/L	0.03	0.07	0.03	0.03	0.03		1.17	0.0	0.13	0.03
Cd	ug/L	0.14	0.05	0.05	0.15	0.04	0.09	0.19	0.04	0.56	0.05
Co	ug/L	6.5	0.6	0.8	1.7	0.5	0.5	1.0	0.4	11.3	0.5
Cr	ug/L	0.6	0.5	0.5	1.5	0.4	0.6	0.6	0.4	0.5	0.3
Cu	ug/L	2.6	2.1	2.2	2.4	1.9	2.5	2.1	1.7	2.2	0.2
Gd	ug/L	0.01	0.16	0.04	0.01	0.04		0.40	0.02	0.06	0.01
La	ug/L	0.01	0.13	0.08	0.02	0.07		0.73	0.01	0.23	0.01
Li	ug/L	4.9	1.7	2.8	4.5	3.3		3.2	2.5	10.3	4.8
Mo	ug/L	0.15	0.08	0.13	0.05	0.28		0.05	0.05	0.26	0.10
Nd	ug/L	0.02	0.29	0.13	0.01	0.10		1.34	0.05	0.26	0.01
Ni	ug/L	13.3	0.9	1.4	4.0	215	0.7	4.3	0.4	26.2	0.3
Pb	ug/L	0.5	0.4	0.5	1.4	0.4	0.9	0.3	0.4	0.4	0.1
Rb	ug/L	1.80	3.42	2.1	0.39	1.80		6.24	0.6	3.03	2.2
Sb	ug/L	0.03	0.03	0.4	0.09	0.03		1.0	0.05	0.11	0.03
Se	ug/L	0.25	0.38	0.3	1.20	0.25		0.47	0.3	0.86	0.25
Sr	ug/L	171	83	90	306	97		57	111	380	123
Th	ug/L	0.14	0.03	0.04	0.03	0.03		0.03	0.03	0.03	0.03
U	ug/L	0.01	0.01	0.02	0.14	0.01		0.01	0.01	1.59	0.84
V	ug/L	0.17	5.40	0.55	0.50	0.37		0.37	1.00	0.52	0.10
Y	ug/L	0.07	1.36	0.25	0.06	0.32		1.68	0.15	0.62	0.01
Zn	ug/L	19	4	4	9	4	3	13	4	23	5
2H	‰ SMOU	-45.9	-34.4	-49.1	-46.8	-38.7		-46.7	-50.4	-50.0	-48.00
18O	‰ SMOU	-6.87	-4.64	-7.51	-7.07	-5.47		-7.34	-7.49	-7.49	-6.80
15N-NO3	‰				5.0				4.5	14.7	
34S-SO4	‰	-4.9	33.1	-2.1	5.8	6.0		6.4	14.7	3.8	-2.7
Watertype		F2CaMix+	F2CaHCO3o	g1CaMixo	F2CaMix+	F2CaHCO3o	g1CaHCO3o	G*CaSO4o	g1CaMixo	F2CaMix+	F2CaMixo
SI-C	calcite	-0.67	-0.93	-1.71	-0.94	-0.89	-1.40	-4.72	-1.78	-1.31	-0.88
SI-S	siderite	0.21	0.58	0.42	0.32	0.55	0.72	-4.67	0.33	-0.36	0.81
SI-R	rhodochrosite	-0.61	-0.42	-0.74	-0.83	-0.52	-0.37	-4.15	-1.03	-0.81	-0.36
TIC	mmol/L	3.59	2.71	1.96	4.35	2.94	2.08	1.49	1.72	5.57	2.91
Acidity	pH-class	c	c	c	c	c	c	a	c	c	c
	SI-class	c	c	a	c	c	a	a	a	a	c
Redox	type	2.5	6.7	5	2.5	5.7	5	3.4	5	2.5	5
Redox	code	m	d	r	m	r	r	m	r	m	r
HYSA code	simple	mf	d	r	mf	r	r	am	r	mf	r
MOC+	me/L	10.39	0.35	2.76	11.46	1.99	1.04	3.14	2.24	8.64	4.54

A = door landbouw beïnvloed water; C = geïnfiltreerd oppervlaktewater, voornamelijk vanuit Oranjekanaal; N = natuurlijk, schoon geïnfiltreerd regenwater op grote diepte; U = water geïnfiltreerd in stedelijk (urbaan) gebied; Ns = N maar ondiep; Ac, An, Au, Nu = voornamelijk A of N met significante hoeveelheid C, N of U bijgemengd.

TABEL 5.6. Gemiddelde concentraties van de 24 geselecteerde OMIVE in de 4 eindleden (A, C, N en U), in 4 mengvormen (Ac, An, Au, Nu), in ondiep natuurlijk grondwater (Ns) of ruwwater in 2011. Indien concentratie = 0, dan wordt bedoeld <MDL (Minimum Detectie Limiet).

Abbrev.	Compound	unit	MDL	A	Ac	An	Au	C	N	Ns	Nu	U	Raw
				36	11	15	14	12	10	6	3	29	1
11dcea	1,1-Dichloorethaan	ug/L	< 0.05	0	0.88	0	0	0	0	0	0	0	0.10
11dcee	1,1-Dichlooretheen	ug/L	< 0.05	0	0.33	0	0	0	0	0	0	0.01	0
12dcea	1,2-dichloorethaan	ug/L	< 0.05	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0.02	0
c12dcee	1,2-dichlooretheen (cis-)	ug/L	< 0.05	0	0.02	0	0	0.02	0	0	0	0.08	0
12dcpa	1,2-dichloorpropaan	ug/L	< 0.02	0.88	0.25	0.04	0.002	0.06	0.002	0	0	0.001	1.44
14diox	1,4 Dioxaan	ug/L	<0.05/<0.3	0	0.39	0	0.12	2.18	0	0	0	0	0.40
123tcpa	1,2,3-trichloorpropaan	ug/L	< 0.02	0.03	0	0.003	0.002	0	0	0	0	0	0.02
124tmben	1,2,4-trimethylbenzeen	ug/L	< 0.02	0.00	0	0.002	0	0.004	0	0	0	0	0
2c1prope	2-Chloor-1-propeen	ug/L	< 0.02	0.003	0.003	0	0	0	0	0	0	0	0
34nfenol	3+4-nitrofenol	ug/L	< 0.01	0.02	0.03	0.01	0.00	0.02	0	0.06	0.05	0.03	0.01
bam	2,6-dichloorbenzamide	ug/L	< 0.05	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0
bentazon	Bentazon	ug/L	< 0.01	0.01	0.18	0.005	0.003	0.08	0	0	0	0.005	0.06
biph.eth	biphenylether	ug/L	< 0.05	0	0.08	0	0	0	0	0	0	0	0
bromacil	bromacil	ug/L	< 0.02	0.001	0	0.02	0	0	0	0	0	0	0
carbenda	carbendazim	ug/L	< 0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
clidazon	chloridazon	ug/L	< 0.05	0	0.02	0	0	0	0	0	0	0	0
diuron	Diuron	ug/L	< 0.01	0.13	0.01	0.04	0	0	0	0	0	0	0
ethofmst	ethofumesaat	ug/L	< 0.05	0	0.04	0	0	0	0	0	0	0	0
glyfosaa	glyfosaat	ug/L	< 0.05	0.003	0.05	0	0	0.02	0	0	0	0	0
mcpp	MCPP (mecoprop)	ug/L	< 0.01	0.001	0.09	0.003	0	0.03	0	0	0	0.003	0.01
per	tetrachlooretheen (per)	ug/L	< 0.05	0	0	0	0	0	0	0	0	0.02	0
thf	tetrahydrofuraan	ug/L	< 0.10	0	0.05	0	0	0.04	0	0	0	0	0
tri	trichlooretheen (tri)	ug/L	< 0.05	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0.23
vinylchl	Chlooretheen (vinylchloride)	ug/L	< 0.05	0	0	0	0.02	0	0	0	0	0	0.84

De eindleden zijn onderscheiden op basis van hun ruimtelijke positie en chemische samenstelling:

- **A:** nabijheid landbouwpercelen, duidelijk verhoogde concentratie NO_3 of SO_4 of HCO_3 al dan niet in combinatie met verhoogde concentraties 1,2-dichloorpropaan of diuron. Aanvullend geen al te hoge Cl (<60 mg/L) en K concentratie (<10 mg/L).
- **C:** nabijheid Oranjekanaal, geen verhoogde concentratie NO_3 of SO_4 , wel verhoogde concentratie ^2H en ^{18}O t.g.v. oppervlaktewatervedamping, verhoogde concentratie B, Mo en 1,4-dioxaan. Tevens relatief veel CH_4 ten gevolge van infiltratie door een onderwaterbodemp in een gebied met veen in de toplaag. Ook tetrahydrofuraan, bentazon en mecoprop zijn typisch verhoogd, ook al zijn de concentraties hiervan nog hoger in type Ac.
- **N (diep):** diepte > ca. 40 m-NAP, Cl < 25 mg/L, (praktisch) geen OMIVE en geen kenmerken als gegeven voor A, C en U.
- **U:** nabijheid stedelijke bebouwing, duidelijk verhoogde concentratie NO_3 of SO_4 of HCO_3 meestal in combinatie met verhoogde concentraties 1,2-dichloorethaan, 1,2-dichlooretheen, per, tri of vinylchloride. Aanvullend meestal een hoge Cl (>60 mg/L) en K concentratie (>10 mg/L), en verhoogde niveaus Ba, Cd, Co, Li, Mo, U, Zn en 15N.

5.4 Bepaling van de 4 mengende eindleden in ruwwater 2011

Op basis van de in tabellen 5.5 en 5.6 gegeven gemiddelde samenstelling van de 4 eindleden, kan via trial and error de gemiddelde bijdrage (fractie) van elk eindlid aan de samenstelling van het ruwwater in 2011 worden berekend, volgens:

$$C_{\text{RAW}} = f_A C_A + f_C C_C + f_N C_N + (1 - f_A - f_C - f_N) C_U \quad (5.2)$$

waarin: f_x = volumefractie van eindlid X aan het gemengde ruwwater [-]; C_x = concentratie van eindlid X [mg/L]

Daarbij dienen natuurlijk wel conservatieve tracers gebruikt te worden, of tracers waarbij een correctie voor reactief transport mogelijk is. In Tabel 5.7 zijn de resultaten van 10 'trial and error' opties doorgerekend met 12 potentiële tracers. De tracers Cl, CH₄, bentazon en ¹⁸O zijn (bij benadering) conservatief, de andere 8 parameters zijn dat niet. Van die 8 reactieve parameters kunnen we SO₄, Ca en HCO₃ corrigeren voor de oxidatie van pyriet en bulk organisch materiaal (BOM) door nitraat en de oplossing van kalk door het tijdens oxidatie ontstane zuur.

Het Excel programma dat in Tabel 5.7 is getoond, maakt onderdeel uit van 'UnMix', dat tevens routines bevat om zonder trial and error, dus direct analytisch, de bijdrage van 2-3 mengende eindleden aan een mengsel te bepalen indien de samenstelling van het mengsel en van de eindleden bekend is.

Uit Tabel 5.7 volgt dat optie 8 de beste overeenkomst geeft tussen het berekende mengsel en het gemeten ruwwater, althans na verdiscontering van pyriet- en BOM-oxidatie, elk door de helft van 13.3 mg NO₃/L. De voorspelde concentratie van Fe is te laag, en die van B, 1,2-dichloorpropan en 1,4-dioxaan is te hoog. Deze afwijkingen kunnen vele redenen hebben, zoals hogere Fe concentraties in de eindleden dan gemiddeld genomen, sorptie van B (normaal), en afbraak van 1,2-dichloorpropan en 1,4-dioxaan (zie § 6.3 en 6.4).

Eq.5.2 is voor bentazon toegepast onder aanname dat type Ac een betere schatting geeft voor type A dan type A zelf. Voor ¹⁸O is Eq.5.2 bij gebrek aan data voor type N zodanig toegepast dat de voorspelde en gemeten ¹⁸O concentraties identiek werden. Dat levert een ¹⁸O concentratie op van -6.68 ‰ SMOW (afwijking t.o.v. Standard Mean Ocean Water), een waarde die controle behoeft.

Het ruwwater bestond in 2011 dus, volgens het beste scenario #8, voor 37% uit A, 3% uit C, 50% uit N en 10% uit U. De 3% C en 10% U corresponderen goed met de modelberekeningen van Foppen & Kremers (1997) in Tabel 4.1, uitgaande van een significante verontreiniging van typen C en U sedert 1950. Voor type A komen we zo via Foppen & Kremers hoger uit, namelijk op 60% A, terwijl de HRC in Tabel 4.2 (scenario #9 daarin) lager scoort met 29-10-3 = 16% type A, 60 jaar na 1950. Met andere woorden, het percentage natuurlijk grondwater was in 2011 hoger dan volgend uit het 3D-model (50 i.p.v. 100-3-10-60 = 27%) en lager dan volgend uit de HRC (50 i.p.v. 100-3-10-16 = 71%)! Een goede verklaring is dat de agrarische invloeden (m.u.v. pesticiden) van veel eerdere datum dan 1950 zijn. De winning vindt immers plaats op een es!

TABEL 5.7. Schatting van de bijdrage van eindleden A, C, N en U aan de ruwwaterkwaliteit in 2011, via trial and error (10 opties). Optie 8 lijkt de beste benadering op te leveren, maar vergt inbegrip van de effecten van bodemreacties, met name de oxidatie van pyriet en bulk organisch materiaal (BOM) en kalkoplossing.

End member	End-member fraction by volume				CH4	Cl	SO4	Ca	Fe	HCO3	NO3	B	12dcpa	14diox	bentazon	d18O	
	A	C	N	U													
A	1.00				0.01	38.7	103.3	86.6	3.8	163	32.6		18	0.88	0.00	0.184	-6.87
C		1.00			1.04	45.3	35.5	44.1	7.1	139	0.3		128	0.06	2.18	0.079	-5.47
N			1.00		0.04	15.8	18.8	20.9	16.3	95	0.3		58	0.00	0.00	0	-6.68
U				1.00	0.02	126.2	100.1	73.6	3.9	156	16.0		58	0.00	0.00	0.005	-7.49
OPTION:																	
<i>CALCULATED (Mixing of end-members, without reactions)</i>																	
1	0.60	0.10	0.20	0.10	0.12	43.5	79.3	67.9	6.7	146	21.2		41	0.54	0.22	0.12	-6.75
2	0.60	0.10	0.10	0.20	0.12	54.6	87.4	73.2	5.4	152	22.8		41	0.54	0.22	0.12	-6.84
3	0.60	0.05	0.30	0.05	0.07	36.5	74.4	64.1	7.7	141	20.5		38	0.53	0.11	0.11	-6.77
4	0.50	0.05	0.40	0.05	0.07	34.3	65.9	57.6	9.0	134	17.2		42	0.44	0.11	0.10	-6.76
5	0.40	0.01	0.50	0.09	0.03	35.2	60.0	52.2	10.1	128	14.6		43	0.35	0.02	0.07	-6.82
6	0.30	0.05	0.50	0.15	0.08	40.7	57.1	49.7	10.2	127	12.3		50	0.27	0.11	0.06	-6.80
7	0.35	0.05	0.50	0.10	0.08	36.3	57.3	50.3	10.2	127	13.2		48	0.31	0.11	0.07	-6.77
8	0.37	0.03	0.50	0.10	0.05	36.2	58.7	51.2	10.2	127	13.8		45	0.33	0.07	0.07	-6.80
9	0.35	0.10	0.50	0.05	0.13	32.3	54.1	48.9	10.4	126	12.4		51	0.32	0.22	0.07	-6.67
10	0.40	0.01	0.50	0.09	0.03	35.2	60.0	52.2	10.1	128	14.6		43	0.35	0.02	0.07	-6.82
MEASURED																	
Measured Raw water quality					0.05	38.3	65.5	52.5	14.7	135	0.5		17	1.37	0.36	0.06	-6.80
8 + Reactions					0.05	36.2	65.5	54.7	10.2	142	0.5		45	0.33	0.07	0.07	-6.80
Reactions = pyrite + BOM oxid. + calcite diss.							6.9	3.5		15	-13.3						

5.5 Ruimtelijke kartering van de waterkwaliteit anno 2011

5.5.1 Macroparameters

Met behulp van HGC zijn bovenaanzichten en circumsecties gemaakt die de ruimtelijke verdeling anno 2011 tonen van de concentraties Cl (Fig.5.3-5.4), SO₄ (Fig.5.5-5.6), NO₃ (Fig.5.7-5.8), HCO₃ (Fig.5.9), Ca (Fig.5.10) en Fe (Fig.5.11), alsmede van de pH (Fig.5.12).

Uit de gepresenteerde beelden kan o.a. het volgende worden afgeleid:

- De hoogste pH en hoogste concentraties Cl, SO₄, NO₃, HCO₃, Ca zijn grosso modo aanwezig in het noordoostelijke en zuidoostelijke deel (tussen N0°E en N140°E), alwaar keileem (A*) dicht aan maaiveld voorkomt en waar sprake is van sterke agrarische en/of urbane invloeden. In het resterende gebied waar geen keileem voorkomt en urbane invloeden ontbreken, zijn de concentraties doorgaans lager. Dit geldt ruwweg ook voor de individuele pompputten, die vooral in de ZW hoek relatief lage Cl en SO₄ concentraties vertonen. Enkele Cl-pieken komen opvallend dicht bij wegen voor, zoals ondiep bij WP16 en WP18.
- De concentraties Cl, SO₄, HCO₃ en Ca nemen in het algemeen af beneden de benedenheft van aquiferlaag F. Daar bevindt zich ouder en aanzienlijk schoner grondwater (zie ook Tabel 3.3-3.4). In vergelijking met de kartering anno 1988/89 door Vogelaar (1990; niet weergegeven) is dit grensvlak 5-10 m dieper komen te liggen, ten teken van voortgaande verspreiding van mineraalrijker (meer verontreinigd) grondwater. Het oudere en schonere grondwater kent onderin laag F en bovenin laag G zeer hoge Fe concentraties. Beneden ca. 50 m-NAP nemen met de diepte de Fe en Mn concentraties sterk af en die van HCO₃ sterk toe. Dit wijst op de mogelijkheid van precipitatie van mangaanhoudende sideriet, of juist de oplossing ervan boven 50 m-NAP!
- Voor NO₃ geldt dat de concentraties ondiep zijn afgenomen ten opzichte van 1988/89 en dat de verhoogde concentraties grotendeels beperkt zijn gebleven tot aquiferlagen B en C. De bovengrens van nitraatloos grondwater (in laag C of D) is ten opzichte van 1988/89 vrijwel onveranderd, hetgeen getuigt van voldoende redoxbufferend vermogen van vooral aquiferlaag D tot heden! Dit positieve beeld kan iets geflatteerd zijn door de krachtige laterale stroming vanaf de overgang van laag D naar E. Er zijn enkele meetpunten waar NO₃ tot in de bovenetage van laag E lijkt te zijn doorgedrongen, evenwel op laag niveau. Dit doordringen zorgt voor enig NO₃ in het ruwe water (§ 5.6), vooral via de pompputten 19, 20, 21, 24 en 43, welke gelegen zijn aan de N-NO kant van het puttenveld. Merkwaardig genoeg vertonen deze pompputten ook de hoogste Fe, Mn en NH₄ concentraties.
- De pH lijkt weinig veranderd ten opzichte van de kartering in 1988/89.

5.5.2 Arseen en nikkel

De ruimtelijke verdeling anno 2011 van de concentraties As en Ni is weergegeven in circumsectie in resp. Fig.5.13 en Fig.5.14. De concentraties van beiden maar vooral die van Ni lijken verhoogd in de pyrietoxidatiezone waar NO₃ verdwijnt. De Ni concentraties in WPN4 zijn extreem hoog (op 18 m-NAP zelfs 2400 µg/L !), hetgeen op een vuilpluim moet wijzen omdat ook de Ni-concentratie in de stroomafwaartse pompput 41 sterk aan het oplopen is (Van der Moot, mond. meded.).

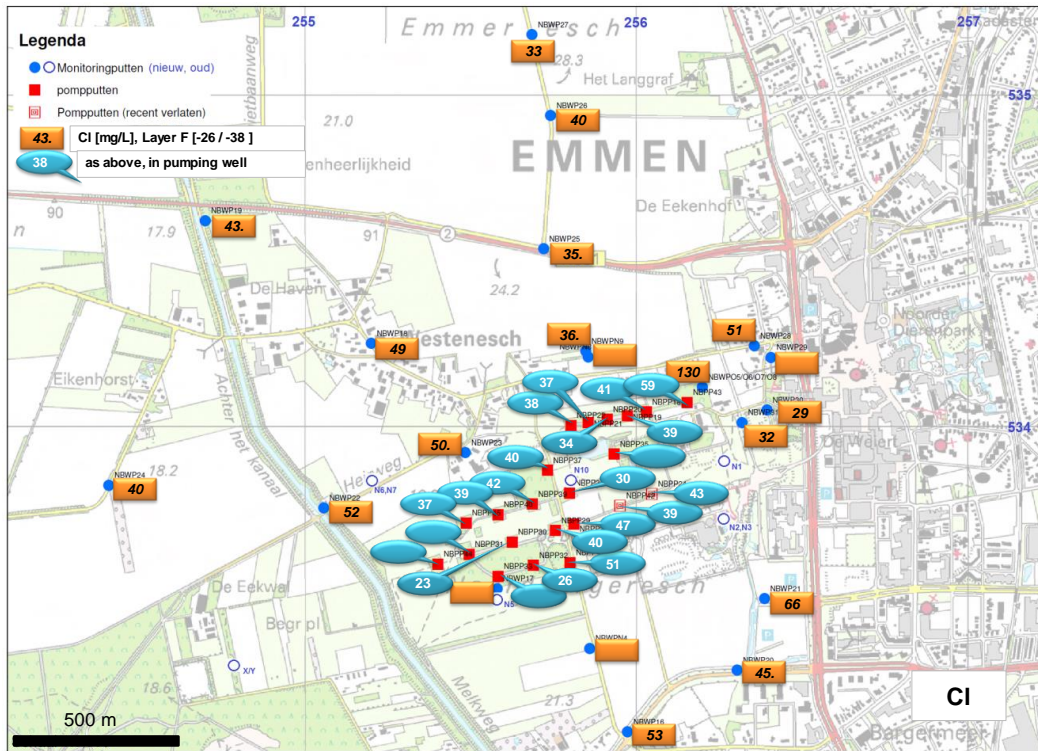


FIG. 5.3. Bovenaanzicht ruimtelijke verdeling van de CI concentratie in aquiferlaag F, in 2011.

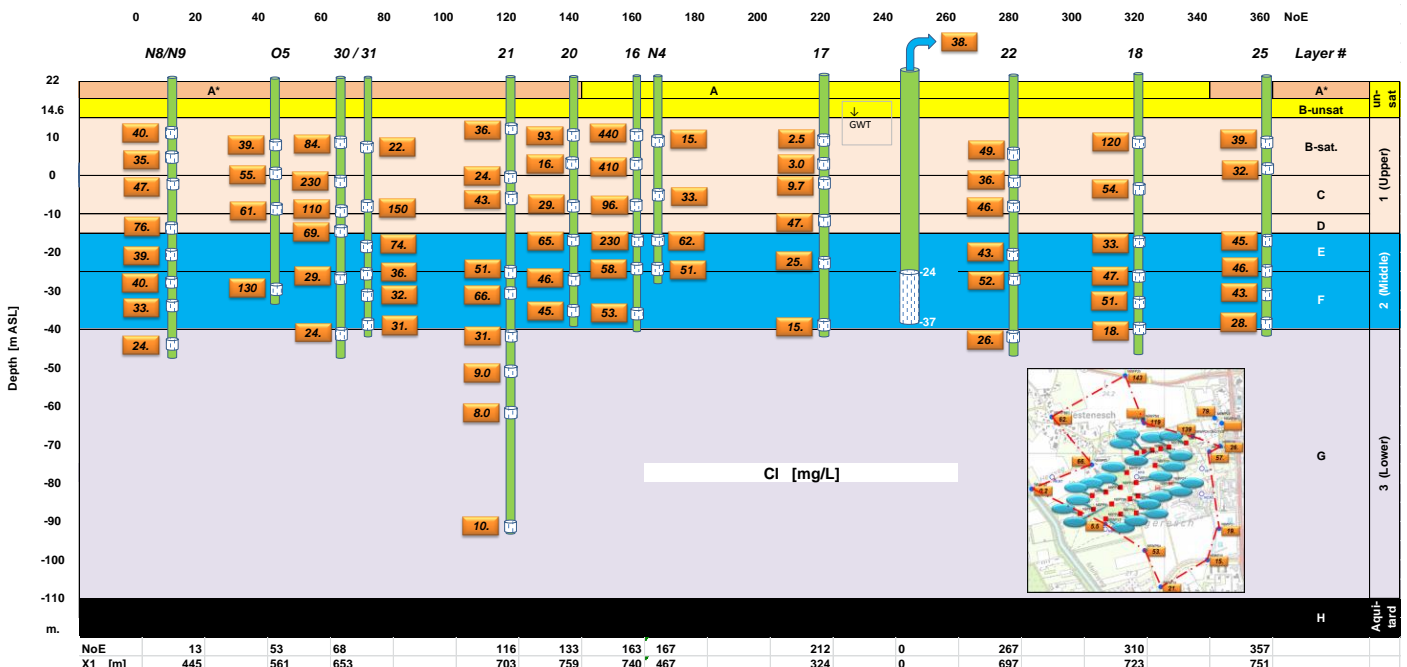


FIG. 5.4. Circumsectie met de ruimtelijke verdeling van de CI concentratie in 2011. Voor ligging van profiel zie inzet of Fig.4.14. N^oE, X₁ = resp. kompasrichting en afstand tot epicentrum winning. A* = keileem.

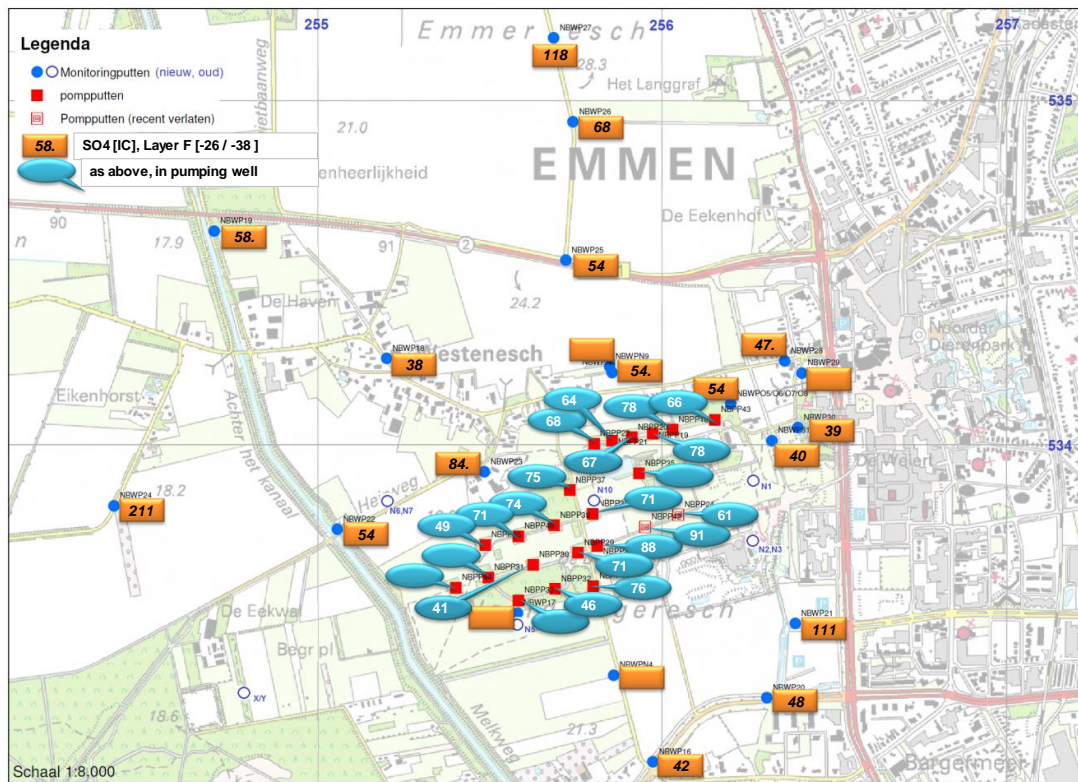


FIG. 5.5. Bovenaanzicht ruimtelijke verdeling van de SO₄ concentratie in aquiferlaag F, in 2011.

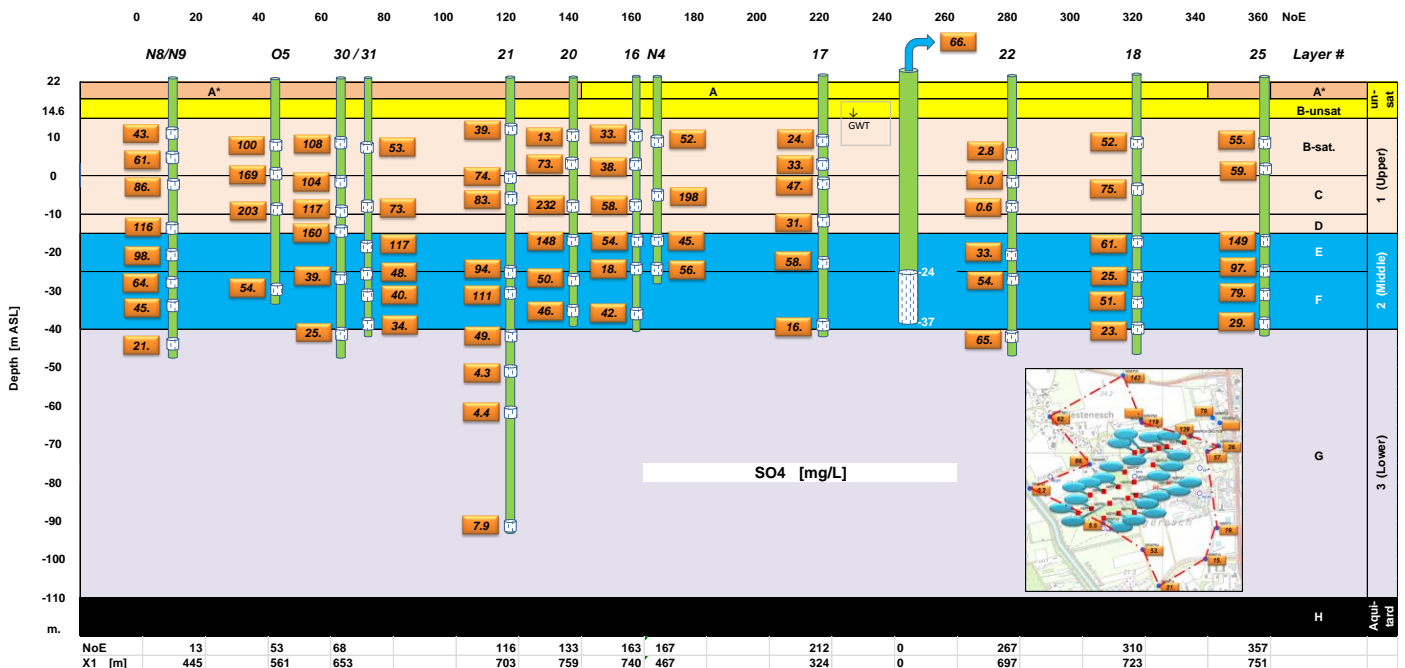


FIG. 5.6. Circumsectie met de ruimtelijke verdeling van de SO₄ concentratie in 2011. Voor ligging van profiel zie inzet of Fig.4.14. N^oE, X₁ = resp. kompasrichting en afstand tot epicentrum winning. A* = keileem.

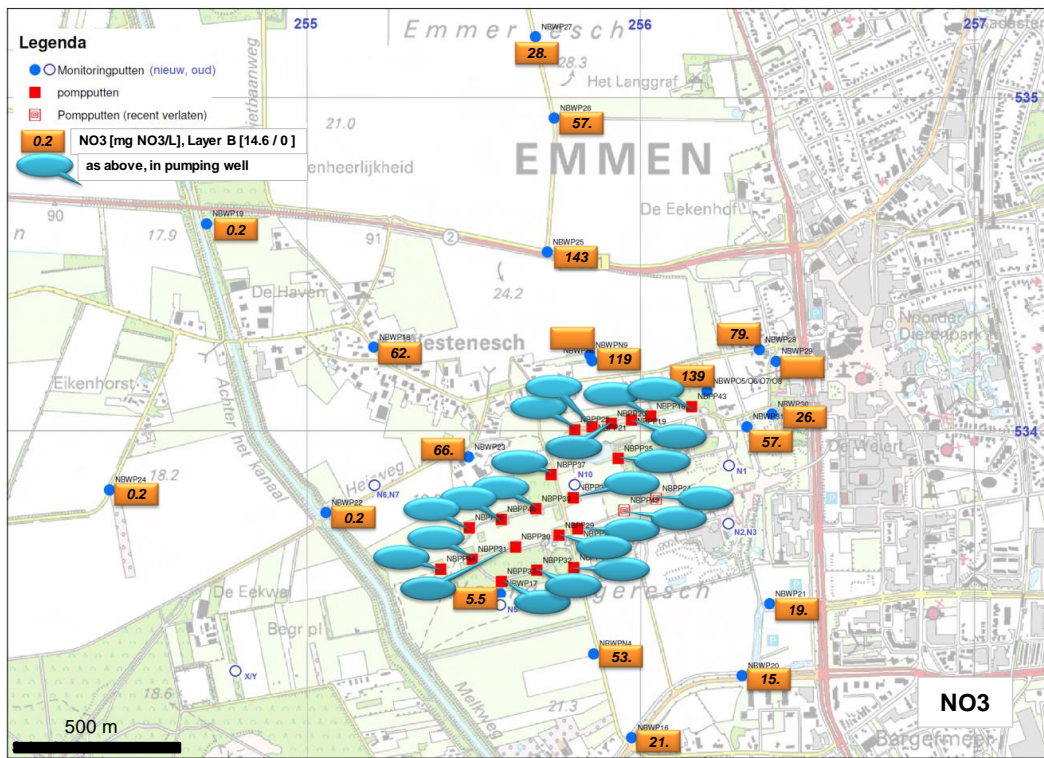


FIG. 5.7. Bovenaanzicht ruimtelijke verdeling van de NO₃ concentratie [mg/L] in aquiferlaag B, in 2011.

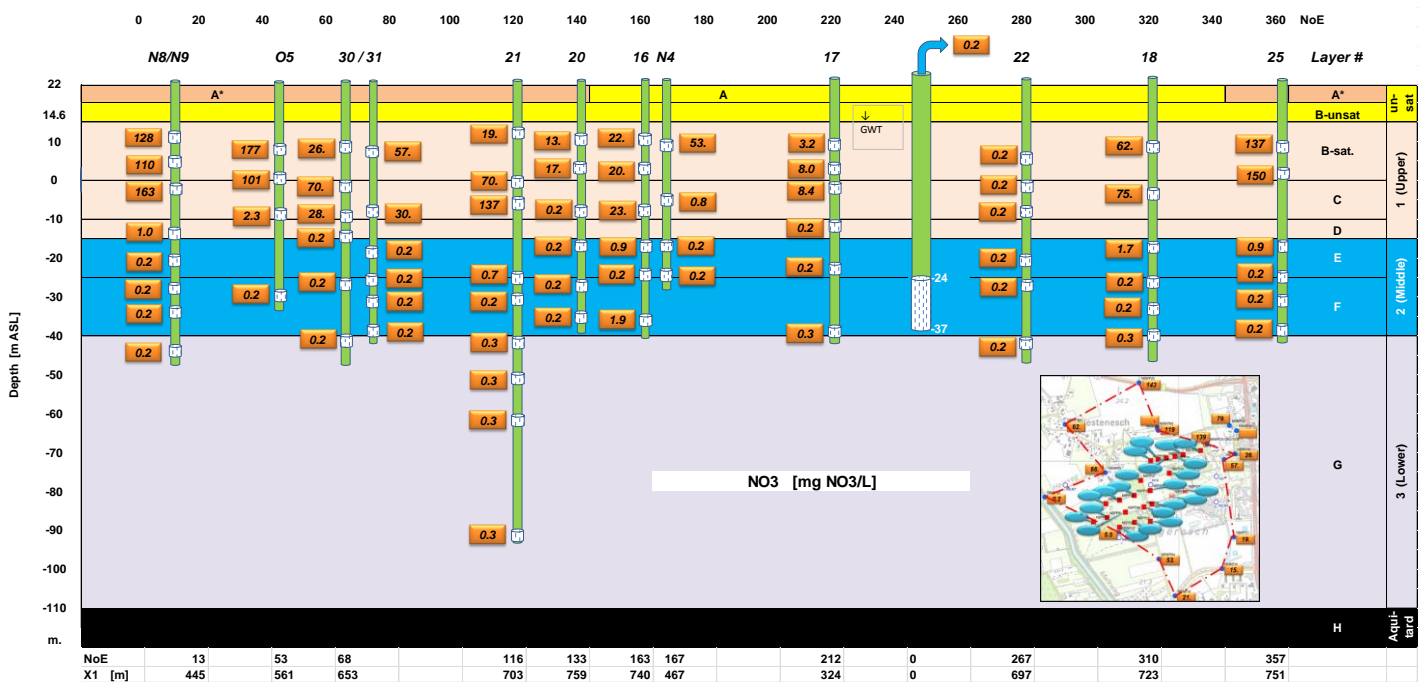


FIG. 5.8. Circumsectie met de ruimtelijke verdeling van de NO₃ concentratie in 2011. Voor ligging van profiel zie inzet of Fig.4.14. N^oE, X₁ = resp. kompasrichting en afstand tot epicentrum winning. A* = keileem.

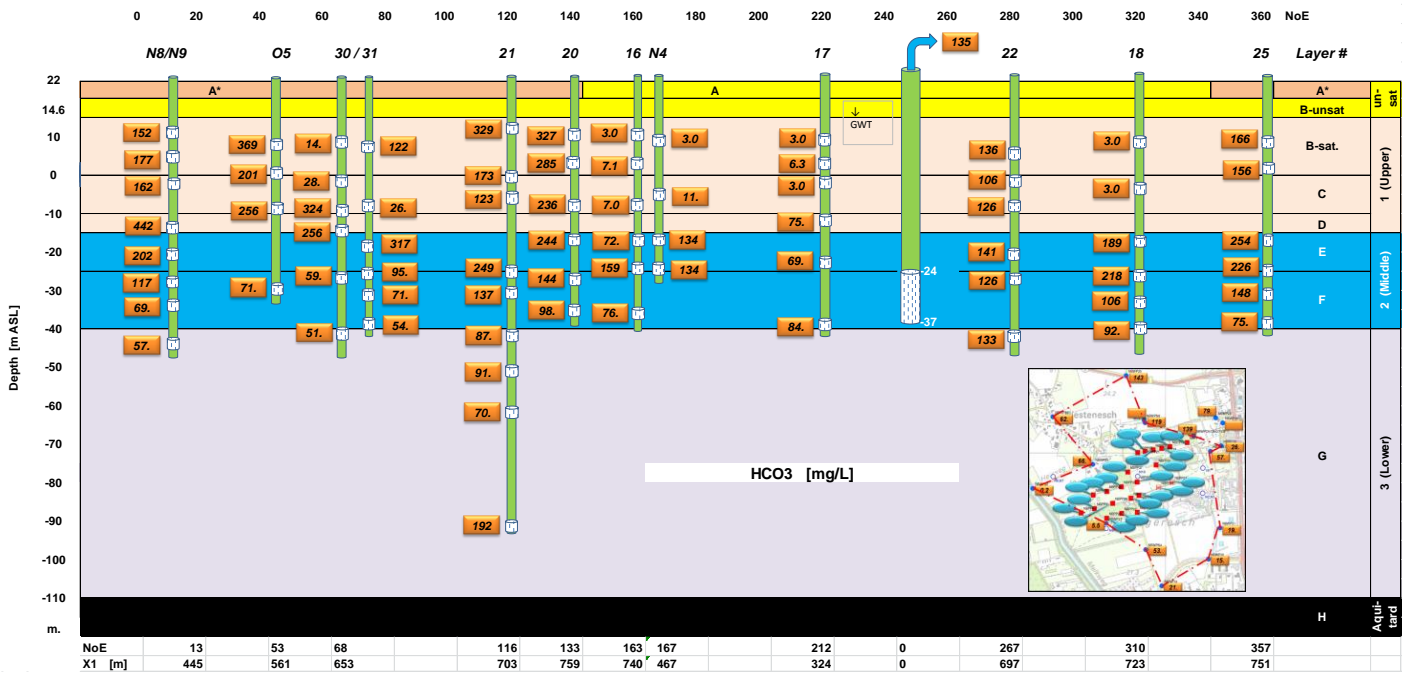


FIG. 5.9. Circumsectie met de ruimtelijke verdeling van de HCO_3^- concentratie in 2011. Voor ligging van profiel zie inzet of Fig.4.14. $N^{\circ}E$, X_1 = resp. kompasrichting en afstand tot epicentrum winning.

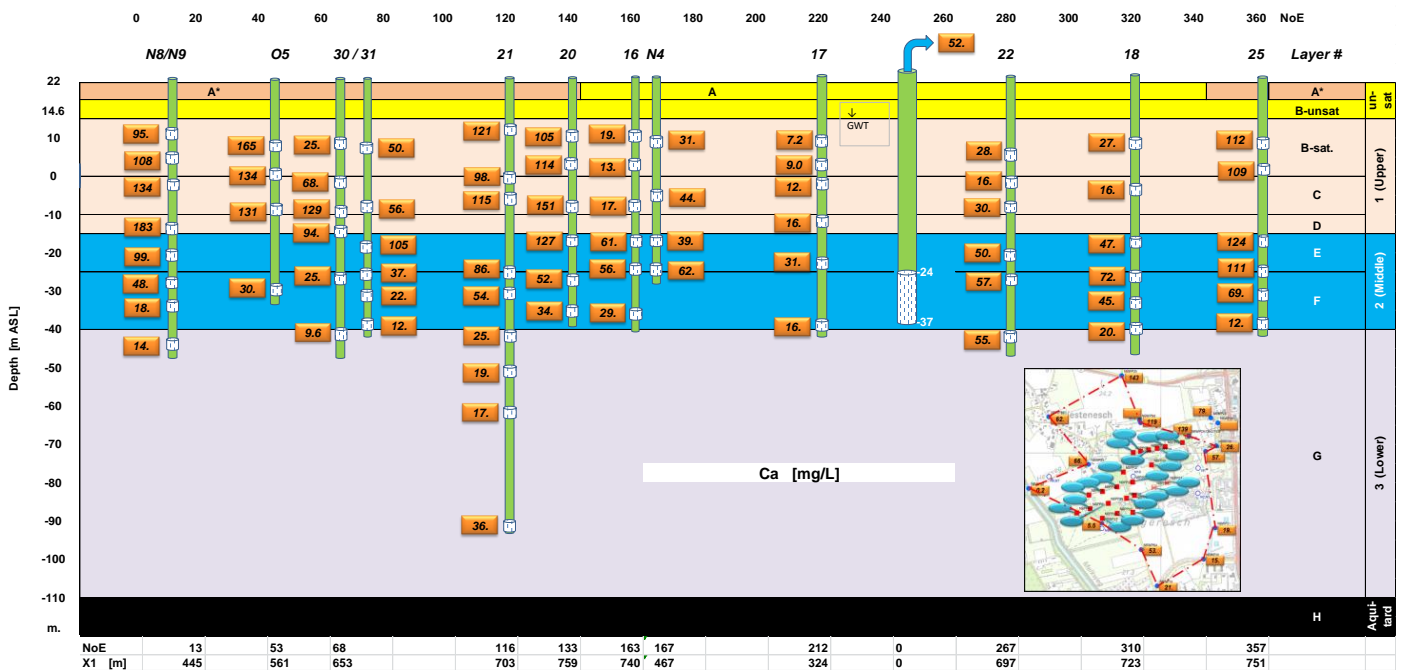


FIG. 5.10. Circumsectie met de ruimtelijke verdeling van de Ca concentratie in 2011. Voor ligging van profiel zie inzet of Fig.4.14. $N^{\circ}E$, X_1 = resp. kompasrichting en afstand tot epicentrum winning. A* = keileem.

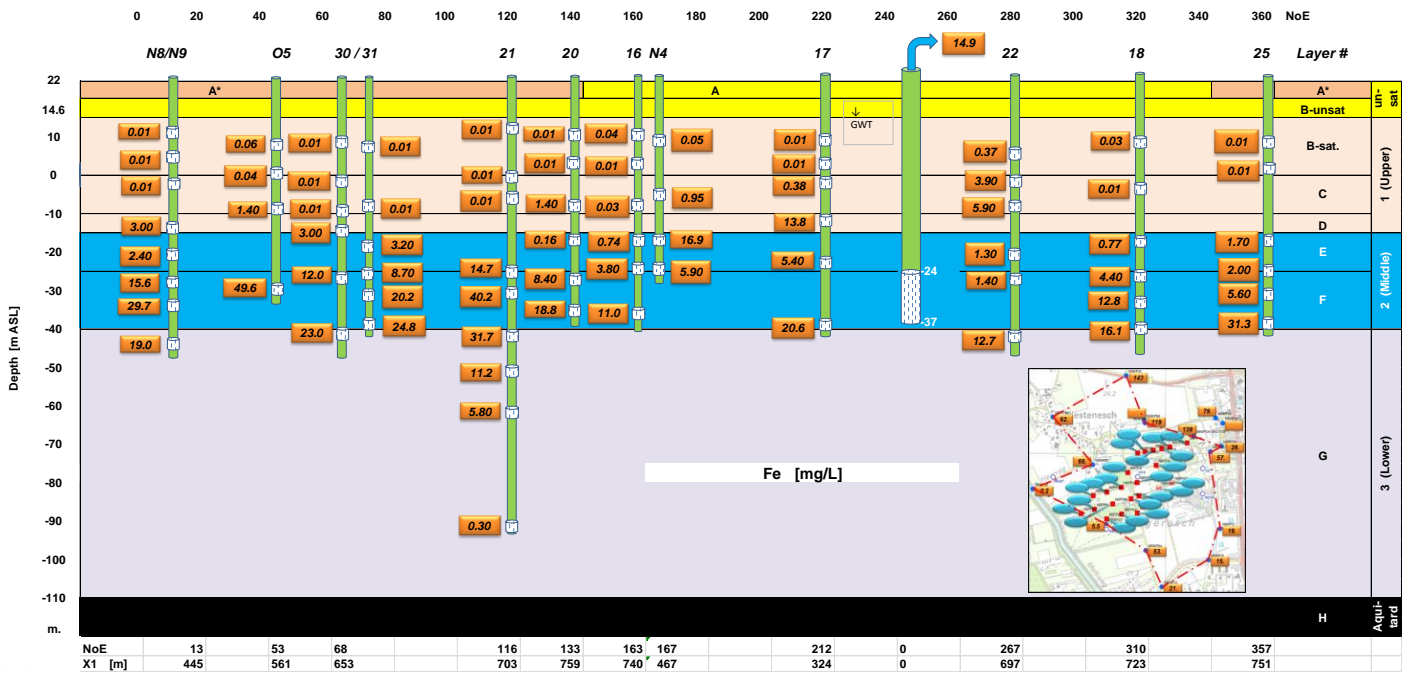


FIG. 5.11. Circumsectie met de ruimtelijke verdeling van de Fe concentratie in 2011. Voor ligging van profiel zie inzet of Fig.4.14. N^oE, X₁ = resp. kompasrichting en afstand tot epicentrum winning. A* = keileem.

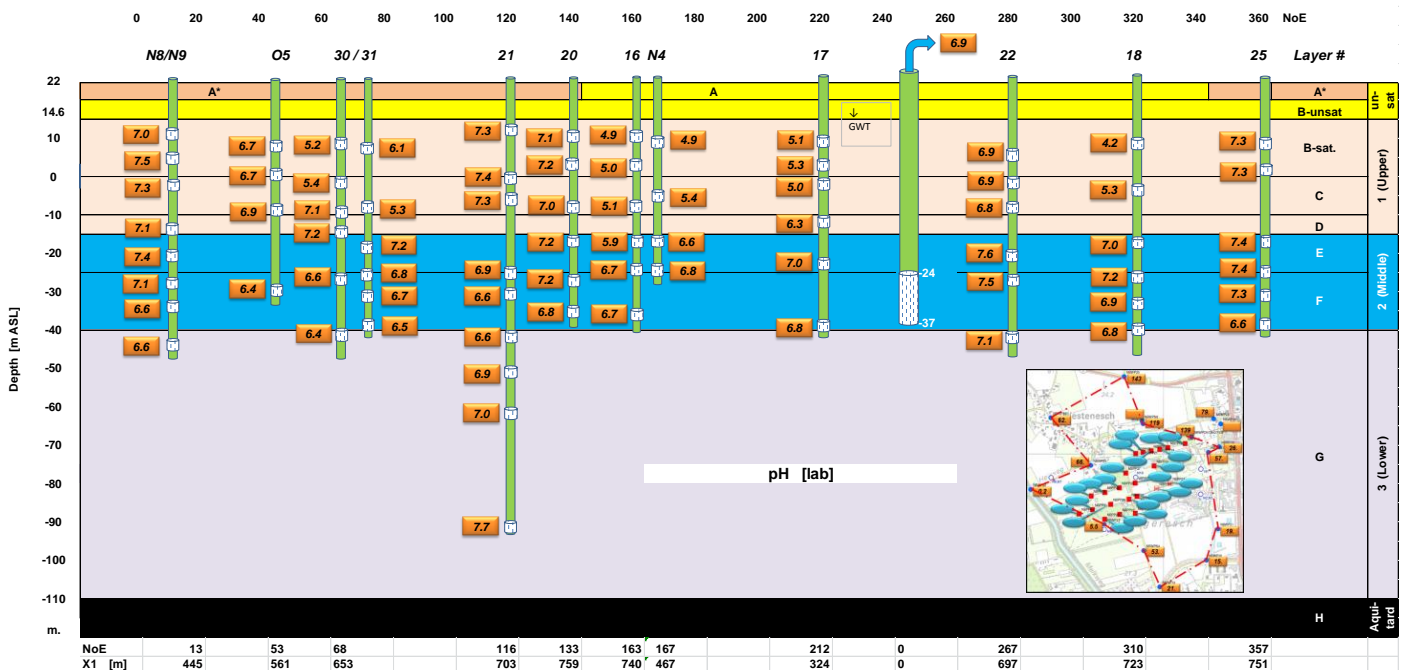


FIG. 5.12. Circumsectie met de ruimtelijke verdeling van de pH in 2011. Voor ligging van profiel zie inzet of Fig.4.14. N^oE, X₁ = resp. kompasrichting en afstand tot epicentrum winning. A* = keileem.

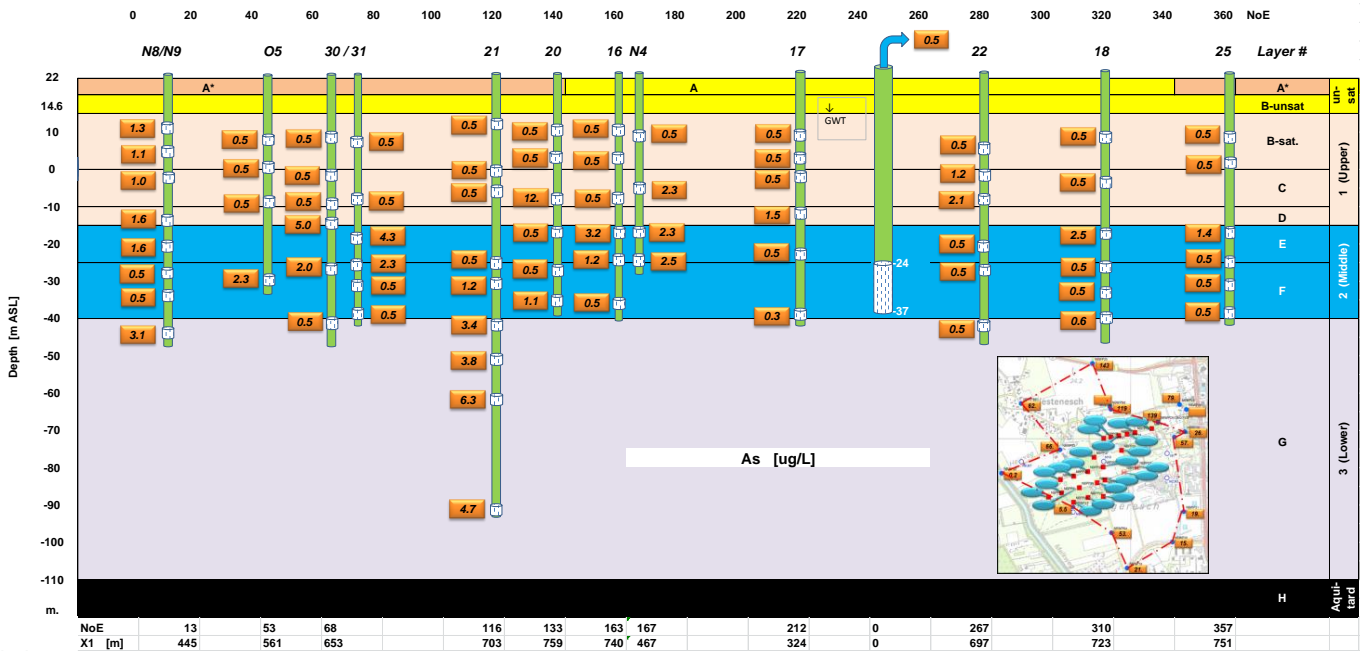


FIG. 5.13. Circumsectie met de ruimtelijke verdeling van de As concentratie in 2011. Voor ligging van profiel zie inzet of Fig.4.14. $N^{\circ}E$, X_1 = resp. kompasrichting en afstand tot epicentrum winning. A* = keileem.

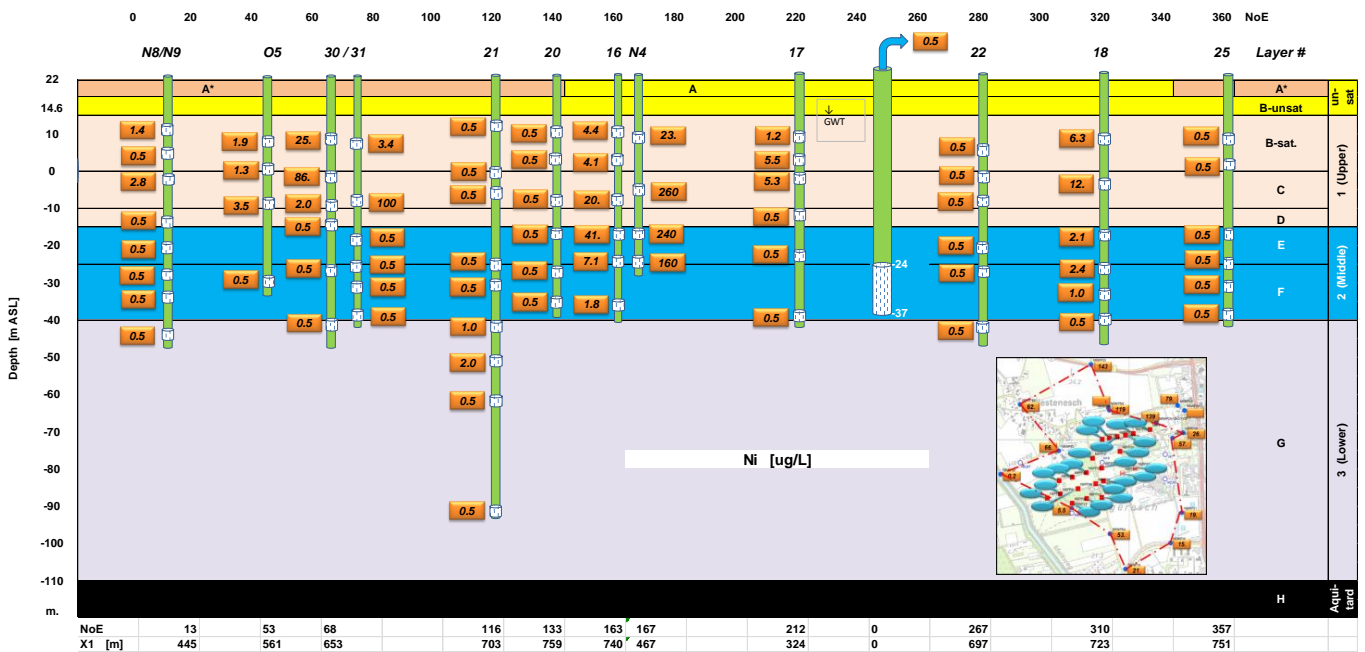


FIG. 5.14. Circumsectie met de ruimtelijke verdeling van de Ni concentratie in 2011. Voor ligging van profiel zie inzet of Fig.4.14. $N^{\circ}E$, X_1 = resp. kompasrichting en afstand tot epicentrum winning. A* = keileem.

5.5.3 1,2-dichloorpropaan en 1,4-dioxaan

De ruimtelijke verdeling anno 2011 van de concentraties 1,2-dichloorpropaan en 1,4-dioxaan is weergegeven in circumsectie in resp. Fig.5.15 en Fig.5.16.

De 1,2-dichloorpropaan concentraties zijn opvallend laag waar de keileem voorkomt (vrijwel overall <MDL), en juist duidelijk aanwezig in het gebied zonder keileem. Daar worden de hoogste concentraties vooral gevonden in laag E en F, en in de westelijke pompputten. Dit wijst erop dat de vrijwel tot nul gereduceerde input sinds 1986 duidelijk effect heeft op jonger grondwater.

De 1,4-dioxaan concentraties zijn daarentegen opvallend laag in de noord- en oosthoek van het studiegebied, waarvandaan geen geïnfiltrerd oppervlaktewater toestroomt vanuit het Oranjekanaal. Ook hier geldt dat de hoogste concentraties vooral op wat grotere diepte gevonden worden (in C, D, E en F), gemiddeld dus iets ondieper dan geldend voor 1,2-dichloorpropaan. Dit verschil komt overeen met het latere tijdstip waarop de dioxaaninput tot nul reduceerde (2002/3).

5.5.4 Hydrochemische facies

De indeling in hydrochemische facies (zones met specifieke hydrochemische kenmerken) geschiedt op basis van 2 pH klassen (zuur en basisch), 4 redox zones ((sub)oxisch, gereduceerd (= anoxisch), diep anoxisch en gemengd), 3 basenuitwisselingsklassen (in evenwicht, verzoet en verzilt) en 2 verontreinigingsniveaus (schoon en verontreinigd). Bijlage 2 geeft een toelichting op de indeling, die HGC automatisch uitvoert.

De ruimtelijke verdeling anno 2011 van de hydrochemische facies is weergegeven in bovenaanzicht voor aquiferlaag F in Fig.5.17 en in circumsectie in Fig.5.18. Tabel 5.8 biedt een overzicht van alle waargenomen facies en Fig.5.18 toont een radar plot van de verontreinigingsindex WAPI, die op 10 waterkwaliteitsfacetten is gebaseerd.

De gereduceerde facies (r) komt het vaakst voor (Tabel 5.8) en wel voornamelijk in aquiferlagen E, F en G. De verwante facies rf (gereduceerd en verzoet) bevindt meestal aan de bovenzijde van facies f, in laag E of F. Daarbij duidt de term 'verzoet' niet op verdringing van zouter door zoeter grondwater (zoals meestal in kustaquifers), maar op het doordringen van verhoogde Na, K en/of Mg concentraties in verband met agrarische of stedelijke invloeden (vooral K vanuit mest of rioolwater). Alleen het diepste monster (WP21-95) kent een verzoete facies dankzij verdringing van zouter grondwater. Ook de (sub)oxische variant 'f' komt relatief veel voor, maar ondieper dan rf, namelijk vooral in laag B en aan bovenzijde laag C, en dan voornamelijk onder de keileem (Fig.5.18). Bij elkaar zien we zo een prograde facies keten van boven naar beneden, bestaande uit eerst f, dan rf, dan r en op grote diepte tenslotte opnieuw rf (maar laatstgenoemde door 'echte' verzoeting).

Het diep anoxische milieu (d, df, dp) komt relatief weinig voor, dan altijd in combinatie met pH>6.2 (Tabel 5.8), en in vrijwel alle gevallen dicht bij het Oranjekanaal (WP19 en WP22). Het (sub)oxische milieu (empty, a, af, f en pf) komt duidelijk vaker voor dan het diep anoxische milieu, in de meeste gevallen in combinatie met verzoeting door agrarische of stedelijke invloeden (f).

Verontreinigd grondwater (WAPI > 3) is vooral geassocieerd met agrarische en stedelijke invloeden langs de westrand van de stad Emmen en aan de noordrand van Noordbarger. Dit lijkt in tegenspraak met de kwetsbaarheidskaart van de Provincie Drenthe (Fig.1.2). Het verschil houdt evenwel verband met de definitie van kwetsbaarheid. De hoge *intrinsieke kwetsbaarheid* van het waterwingebied volgens de Provincie is gebaseerd op de kwetsbaarheid van de aquifer door geringe (hydro)geologische bescherming, helemaal los van de belasting / bedreiging aldaar. De verontreinigingsstatus van grondwater ter plaatse kan een ander beeld geven, ten gevolge van een hoge *extrinsieke kwetsbaarheid* (kwetsbaarheid door een hoge belasting / sterke bedreiging).

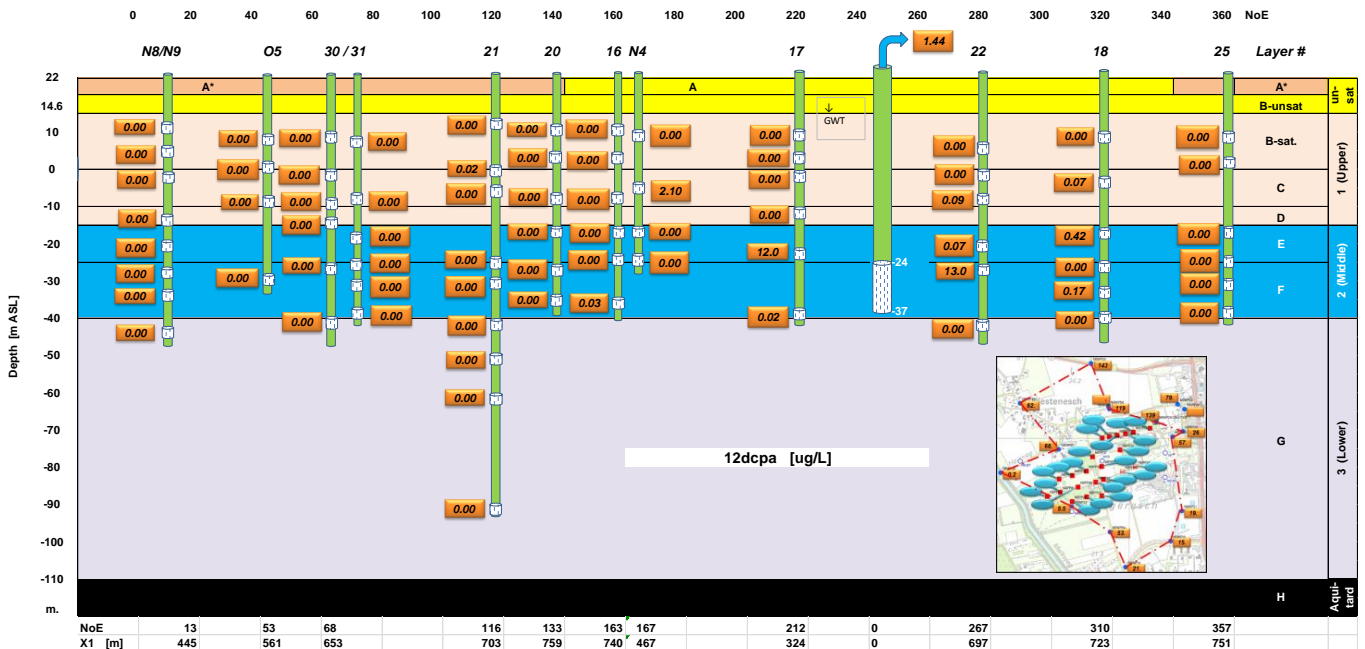


FIG. 5.15. Circumsectie met de ruimtelijke verdeling van de 1,2-dichloorpropan concentratie in 2011. Voor ligging van profiel zie inzet of Fig.4.14. N^oE, X₁ = resp. kompasrichting en afstand tot epicentrum winning. A* = keileem.

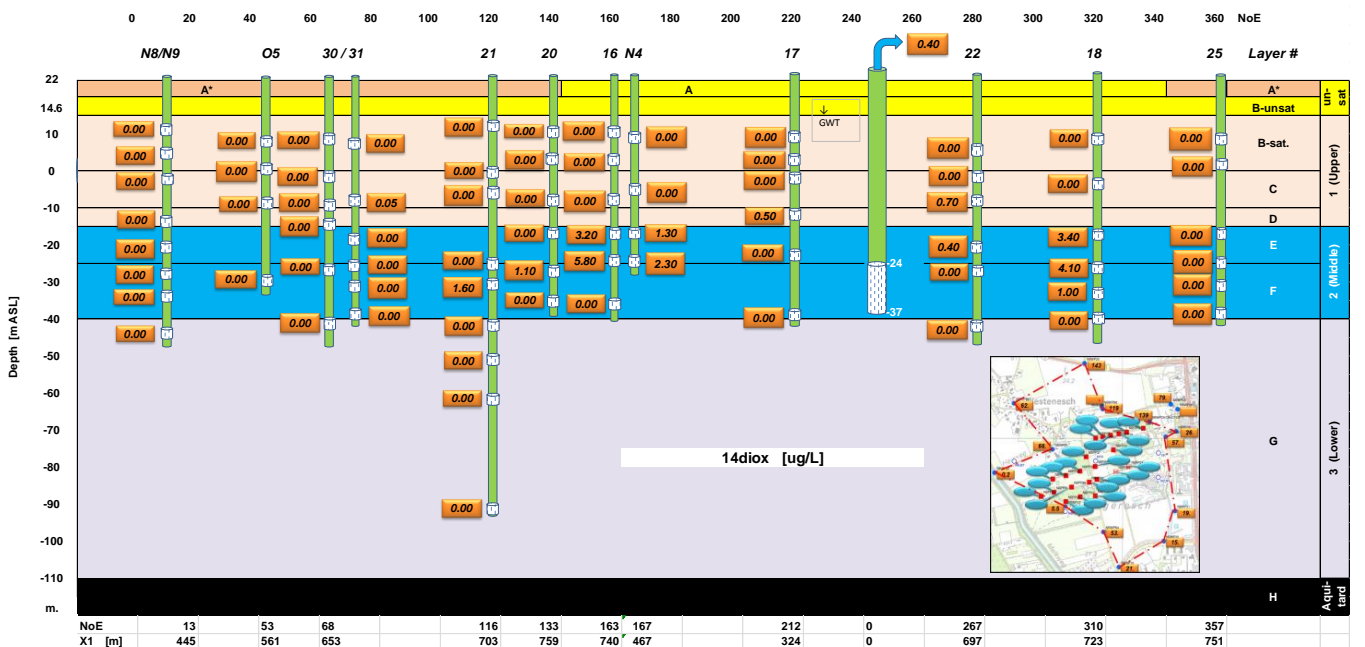


FIG. 5.16. Circumsectie met de ruimtelijke verdeling van de 1,4-dioxaan concentratie in 2011. Voor ligging van profiel zie inzet of Fig.4.14. N^oE, X₁ = resp. kompasrichting en afstand tot epicentrum winning. A* = keileem.

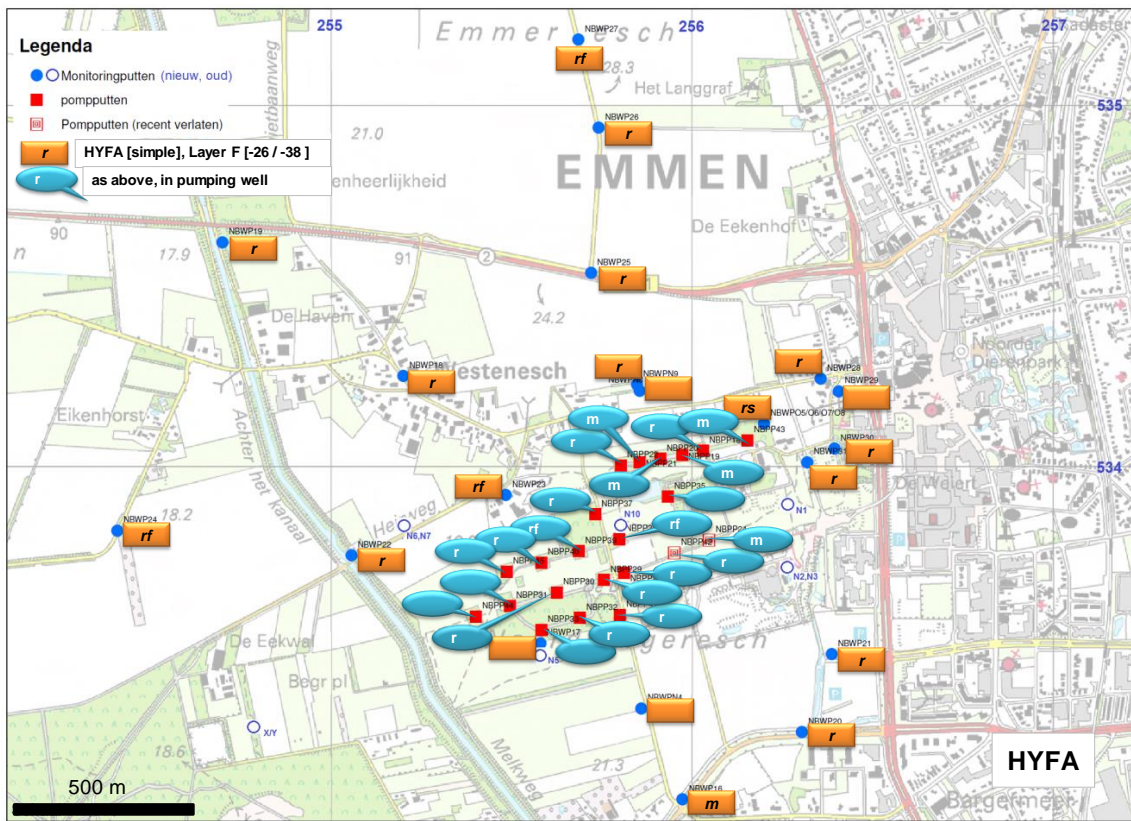


FIG. 5.17. Bovenaanzicht ruimtelijke verdeling van de hydrochemische facies in aquiferlaag F, in 2011.

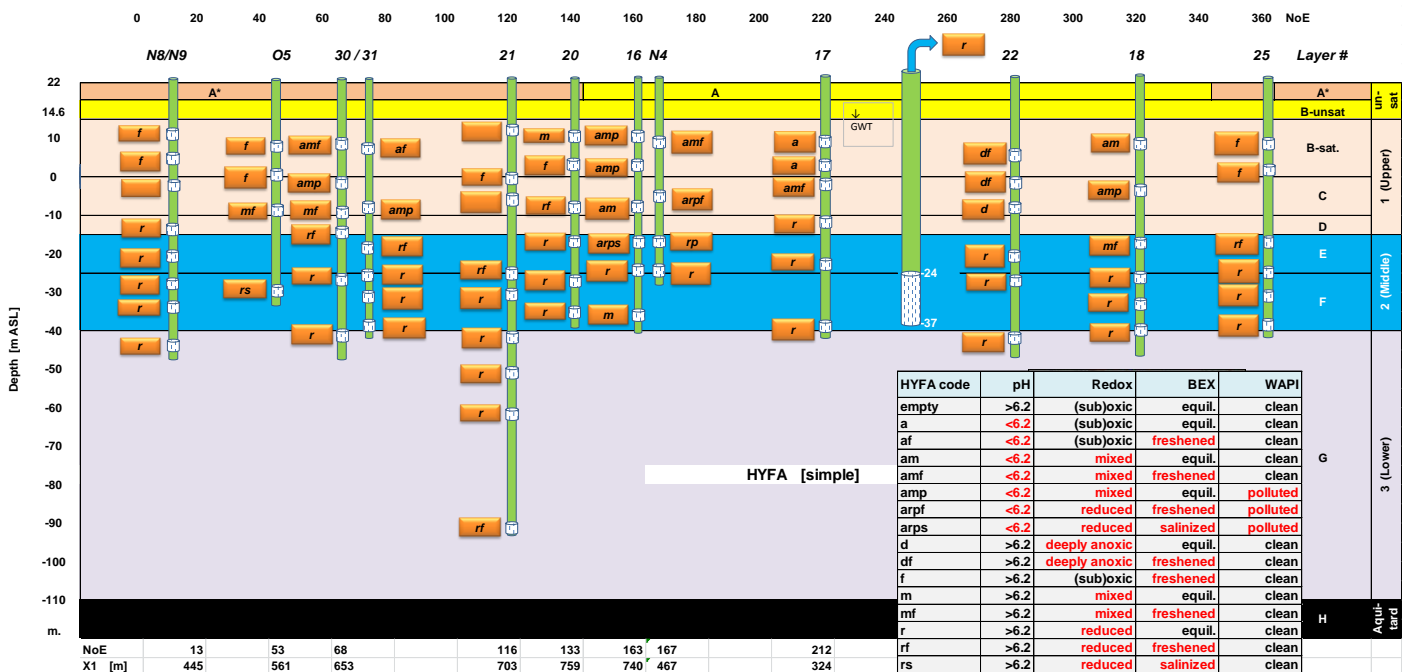


FIG. 5.18. Circumsectie met de ruimtelijke verdeling van de hydrochemische facies in 2011. Voor ligging van profiel zie Fig.4.14, voor Legenda: zie inzet. N°E, X₁ = resp. kompasrichting en afstand tot epicentrum winning. A* = keileem.

TABEL 5.8. Overzicht van waargenomen hydrochemische facies, hun verklaring, aantal monsters en de belangrijkste chemische watertypen, voor de dataset anno 2011 (n=138; waarnemingsputten, pompputten, en ruwwater). Alleen de rood gekleurde facies wordt vermeld/genoemd, omdat de zwarte beschouwd wordt als standaard toestand.

HYFA code	hydrochemical facies parameter				samples		Chemical watertype		
	pH	Redox	BEX	WAPI	n	%	dominant	2nd	3rd
'empty'	>6.2	(sub)oxic	equil.	clean	3	2.2	F2CaNO3o		
a	<6.2	(sub)oxic	equil.	clean	2	1.4	G*CaSO4o		
af	<6.2	(sub)oxic	freshened	clean	2	1.4	F*CaSO4+	g2CaMix+	
am	<6.2	mixed	equil.	clean	3	2.2	F*NaCl		
amf	<6.2	mixed	freshened	clean	7	5.1	g*CaSO4+		
amp	<6.2	mixed	equil.	polluted	3	2.2	B*NaCl	f*CaCl	
ampf	<6.2	mixed	freshened	polluted	2	1.4	F1NaMix+	F*NaSO4+	
amps	<6.2	mixed	salinized	polluted	1	0.7	F*CaCl-		
ar	<6.2	reduced	equil.	clean	2	1.4	g*CaMix		
arpf	<6.2	reduced	freshened	polluted	1	0.7	F*CaSO4+		
ars	<6.2	reduced	salinized	clean	1	0.7	f1CaCl-		
d	>6.2	deeply anoxic	equil.	clean	2	1.4	F1CaMix	F2CaHCO3o	
df	>6.2	deeply anoxic	freshened	clean	3	2.2	F2CaHCO3+	F2NaHCO3+	F1NaHCO3+
dp	>6.2	deeply anoxic	equil.	polluted	1	0.7	F2CaHCO3o		
f	>6.2	(sub)oxic	freshened	clean	10	7.2	F2CaMix+	g3CaHCO3+	
m	>6.2	mixed	equil.	clean	7	5.1	F2CaMix	F1CaMix	
mf	>6.2	mixed	freshened	clean	5	3.6	F2CaHCO3+		
pf	>6.2	(sub)oxic	freshened	polluted	1	0.7	g3CaHCO3+		
r	>6.2	reduced	equil.	clean	61	44.2	F1CaMix	F2CaMix	F2CaHCO3o
rf	>6.2	reduced	freshened	clean	18	13.0	F2CaMix+	F3CaHCO3+	
rp	>6.2	reduced	equil.	polluted	1	0.7	F2CaMix		
rpf	>6.2	reduced	freshened	polluted	1	0.7	F2CaMix+		
rs	>6.2	reduced	salinized	clean	1	0.7	F1CaCl-		
All facies types = 23					138	100	All watertypes = 67		

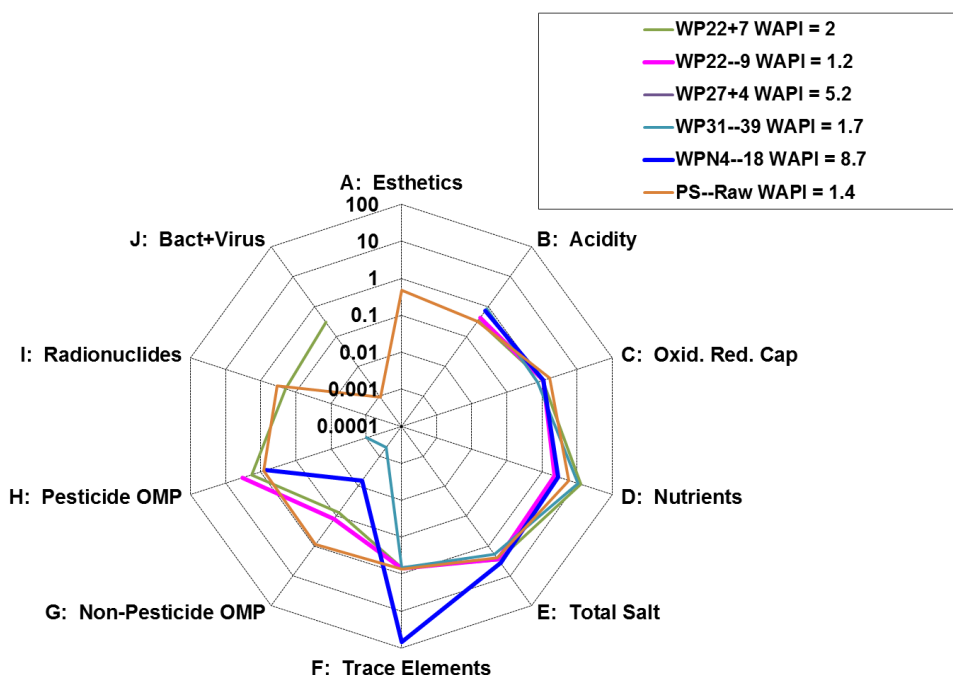


FIG. 5.19. Radar plot van de waterverontreinigings index (WAPI), waarbij 10 waterkwaliteitsaspecten (A-J) genormaliseerd zijn op hetzij drinkwaternormen hetzij natuurlijke achtergrondwaarden. Gridlijnen 0.001 – 100 geven aan het aantal malen dat de de drinkwaternorm of achtergrondconcentratie wordt onder- of overschreden. De overall WAPI score (gemiddelde van A-J) staat voor elk watermonster vermeld in de legenda.

5.6 Kwaliteitsontwikkeling ruwwater

De belangrijkste trendmatige ontwikkelingen in de kwaliteit van het ruwwater zijn weergegeven in Fig.5.20 (hoofdcomponenten) en Fig.5.21 (1,2-dichloorpropan, 1,2,3-trichloorpropan en 1,4-dioxaan). Voor de spore-elementen c.q. zware metalen zijn geen trends aantoonbaar (metingen beschikbaar sedert 1982-1989). Hun concentraties zijn laag en schommelen doorgaans rond de MDL of iets erboven.

In de getoonde trends zitten echter ook de manipulaties van het puttenveld (welke pompputten hoe worden gebruikt). Pas vanaf juni 1999 vindt exploitatie plaats middels cyclops (cyclisch opschakelschema), waarmee dit soort manipulaties uit de bedrijfsvoering zijn verdwenen.

Uit Fig.5.20 volgt niettemin een zeer duidelijke trend voor Cl en SO₄, die allebei toenemen met de tijd, ongeveer met resp. 0.2 mg Cl/L/jaar en 0.6 mg SO₄/L/jaar. Aanvankelijk minder duidelijk maar later (sinds 1974) wel duidelijk aanwezig, is de toename voor Ca en HCO₃, en sinds 1957 de toename van Fe. NO₃ vertoont geen duidelijke trend, hoewel de data vóór 1980 NO₃ = 0 uitwijzen en die erna variaties vertonen tussen 0.1 en 1.5 mg/L (Fig.6.7).

Een belangrijke vraag hierbij is, in hoeverre genoemde toenames het gevolg zijn van enerzijds de in de periode 1900-1970 toegenomen atmosferische depositie van zure en verzurende stoffen (waaronder SO₂, NO_x en NH_v), en anderzijds de toegenomen bemesting voor de landbouw.

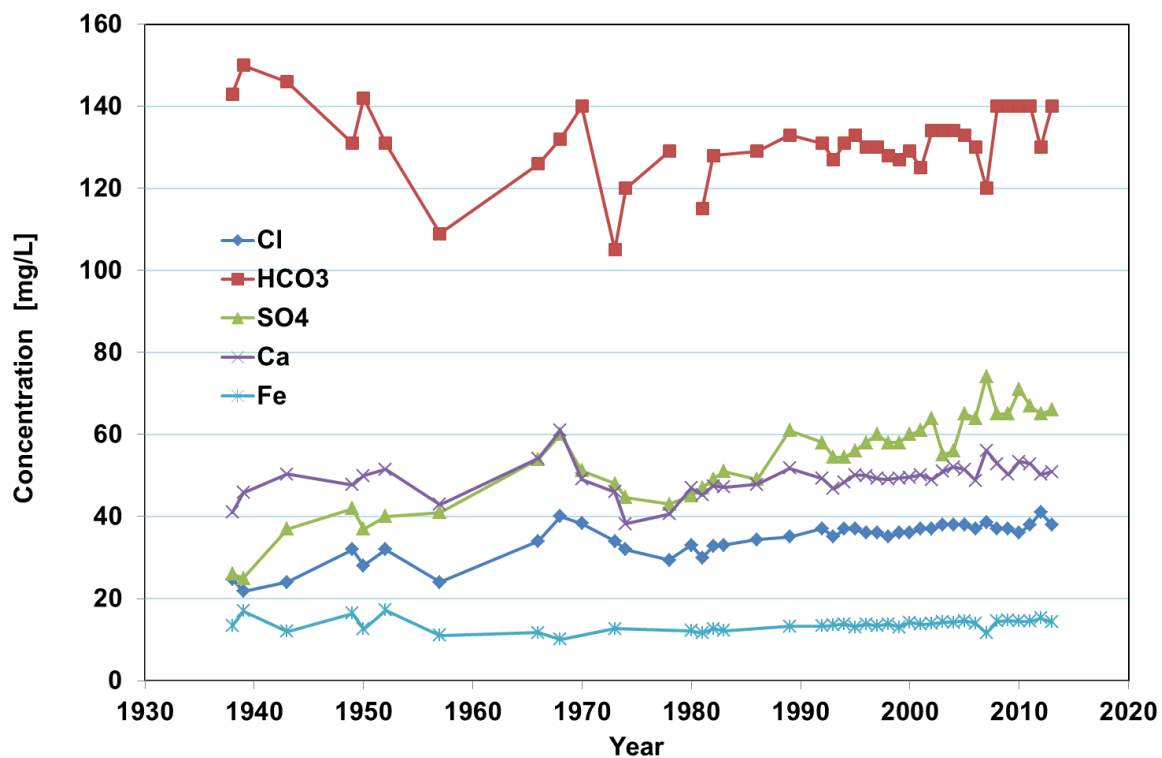


FIG. 5.20. Verloop van de Cl, HCO₃, SO₄, Ca en Fe concentratie in het ruwwater van puttenveld Noordbargeres, in de periode 1939-2013. Gebaseerd op data van KIDAP, REWAB en WLN.

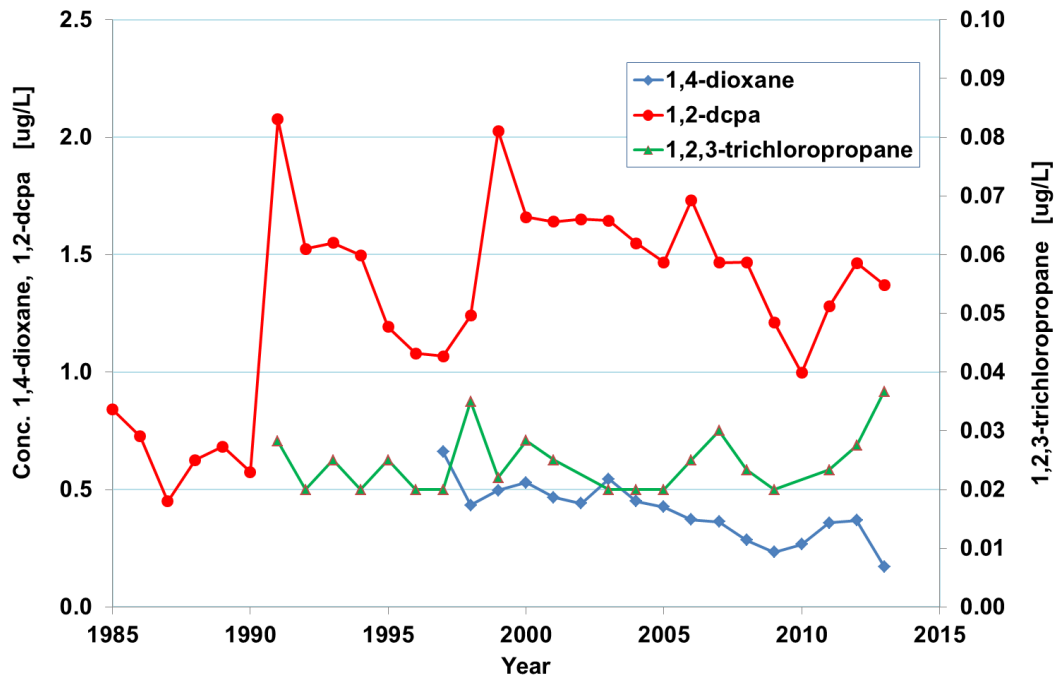


FIG. 5.21. Verloop van de 1,2-dichloorpropaan en 1,4-dioxaan concentratie in het ruwwater van puttenveld Noordbargeres, in de periode 1985-2013. Gebaseerd op data van WLN.

Voor SO_4 bestaat de mogelijkheid dit verschil in bijdrages te destilleren uit de ^{34}S metingen van 2010, volgens onderstaande massabalans:

$$(C_{\text{SO}_4})_{\text{RUW}} \delta^{34}\text{S}_{\text{RUW}} = (C_{\text{SO}_4})_{\text{INPUT}} \delta^{34}\text{S}_{\text{INPUT}} + (C_{\text{SO}_4})_{\text{FeS}_2} \delta^{34}\text{S}_{\text{FeS}_2} \quad (5.3)$$

waarin: $(C_{\text{SO}_4})_{\text{RUW}}$, $(C_{\text{SO}_4})_{\text{INPUT}}$, $(C_{\text{SO}_4})_{\text{FeS}_2}$ = SO_4 concentratie in ruwwater [mg/L]; $\delta^{34}\text{S}_{\text{RUW}}$, $\delta^{34}\text{S}_{\text{INPUT}}$, $\delta^{34}\text{S}_{\text{FeS}_2}$ = ^{34}S in SO_4 (‰), resp. in ruwwater, ondiep grondwater zonder pyrietoxidatie en water waarin SO_4 stamt van pyrietoxidatie.

Uit de meetgegevens van 2010 in Fig.5.22 zijn voor ondiep grondwater zonder pyrietoxidatie 4 nitraathoudende monsters genomen met gemiddeld 47.9 mg/L SO_4 (na een kleine correctie voor atmosferisch zeezout = $\text{SO}_4 - 0.14 \text{ Cl}$) en $\delta^{34}\text{S} = +6$ ‰, en is voor 5 nitraatloze monsters met een duidelijke SO_4 -toename de $\delta^{34}\text{S}_{\text{FeS}_2}$ berekend op -10 à -29‰. Toepassing van Eq.5.3 op het ruwwater in 2008 toen ^{34}S daarin werd gemeten, levert de volgende vergelijking op: $70.2 \times -2.7 = 47.9 \times 6 + (70.2 - 47.9) \delta^{34}\text{S}_{\text{FeS}_2}$. Daaruit volgt een $\delta^{34}\text{S}_{\text{FeS}_2}$ waarde van -22, die goed past binnen de range van -10 à -29‰. Het percentage SO_4 (gecorrigeerd voor zeezout) in ruwwater dat stamt van pyrietoxidatie is derhalve $100 \times (70.2 - 47.9) / 70.2 = 32\%$, zodat het atmosferische + landbouwaandeel 68% bedraagt.

Uit Fig.5.21 volgt dat er geen eenduidige trends zijn, behalve de daling voor 1,2-dcpc sinds 1999 en voor 1,4-dioxaan sinds 1997. Hun verloop wordt in breder verband bekeken in § 6.1.

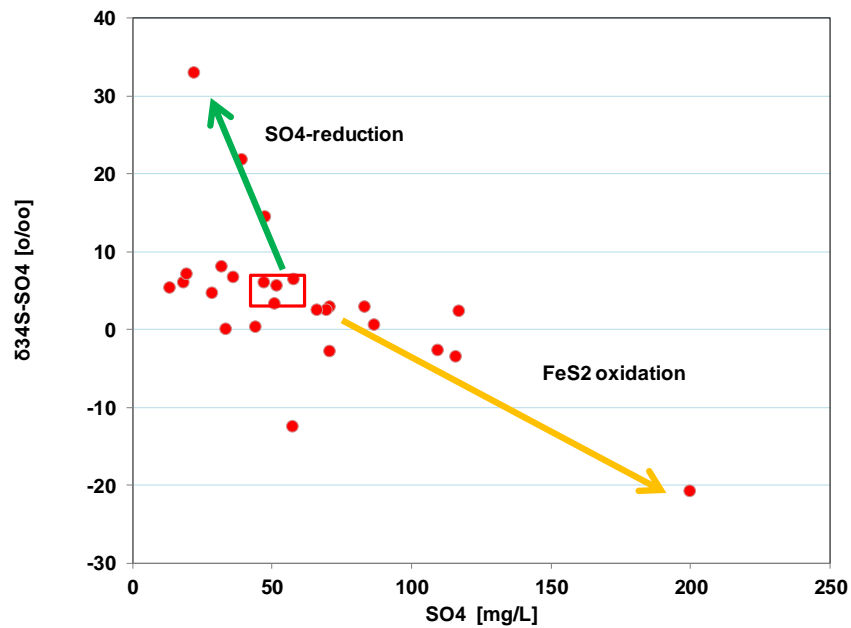


FIG. 5.22. Plot van SO_4 gecorrigeerd voor zeezout ($=SO_4 - 0.14Cl$) tegen het zware, stabiele zwavelisotoop gehalte van SO_4 ($\delta^{34}S$), voor de meetgegevens van 2010. Sulfaatreductie leidt tot een sterke toename van ^{34}S voor het resterende SO_4 , en pyrietoxidatie produceert daarentegen SO_4 dat verarmd is aan ^{34}S .

Voor belangrijke conclusies en aanbevelingen m.b.t. de monitoring → § 7.3.

6 Modelling met chemische massabalansen en analytische transportvergelijkingen

6.1 Kwantificering en identificatie van bodemreacties via chemische massabalansen

6.1.1 Principe van REACTIONS+

Met een chemische massabalans kunnen we de aard en omvang van alle relevante hydrogeochemische reacties identificeren en kwantificeren van regenwater tot grondwater, infiltrerend oppervlaktewater tot oeverfiltraat, of grondwater tijdens zijn verplaatsing in de ondergrond. Dit gebeurt door voor alle betrokken waterkwaliteitsparameters de massaoverdracht te berekenen, die nodig is om de gemeten gemiddelde input (b.v. ondiep grondwater) te veranderen in de output (b.v. zoals gemeten in een pompput). Als de output niet alleen bestaat uit de input na zekere bodempassage, maar tevens uit bijgemengd grondwater van andere herkomst, dan kan daarvoor gecorrigeerd worden via het zogenaamde ont mengen van 2 eindleden.

Reactions+ (afgekort R+) een Excel-programma ontwikkeld en nader beschreven door Stuyfzand (2011), is een relatief eenvoudig programma om de massabalans te bepalen. Het bestaat uit de invoer van de kwaliteitsparameters van de input, eventueel bijgemengd grondwater en de output (Fig.6.1). Vervolgens gaat bijna alles vanzelf; bijna, want het kan noodzakelijk zijn om diverse default settings te veranderen totdat een correcte overall balans wordt verkregen. Dit wordt bereikt als de berekende output (calculated sum) de voor bijmenging gecorrigeerde output (unmixed output) voldoende benadert. Essentieel is dat de berekende calibratietermen CO_2 , HCO_3 en pH dan goed overeenkomen met de gecorrigeerde output.

In R+ zijn 46 reacties voorgeprogrammeerd (Tabel 6.1), waarvan het gros eenvoudig op nonactief kan worden gesteld. In een separaat maar gekoppeld Excel sheet (Fig.6.2) wordt vervolgens berekend hoe snel reactieve bodembestanddelen zoals kalk, pyriet en organische stof uitlogen, en hoe lang het duurt eer deze opgesoupeerd zijn. Dat vergt natuurlijk wel de input van enkele systeemp parameters en de initiële gehalten aan bij de reacties betrokken bodembestanddelen.

6.1.2 Toepassing op ruwwater Noordbargeres

Met R+ is de gemiddelde massabalans bepaald met ruwwater van Noordbargeres anno 2011 als output (PS-Raw in Tabel 5.5), met 50% diep, natuurlijk grondwater als bijmengsel (type N in Tabel 5.5) en met gemiddeld ondiep grondwater anno 2011 in aquiferlaag B binnen het intrekgebied als input. De gemiddelde kwaliteit van het ondiepe grondwater is bepaald door te nemen 74% agrarisch beïnvloed water (type A in Tabel 5.5), 20% stedelijk beïnvloed water (type U in Tabel 5.5) en 6% geïnfiltrerd oppervlaktewater voornamelijk uit het Oranjekanaal (type C en Ac uit Tabel 5.5). Deze percentages kwamen naar voren in § 5.4, maar moesten met 2 vermenigvuldigd worden om samen 100% aan niet-natuurlijk grondwater te vormen. Met genoemde input en output wordt derhalve berekend wat er vooral gebeurt in bodemlagen C en D, en in mindere mate in lagen E en F.

TABEL 6.1. Overzicht van de 46 voorgeprogrammeerde reacties in REACTIONS+, waarvan de voor Noordbargeres relevante reacties gemarkeerd zijn met 'yes'.

	Proces	Reaction equation or elements involved	No.	Note	here
Initial	Evapoconcentration	All dissolved ions, gases excluded	1	A	no
	Atmospheric gases	+ SO ₂ + NO _x + NH ₃ + HF + HCl	2	B	no
	Unsat zone + Convection	+ O ₂ + CO ₂ - CH ₄ , (Cl-out - Cl-in)	3	C	yes
	Filtration suspended matter	Silt-bound elements like Al, Fe, Mn,	4		no
	Nitrification	2O ₂ + NH ₄ ⁺ + 2HCO ₃ ⁻ → NO ₃ ⁻ + 2 CO ₂ + 3H ₂ O	5		yes
	Storage in biomass	NO ₃ ⁻ , NH ₄ ⁺ , PO ₄ ³⁻ , SO ₄ ²⁻ , Mn ²⁺ , K ⁺ , Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , SiO ₂ , -H ⁺ , -DOC	6	D	no
Redox 1	DOC oxidation	0.5O ₂ + 0.4NO ₃ ⁻ + CH ₂ O-DOC → 0.6CO ₂ + 0.4HCO ₃ ⁻ + 0.2N ₂ + 0.8H ₂ O	7	E	yes
	O2 oxidizing FeS2	3.75 O ₂ + FeS ₂ + 4 HCO ₃ ⁻ → Fe(OH) ₃ + 2 SO ₄ ²⁻ + 4 CO ₂ + 0.5 H ₂ O	8	F	yes
	NO3 oxidizing FeS2	2.8 NO ₃ ⁻ + FeS ₂ + 0.8 CO ₂ + 0.4 H ₂ O → Fe ²⁺ + 2 SO ₄ ²⁻ + 0.8 HCO ₃ ⁻ + 1.4 N ₂	9	F	yes
	O2 oxidizing FeCO3	O ₂ + 4FeCO ₃ + 6H ₂ O → 4Fe(OH) ₃ + 4CO ₂	10	G	no
	O2-reduction	O ₂ + CH ₂ O → CO ₂ + H ₂ O	11		no
	NO3-reduction	4NO ₃ ⁻ + 5CH ₂ O → 2N ₂ + CO ₂ + 4HCO ₃ ⁻ + 3H ₂ O	12		yes
	MnO2-reduction	MnO ₂ + 0.5CH ₂ O + 1.5CO ₂ + 0.5H ₂ O → Mn ²⁺ + 2HCO ₃ ⁻	13		yes
	Fe(OH)3 reduction	Fe(OH) ₃ + 0.25CH ₂ O + 1.75CO ₂ → Fe ²⁺ + 2HCO ₃ ⁻ + 0.75H ₂ O	14	H, i	yes
	SO4-reduction (FeS2)	2SO ₄ ²⁻ + 3.5CH ₂ O + Fe ²⁺ → FeS ₂ + 2HCO ₃ ⁻ + 1.5CO ₂ + 2.5H ₂ O	15	i	no
	SO4-reduction (no Fe)	SO ₄ ²⁻ + 2 CH ₂ O → HS ⁻ + HCO ₃ ⁻ + CO ₂ + H ₂ O	16	i	no
Dissolution	CH4-formation	CO ₂ + 2CH ₂ O → CH ₄ + 2CO ₂	17	i	no
	Gibbsite	Al(OH) ₃ + 3 H ⁺ ↔ Al ³⁺ + 3 H ₂ O	18		no
	Ferrihydrite	Fe(OH) ₃ + 3 H ⁺ ↔ Fe ³⁺ + 3 H ₂ O	19		no
	Calcite or aragonite	CaCO ₃ + CO ₂ + H ₂ O ↔ Ca ²⁺ + 2HCO ₃ ⁻	20	J	yes
	Dolomite	CaMg(CO ₃) ₂ + 2CO ₂ + 2H ₂ O ↔ Ca ₂ ⁺ + Mg ²⁺ + 4HCO ₃ ⁻	21	J	no
	Siderite	Fe _x Mn _{1-x} CO ₃ + CO ₂ + H ₂ O ↔ x Fe ²⁺ + (1-x) Mn ²⁺ + 2 HCO ₃ ⁻	22	G	no
	Vivianite	Fe ₃ (PO ₄) ₂ ·8H ₂ O + 4 CO ₂ ↔ 3 Fe ²⁺ + 2 H ₂ PO ₄ ⁻ + 4 HCO ₃ ⁻ + 4 H ₂ O	23		no
	Apatite	Ca ₅ (PO ₄) ₃ OH + 7CO ₂ + 6 H ₂ O ↔ 5 Ca ²⁺ + 3 H ₂ PO ₄ ⁻ + 7HCO ₃ ⁻	24		no
	Barite	BaSO ₄ ↔ Ba ²⁺ + SO ₄ ²⁻	25		no
	Gypsum	CaSO ₄ ·2H ₂ O ↔ Ca ²⁺ + SO ₄ ²⁻	26	K	no
	Halite	NaCl ↔ Na + Cl	27		no
	Anorthite	CaAl ₂ Si ₂ O ₈ + 2H ⁺ + 6 H ₂ O → Ca ²⁺ + 2 H ₄ SiO ₄ + 2 Al(OH) ₃	28		no
	Orthoclase	KAlSi ₃ O ₈ + H ⁺ + 7 H ₂ O → K ⁺ + 3 H ₄ SiO ₄ + Al(OH) ₃	29		no
	Illite	K _{0.6} Mg _{0.25} Al _{2.3} Si _{3.5} O ₁₀ (OH) ₂ + 1.1 H ⁺ + 8.9 H ₂ O → 0.6 K ⁺ + 0.25 Mg ²⁺ + 3.5 H ₄ SiO ₄ + 2.3 Al(OH) ₃	30		no
	Olivine	MgFeSiO ₄ + 4H ⁺ → H ₄ SiO ₄ + Mg ²⁺ + Fe ²⁺	31		no
	Biotite	Mg ₂ FeKAlSi ₃ O ₁₂ H ₂ + 7H ⁺ + 3H ₂ O → Al(OH) ₃ + 3H ₄ SiO ₄ + 2Mg ²⁺ + Fe ²⁺ + K ⁺	32		no
	Albite	NaAlSi ₃ O ₈ + H ⁺ + 7 H ₂ O → Na ⁺ + 3 H ₄ SiO ₄ + Al(OH) ₃	33		no
	Quartz or opal	SiO ₂ + 2 H ₂ O ↔ H ₄ SiO ₄	34		yes
Exch + transf.	Internal acid buffering	HCO ₃ ⁻ + H ⁺ ↔ H ₂ O + CO ₂	35		yes
	Uncharged species sorption	DOC, H ₄ SiO ₄ , H ₃ BO ₃ , As(OH) ₃ (any combination)	36		yes
	Cation exchange	Na ⁺ , K ⁺ , Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , NH ₄ ⁺ , Fe ²⁺ , Mn ²⁺ , H ⁺ , Al ³⁺ , TEs (any combination)	37		yes
	Anion Exchange	SO ₄ ²⁻ , HCO ₃ ⁻ , PO ₄ ³⁻ , OH ⁻ , F ⁻ , CrO ₄ ²⁻ (any combination)	38		yes
Redox 2	Transformation kaolinite	H ₄ SiO ₄ + 0.2 Na ⁺ + 0.2 Mg ²⁺ + 0.6 HCO ₃ ⁻ + 0.3 Al ₂ Si ₂ O ₅ (OH) ₄ ↔ 0.6 CO ₂ + 0.4 Na _{0.5} Al _{1.5} Mg _{0.5} Si ₄ O ₁₀ (OH) ₂ + 2.5 H ₂ O	39		no
	Hornblende oxidation + dissolution	7 Ca ₃ NaMg ₃ Fe ^{II} ₃ Al ₂ Fe ^{III} (Si ₄ O ₁₁) ₄ (OH) ₄ + 103 H ⁺ + 5.25 O ₂ + 169.5 H ₂ O → 21 Ca ²⁺ + 7 Na ⁺ + 20 Mg ²⁺ + 28 Fe(OH) ₃ + 90 H ₄ SiO ₄ + 6 Mg _{0.167} Al _{2.33} Si _{3.67} O ₁₀ (OH) ₂	40		no
	CH4 oxidation by Fe(OH)3	CH ₄ + 8 Fe(OH) ₃ + 15 CO ₂ → 8 Fe ²⁺ + 16 HCO ₃ ⁻ + 6 H ₂ O	41		no
	SO4 reduction by CH4	CH ₄ + SO ₄ ²⁻ + Fe ²⁺ + (n-2) H ₂ O → FeS·nH ₂ O + CO ₂	42	L	no
	H2S oxidation by Fe(OH)3	H ₂ S + 8 Fe(OH) ₃ + 14 CO ₂ → 8 Fe ²⁺ + SO ₄ ²⁻ + 14 HCO ₃ ⁻ + 6 H ₂ O	43		no
	MnO2 reduction by Fe2+	MnO ₂ + 2 Fe ²⁺ + 2 HCO ₃ ⁻ + 2 H ₂ O → 2 Fe(OH) ₃ + Mn ²⁺ + 2 CO ₂	44		no
	Fe2+ oxidation by O2	Fe ²⁺ + 0.25 O ₂ + 2 HCO ₃ ⁻ + 0.5 H ₂ O → Fe(OH) ₃ + 2 CO ₂	45	L	no
	Fe2+ oxidation by NO3	Fe ²⁺ + 0.2 NO ₃ ⁻ + 1.8 HCO ₃ ⁻ + 0.6 H ₂ O → Fe(OH) ₃ + 0.1 N ₂ + 1.8 CO ₂	46		no
	Mn2+ oxidation by O2	Mn ²⁺ + 0.5 O ₂ + 2 HCO ₃ ⁻ → MnO ₂ + 2 CO ₂	47	L	no

A = concentration by evapo(transpiration), to be defined in cell D3

B = dry deposition of acidifying strong acids, as depending regional input strength to be scaled in cell AD3

C = In unsaturated zone, additional O2 and CO2 input, or CH4 output. And matching of Cl-input to Cl-output incl. associated salts via Cl-regression.

D = Storage in biomass as function on vegetation type to specify in cell Y3; E = DOC oxidation, set at 50% by O2 and 50% by NO3. May need adaptation.

F = pyrite composition regarding As, Co, Ni and Zn specified in V62:AG68; G = siderite composition specified in V62:AG68

H = ferrihydrite (HFO) composition specified in V62:AG68; i = SOM (CH2O) composition including NH4 and PO4 according to Redfield equation

J = calcite composition specified in V62:AG68; K = gypsum composition specified in V62:AG68; L = often associated with mixing in wells or spring

Daarmee wordt overgeslagen wat er allemaal hydrochemisch gebeurt tussen hemel (atmosferische depositie) en bovenzijde van laag B.

Het resultaat van de massabalans staat in Fig.6.1, en de daaruit afgeleide uitloging van de aquifer t.a.v. reactieve bodembestanddelen staat in Fig.6.2.

In Fig.6.1 zien we of concluderen hieruit het volgende:

- Het ruwwater is verondersteld te bestaan uit 50% ondiep, menselijk beïnvloed grondwater (waarvan 74% agrarisch beïnvloed, 20% stedelijk beïnvloed en 6% geïnfiltreerd Oranjekanaalwater) uit laag B, en 50% diep natuurlijk grondwater. De samenstelling van deze 3 watersoorten staat in Fig.6.1 op resp. regels 7, 57 en 59.
- Door optredende seizoensfluctuaties en reistijden wijkt de output qua zoutgehalten iets af van de input, hetgeen automatisch gecorrigeerd is met 0,26 mmol Cl/L en aan Cl gerelateerd SO₄, Na, K, Ca en Mg volgens de voor regen- en zeewater geldende correlaties met Cl. Deze correctie wordt aangeduid als ‘Convective transport’.
- De samenstelling van het ruwwater laat zich vervolgens verklaren door bij de input (vanuit laag B) de term convective transport op te tellen en de volgende massaoverdracht in mmol/L: 0,56 C-Exch + 0,41 BOM + 0,34 FeS₂ + 0,007 A-Exch + 0,001 MnO₂ - 0,03 Fe(OH)₃ - 0,11 (NH₄ + DOC) - 0,108 SiO₂. De positieve getallen betekenen dat deze fasen uit de bodem verdwenen zijn (uitgeleegd) en toegevoegd aan het water, en de negatieve dat zij in de bodem zijn geaccumuleerd (Fe(OH)₃ en SiO₂) of afgebroken (NH₄ en DOC) en dus verdwenen uit de waterfase.
- Kationuitwisseling (C-Exch) is kwantitatief de belangrijkste reactie, gevolgd door de oxidatie van BOM (Bulk Organische Stof) en oxidatie van pyriet (FeS₂).
- De oxidatie van pyriet in de aquifer zorgt voor significante toenames van As, Co, Ni en Zn, maar deze toenames worden weer teniet gedaan door sorptie. Vooral de Ni toenames zijn inderdaad waargenomen in lagen C-E (Fig.5.14).

R+		Input = mean quality from layer B 2011; Output = raw 2011; Admix = natural deep 2011																													
FE = Evapo-concentr. Factor		1 1.2 = FE Max = Cl-Out/Cl-In														Unsaturation zone? 1 = Yes, 0 = No															
B		Vegetation type? 1 = bare, 10 = wet pines														Atm. dep. factor															
Reactions		AA AB AC AD AE AF AG																													
		Oxidants						Acid						Reductants						Other main constituents & parameters						Trace elements					
		O2	NO3	SO4	CO2	CH4	H2S	NH4	Fe	Mn	DOC	Cl	HCO3	PO4	Na	K	Ca	Mg	SiO2	Temp	pH/H	Al	As	Ba	Co	Cr	F	Ni	Sr	Zn	
6	Input (mg/L)	6.9	71.7	47.5	81.5	0.00	0	0.24	0.47	0.14	3.21	51.8	152	0.289	32.9	8.74	76	8.5	16.9	11.2	6.54	0	0.001	0.002	0.002	0.001	0.050	0.004	0.021	0.088	
8	uncorrected (mmol/L)	0.216	1.16	0.49	1.9	0	0	0.013	0.008	0.002	0.268	1.460	2.492	0.003	1.431	0.224	1.897	0.348	0.281	11.2	0.00	0.011	0.000	0.000	0.000	0.003	0.000	0.000	0.001		
9	corrected (mmol/L)	0.216	1.17	0.50	1.851	0	0	0.01	0.008	0.002	0.27	1.47	2.51	0.003	1.42	0.22	1.88	0.35	0.281	11.2	0.00	1.E-02	2.E-05	1.E-05	3.E-05	2.E-05	3.E-03	6.E-05	2.E-04	1.E-03	
11	Unsat zone + Convection	0.03			0.01	0.00	0				0.06	0.26			0.22	0.00	0.00	0.03													
13	Nitrification	-0.03	0.01		0.03			-0.01																							
15	DOC oxidation	-0.10	0.00		0.1						-0.10																				
16	O2 oxidizing FeS2			0.064	0.128																										
17	NO3 oxidizing FeS2	-0.120		0.61	-0.24			0.30																							
20	NO3-reduction by SOM				0.08																										
21	MnO2-reduction by SOM							0.00			0.004																				
22	Fe(OH)3 reduction by SOM				-0.01			0.00			0.000																				
28	CaCO3				0			0.00			0.000																				
41	SiO2																														
42	HCO3 + H ↔ H2O + CO2				0.00																										
43	Uncharged species exchange										0.06																				
44	Cation exchange							0.01	-0.07	0.00																					
45	Anion Exchange																														
54	Calculated Sum [mmol/L]	0.00	0.01	1.184	1.94	0.003	0.000	0.01	0.246	0.006	0.23	1.73	2.93	-0.002	1.25	0.14	2.11	0.44	0.17	11.20	6.59	0.0000	5.E-06	1.E-04	8.E-06	2.E-06	0.0068	-2.E-06	0.0015	1.E-04	
55	Unmixed output [mmol/L]	0.00	0.01	1.184	1.81	0.003	0.00	0.01	0.246	0.006	0.23	1.73	2.88	0.00	1.25	0.14	2.11	0.44	0.17	10.50	6.62	0.0000	5.E-06	1.E-04	8.E-06	2.E-06	0.0068	-2.E-06	0.0015	1.E-04	
56	Corrected admix [mmol/L]	0	0	0.198	0.54	0.002	0	0.01	0.289	0.012	0.14	0.45	1.57	0.013	0.50	0.07	0.52	0.118	0.37	10.3	0.00	2.E-04	3.E-05	1.E-04	8.E-06	1.E-05	5.E-03	1.E-05	0.0013	5.E-05	
57	Admixed groundwater [mg/L]	0	0	18.8	23.4	0.036	0	0.27	16.29	0.69	1.7	15.8	95	1.2	11.6	2.8	20.9	2.9	22.4	10.3	6.90	0.0050	0.002	0.0190	0.0005	0.0005	0.0900	0.0007	0.111	0.0030	
58	Corrected output [mmol/L]	0	0.003	0.69	1.17	0.003	0	0.01	0.268	0.009	0.18	1.09	2.23	0.007	0.87	0.10	1.31	0.28	0.27	10.4	2E-04	1.E-04	2.E-05	1.E-04	8.E-06	6.E-06	6.E-03	5.E-06	1.E-03	8.E-05	
59	Measured Output [mg/L]	0	0.2	66.4	51.6	0.04	0.00	0.24	14.94	0.52	2.2	38.7	136	0.68	20.1	4.1	52.5	6.8	16.4	10.4	6.7	0.003	0.0012	0.017	0.0005	0.0003	0.11	0.0003	0.123	0.005	
60	Cl regression input: choose 1-5 from B63:B67																														
61		ΔX/ΔCl mol-basis																													
62	Option to select on row 60	SO4	Na	K	Ca	Mg																									
63	Ocean water (SMOW)	0.052	0.858	0.019	0.019	0.097																									
64	Rhine River	0.110	0.832	0.030	0.156	0.032																									
65	Meuse River																														
66	Haringvliet	0.074	0.842	0.019	0.095	0.060																									
67	Towards brackish groundwater																														
68																															
69	Fraction admixed and infiltrated																														
70	if L67=1 (forced admix), take	0.5																													
71	unforced admixing	0.5																													
72	Fraction of input water	0.500																													
73																															

FIG. 6.1. Screen dump van het hoofdgedeelte van massabalans programma REACTIONS+ (in Excel spreadsheet) voor de transformatie van ondiep grondwater in aquiferlaag B binnen het intrekgebied, tot ruwwater zoals onttrokken in 2011 door puttenveld Noordbargeres. Alleen de 14 relevante reactievergelijkingen (van de in totaal 46) zijn getoond. SOM = Soil Organic Material.

6.2 Kwantificering van bodemuitloging via chemische massabalansen

Met de berekende oplossing of afzetting van mineralen, samen met de omvang van sorptie, valt de snelheid van uitloging van of ophoping in de doorstroomde aquifer vrij eenvoudig te berekenen. Daartoe zijn de volgende systeemp parameters ingevuld in Fig.6.2 (tussen haakjes de cel-referentie) of algemeen aangenomen: (i) de reacties vinden vooral plaats in de verticaal doorspoelde aquiferlagen C en D, samen ca. 25 m dik (BC82); (ii) daarin overheerst verticale parallelle stroming; (iii) de reistijd in deze 2 lagen bedraagt gemiddeld 10 jaar (BB82); en (iv) de periode van sterk beïnvloede grondwaterkwaliteit in laag B beslaat 1950-2011 (start t/m datum bemonstering; BG82:BH82).

Uit Fig.6.2 wordt het volgende afgeleid m.b.t. de uitloging van het 'gemiddelde' lagenpakket C+D:

- Bulk organisch materiaal (BOM, ook CH₂O genaamd; BB86) loogt waarschijnlijk het snelste uit (11 m in 61 jaar; BB96). Hierbij is aangenomen dat 67% van BOM inert is en 33% reactief. BOM loogt dus 2x sneller uit dan pyriet.
- Het kationuitwisselcomplex (CEC; BA86) loogt na BOM het snelste uit (9 m in 61 jaar; BA96). Dit betekent o.a. dat relatief hoge K concentraties in laag B nog >100 jaar zullen worden opgehouden in lagen C+D dankzij kationuitwisseling. Deze kationuitwisseling (ook van Na en Mg) zorgt daarbij voor verhoogde Ca concentraties die dus zouden moeten afnemen na ca. 1 eeuw (of eerder indien Na zoals gewoonlijk eerder uitloogt).
- Pyriet (BF86) loogt minder snel uit dan BOM en de CEC, maar toch redelijk snel (6 m in 61 jaar; BF96). Belangrijke consequentie kan zijn, dat het aandeel van BOM in de denitrificatie in lagen C+D met de tijd afneemt en dat het aandeel pyrietoxidatie dan stijgt.
- Kalk in aquiferlaag D loogt uitermate traag uit, vooral vanwege opharding in de bovenliggende keileem (die a.h.w. de zuurschokken opvangt in een deel van het intrekgebied), en discontinue aanwezigheid van kalk in D. Waar geen keileem aanwezig is, zal kalkuitloging uit laag D wel sneller plaatsvinden. Kwantificering hiervan vergt het opstellen van 2 gescheiden massabalansen.

In bovenstaande gaat het om gemiddelde uitloogsnelheden, zodat het waarschijnlijk is dat in minder fijnzandige / minder reactieve onderdelen van het lagencomplex C+D de uitloging t.a.v. BOM, CEC en pyriet reeds voltooid is. Ook laag E bevat redelijk veel FeS₂, BOM en kalk, maar de reistijden hierin zijn veel korter langs subhorizontale stroombanen.

Voor belangrijke conclusies en aanbevelingen m.b.t. de monitoring → § 7.4.

76	AZ	BA	BB	BC	BD	BE	BF	BG	BH	BI
77	Yellow cells: fill in			White cells = formulas or text			Turquoise cells = tekst			
78	GFW minerals		30.026	100.089	184.411	115.856	119.975	106.869	86.937	60.085
79										
80	Hydrogeology of MAR system									
81	Parameter	t50 [d]	distance [m]	por	density [kg/L]	fG→L	Start	Survey date	Flow type \$	
82	Value	3650	25	0.36	2.65	4.71	1950	2011		1
83										
84	Leaching rate [mmol/L] as calculated via Reactions+									
85	Mineral / solid phase	CEC	CH ₂ O	CaCO ₃	CaMg(CO ₃) ₂	FeCO ₃	FeS ₂	Fe(OH) ₃	MnO ₂	SiO ₂
86	Dissolved (output R+) #	4.73	0.41	0.0	0.0	0.0	0.34	-0.03	0.004	-0.108
87	# = sum cations [meq/L] if CEC									
88	Unit	Aquifer content prior to recharge								
89	% d.w.		0.0033	1	0	0	0.02	0.375	0.062	95
90	mmol/kg #	16	1.1	99.9	0.0	0.0	1.7	35.1	7.1	15811.0
91	mmol/L #	75.4	5.2	470.7	0.0	0.0	7.9	165.3	33.6	74487.3
92	# = meq/kg or meq/L if CEC									
93	Parameter	Aquifer leaching of mineral phases								
94	L-Mineral [-]	17	14	accum	0	0	24	accum	8332	accum
95	t-Leach [year]	169.4	136.1	0.0	0.0	0.0	243.6	0.0	83259.2	0.0
96	Leach front [m] ##	9.0	11.2	0.0	0.0	0.0	6.3	0.0	0.0	0.0
97	# = meq, not mmol		## = at survey date, in year: 2011			\$: 1 = parallel flow; 2 = radial flow				

FIG. 6.2. Screen dump van de uitloogroutine van R+ met ondiep grondwater in aquiferlaag B binnen het intrekgebied als input en ruwwater van Noordbargeres als output, beiden gemiddeld voor het jaar 2011. CEC = Cation Exchange Capacity; CH₂O = bulk organische materiaal (BOM); FeS₂ = pyriet.

6.3 Voorspelling doorbraak verontreinigingen via inputsignaal en HRC (zonder uitloging aquifer)

Als we het inputsignaal kennen van stof C voor het hele intrekgebied of een bekend deel daarvan, dan valt het verloop van de output te berekenen via de HRC, indien de stof conservatief is of een bekende retardatiefactor R_C en/of halfwaardetijd ($T_{1/2}$) heeft, èn uitloging van het aquifersysteem t.a.v. reactieve bodembestanddelen geen rol van betekenis speelt. Als de waarde van R_C en/of $T_{1/2}$ onbekend is, maar de output gedurende bepaalde tijd wel gemeten is, dan kunnen beide transportparameters (R_C en $T_{1/2}$) via fitting bepaald worden.

Onder de vermelde condities, wordt de berekeningswijze voor het verloop van stof C, waarbij voor elk jaar 100 percentielen gemiddeld moeten worden, als volgt:

$$C_{HRC,y} = 0.01 \left\{ (C_{IN,y-R_C t_1}) e^{-\frac{0.6931 R_C t_1}{T_{1/2}}} + \dots + (C_{IN,y-R_C t_{100}}) e^{-\frac{0.6931 R_C t_{100}}{T_{1/2}}} \right\} \quad (6.1)$$

waarin: $C_{HRC,y}$ = met HRC voorspelde gemiddelde concentratie voor puttenveld tijdens jaar y ; $(C_{IN,y-R_C t_1})$ = concentratie van stof C in de input voor percentiel 1 tijdens jaar y verminderd met $R_C t_1$ jaren; R_C = retardatiefactor voor stof C betrokken op hele stroombaan [-]; t_x = totale reistijd tot puttenveld voor percentiel X volgens de HRC [jaar]; $T_{1/2}$ = halfwaardetijd van stof C, betrokken op hele stroombaan, dus op t_x [jaar]. $T_{1/2} = (\ln 2)/\lambda$ met λ = vervalconstante [1/d].

Tritium

Een belangrijk voorbeeld is het voorspelde verloop van de tritium-output in het ruwwater van de winning Noordbargeres (Fig.6.3). Dit verloop is verder besproken in § 4.3-4.4, waarbij aangegeven dat de 2 tritiummetingen op cruciale wijze bijdroegen aan de optimalisatie van de HRC. De figuur etaleert (i) een goede overeenkomst tussen het berekende en gemeten verloop dankzij de optimalisatie, en (ii) het sterke effect van menging in de aquifer waardoor de hoge individuele percentielwaarden zeer sterk worden afgevlakt. Voor tritium geldt, overal langs de stroombaan, $R = 1.0$ en $T_{1/2} = 12.263$ jaar.

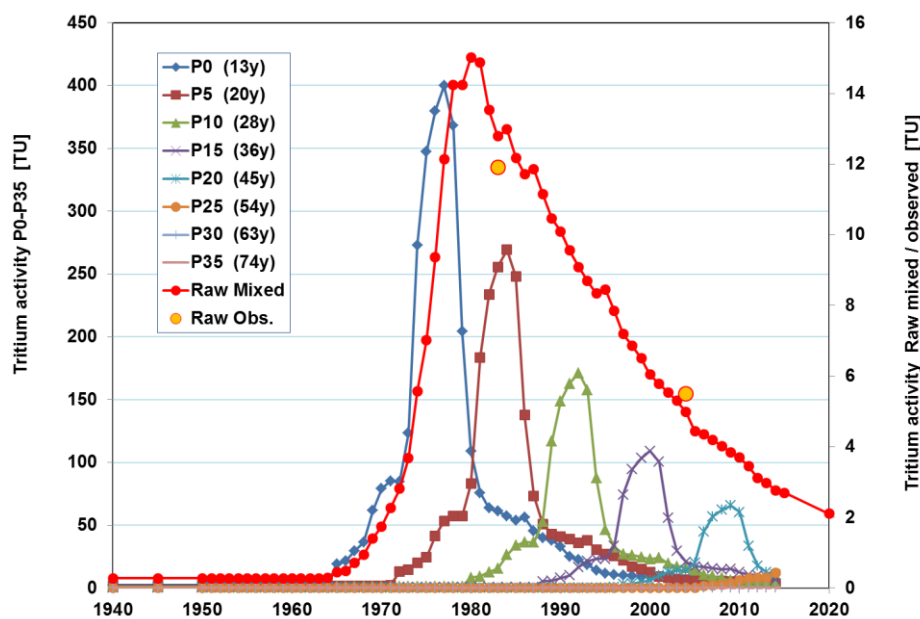


FIG. 6.3. Het via de HRC voorspelde en gemeten (2x) verloop van de tritiumactiviteit van het ruwwater van Noordbargeres, incl. de voorspelde, individuele (ongemengde) tritiumactiviteit voor een beperkt aantal percentielwaarden (P0-P35) met bijbehorende ouderdom tussen haakjes.

TABEL 6.2. Definitie en berekeningswijze van de retardatiefactor van een organische microverontreiniging (R_{OMP}) op basis van bodem-, stof- en vloeistofeigenschappen. Iets gewijzigd naar Stuyfzand (1999).

$R_{OMP} = t_{OMP} / t_{H_2O}$		(6.2)
$R_{OMP} = 1 + (f_{GL} f_{OC} f_{ND} K_{OC}) / (1 + 0.2 \text{ TOC } 10^{-6} f_{ND} K_{OC})$		(6.3)
Soil / aquifer parameters		
$f_{GL} =$	$\rho_s (1-n) / n$ with ρ_s = density solids [kg/L], n = porosity [-]	
$f_{OC} =$	fraction of organic carbon in soil [by weight]	
OMP characteristics		
$K_{OC} =$	distribution coefficient of OMP over organic matter and water [L/kg]	
	$= 10^B (K_{OW})^A$ where K_{OW} = octanol-water distribution coefficient	
$f_{ND} =$	$1 / (1 + 10^{[pH - pK_A]})$ = non dissociated fraction [-] with	
	$pK_A = -\log K_A$ where K_A = 1st dissociation constant $H\text{-OMP} \leftrightarrow OMP + H^+$	
Water matrix characteristics		
$pH =$	$-\log[H^+]$	
$\text{TOC} =$	Total Organic Carbon [mg/L] = mostly DOC in groundwater	

1,2-dichloorpropan

Op vergelijkbare wijze is het verloop van de 1,2-dichloorpropan-output in het ruwwater van de winning Noordbargeres voorspeld (Fig.6.4). Uitgangspunten daarbij waren het door Eijsink (1985) en WMD bepaalde inputsignaal voor met DD behandelde landbouwpercelen binnen het intrekgebied en het percentage van aldus behandelde percelen binnen het intrekgebied. Laatstgenoemde is constant verondersteld op 25%.

De beste overlap tussen gemeten en berekende concentraties in de periode 1987-2014 werd verkregen door de retardatiecoëfficiënt voor 1,2-dcpa ($R_{1,2dcpa}$) te stellen op 1.2 en de halfwaardetijd (t.g.v. biodegradatie) op 50 jaar. Deze R komt goed overeen met de berekende R voor 1,2-dcpa in aquiferlagen C-F volgens Tabel 6.2 met $\rho_s = 2.65$, $n = 0.35$, $f_{OC} = 0.0004$, $K_{OC} = 45.7$, $pK_A = 99$ (onbekend; leidt tot $f_{ND} = 1$), $pH = 6.4$ en $\text{DOC} = 3.3 \text{ mg/L}$.

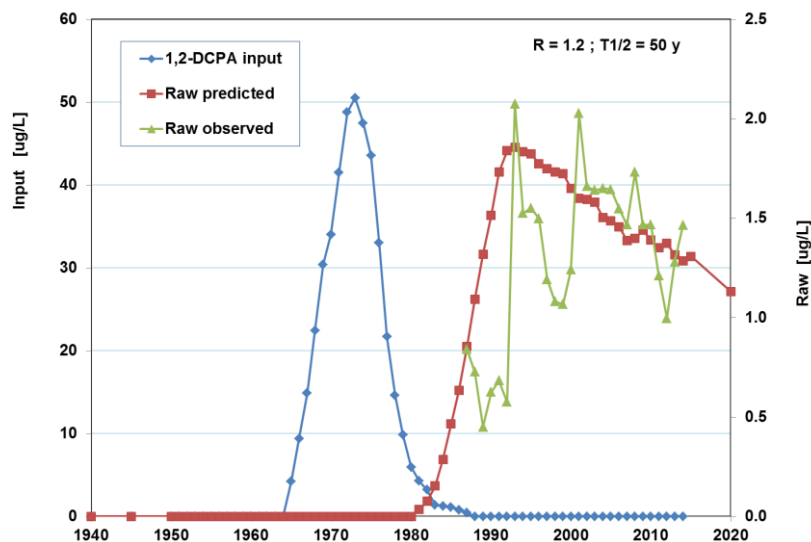


FIG. 6.4. Het verloop van de gereconstrueerde input van 1,2-dichloorpropan, het gemeten verloop in de output (ruwwater puttenveld Noordbargeres) en het via de HRC voorspelde verloop van de output onder aanname van $R = 1.2$ en $T_{1/2} = 50$ jaar.

In de literatuur (o.a. Tesoriero et al. 2001) wordt gemeld dat 1,2-dcpa in (sub)oxische aquifers niet of nauwelijks afbreekt, maar dat wel doet in ijzer-reducerend (dus anoxisch) milieu. Bedacht dient te worden dat de gehanteerde $T_{1/2} = 50$ jaar een *operationele halfwaardetijd* betreft, omdat Eq.6.1 rekent met $t/T_{1/2}$, waarbij t de hele reistijd van maaiveld t/m puttenveld vertegenwoordigt. De *werkelijke halfwaardetijd* is korter (d.w.z. de biodegradatiesnelheid is hoger); het gebeurt immers grotendeels rond de redox grens tussen (sub)oxisch en anoxisch grondwater in aquiferlagen C+D.

1,4-dioxaan

Op eendere wijze is ook het verloop van de 1,4-dioxaan-output in het ruwwater van de winning Noordbargeres voorspeld (Fig.6.5). Uitgangspunt daarbij was het door Peeters et al. (1999) bepaalde inputsignaal voor oppervlaktewater dat vooral vanuit het Oranjekanaal infiltreert binnen het intrekgebied. Dat inputsignaal is echter nogal onzeker, al lijkt het patroon in het verloop betrouwbaar. Om een redelijke overlap tussen de gemeten en berekende concentraties in de periode 1999-2014 te verkrijgen, moest één van de hoogste inputvarianten gekozen worden, en moest de retardatiecoëfficiënt voor 1,4-dioxaan ($R_{1,4diox}$) gesteld worden op 1.6 en de halfwaardetijd (t.g.v. biodegradatie) op 100 jaar. Deze R komt hoger uit dan de berekende R voor 1,4-dioxaan in aquiferlagen C en D (met $K_{OC} = 0.45$). De stof is bekend om haar conservatieve gedrag (Steffan et al. 2007; EPA 2006).

Het voorspelde verloop in Fig.6.5 suggereert dat 1,4-dioxaan in de komende decennia zal stijgen tot waarden rond $2 \mu\text{g/L}$ om vervolgens langzaam te dalen. Bij deze voorspelling is de volledige HRC gebruikt terwijl het Oranjekanaal slechts een deel van het intrekgebied beslaat. De vele onzekerheden maken een gedetailleerdere modellering zonder aanvullende metingen vrijwel zinloos. Vermeld dient te worden dat verontreiniging van grondwater met 1,4-dioxaan zich (internationaal) geenszins beperkt tot de puntlozing(en) zoals in Emmen en gespecificeerd door Griffioen et al (1997) en Peeters et al (1999). Er zijn namelijk vele emissiebronnen (EPA 2006; Steffan et al., 2007), die dus ook elders in Nederland kunnen voorkomen. Zo is 1,4-dioxaan frequent in duininfiltraat gedetecteerd in concentraties van $0.1 - 4.8 \mu\text{g/L}$ (Stuyfzand et al., 2007).

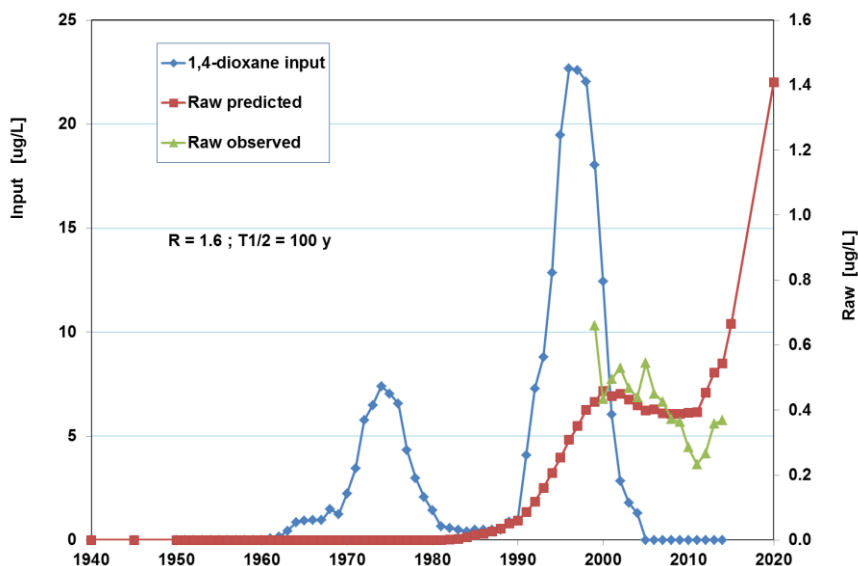


FIG. 6.5. Het verloop van de gereconstrueerde input van 1,4-dioxaan, het gemeten verloop in de output (ruwwater puttenveld Noordbargeres) en het via de HRC voorspelde verloop van de output onder aanname van $R = 1.0$ en $T_{1/2} = 100$ jaar.

Nitraat

De voorspelling van de NO_3 concentratie in het ruwwater van de winning Noordbargeres is gepresenteerd in Fig.6.6. Uitgangspunt daarbij is de getoonde schatting van het inputsignaal, welke gebaseerd is op data van waarnemingsputten onder bouwland in aquiferlaag B sinds 1980 en op de aanname dat ca. 50% van het intrekgebied deze input kent en de andere helft geen nitraat bevat. Dit is uiteraard te simpel maar het biedt een eerste benadering. De inputcurve beslaat de periode met toenemend gebruik van meststoffen (globaal tot 1980), gevolgd door een periode met mestbeperkende en grondwater beschermende maatregelen.

De output, zoals gemodelleerd met denitrificatie, $R_{\text{NO}_3} = 1$ (nitraat sorbeert inderdaad nauwelijks/niet bij de heersende pH) en $T_{1/2} = 4$ jaar, sluit goed aan bij de meetwaarden, die schommelen tussen 0 en 1,5 mg NO_3/L . Als er geen denitrificatie zou optreden zaten we in 2011 rond 25 mg NO_3/L en in 2100 rond 40 mg NO_3/L , hetgeen het belang van denitrificatie verduidelijkt.

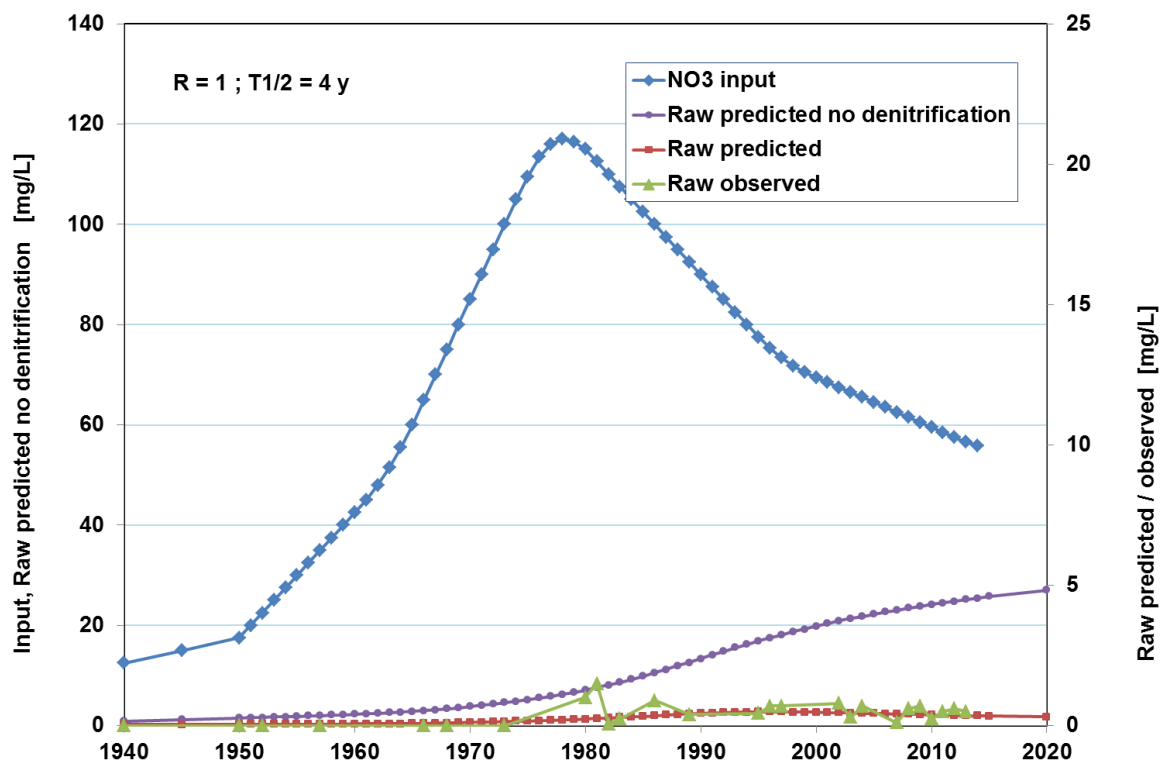


FIG. 6.6. Het verloop van de gereconstrueerde input van nitraat, het gemeten verloop in de output (ruwwater puttenveld Noordbargeres) en het via de HRC voorspelde verloop van de output onder aanname van enerzijds $R = 1.0$ en $T_{1/2} = 4$ jaar (met denitrificatie) en anderzijds $R = 1.0$ en $T_{1/2} = 10^6$ jaar (zonder denitrificatie). Voorspelling onder aanname van geen uitloging en uniforme halfwaardetijd.

6.4 Voorspelling doorbraak verontreinigingen via inputsignaal en HRC (met uitloging aquifer)

In voorgaande sectie is verondersteld dat het poreuze medium geen uitloging kent van reactieve bodembestanddelen. In werkelijkheid logen vooral bulk organisch materiaal (BOM) en pyriet (FeS_2) wel degelijk uit, al gaat dit langzaam (Tabel 6.2). Met andere woorden, op de termijn van enkele decennia voldoet de in § 6.3 gegeven benadering redelijk, maar op langere termijn niet meer. Uitloging zorgt namelijk voor de volgende 2 effecten:

- verlaging van het sorberend vermogen van de aquifer voor stoffen. Dit t.g.v. consumptie van BOM en kalk. Ontkalking leidt tot een pH afname en dus minder kationuitwisselend vermogen. Consequentie is dat OMIVE en spore-elementen eerder doorslaan; en
- verlaging van het reducerend vermogen t.g.v. consumptie van vooral BOM en pyriet en in mindere mate voor uitwisselbaar Fe(II) en Mn(II), en andere oplosende mineralen zoals vivianiet en sideriet. Consequentie is dat de (sub)oxische zone zal oprukken richting puttenveld, waardoor o.a. nitraat en stoffen die in (sub)oxisch milieu niet afbreken of neerslaan het puttenveld kunnen bereiken.

Als we het inputsignaal kennen van stof C voor het hele intrekgebied of een bekend deel daarvan, dan valt het verloop van de output te berekenen via de HRC, ook indien de stof niet-conservatief is en er wel uitloging van het aquifersysteem t.a.v. reactieve bodembestanddelen optreedt. Dit kan op redelijk eenvoudige wijze als we de retardatiefactor R_C over de hele stroombaan constant veronderstellen en b.v. ergens in aquiferzone 1 de overgang van (sub)oxisch naar anoxisch leggen (conform metingen), welke zich in de tijd door uitloging met constante snelheid benedenwaarts mag verplaatsen. Voor beide redoxzones kunnen dan verschillende halfwaardetijden gehanteerd worden. Onder de vermelde condities, wordt de berekeningswijze voor het verloop van stof C, waarbij voor elk jaar 100 percentielen gemiddeld moeten worden, als volgt:

$$C_{HRC,y} = 0.01 \left\{ (C_{IN,y-R_C t_1}) e^{-0.6931 R_C (t_{1A}/T_{1/2A} + t_{1B}/T_{1/2B})} + \dots \dots \dots \right. \\ \left. + (C_{IN,y-R_C t_{100}}) e^{-0.6931 R_C (t_{100A}/T_{1/2A} + t_{100B}/T_{1/2B})} \right\} \quad (6.4)$$

$$t_{XA} = A + (t_y - t_{START}) v_L / v_{H_2O} \text{ [jaar]} \quad (6.5)$$

$$t_{XB} = t_X - t_{XA} \text{ [jaar]} \quad (6.6)$$

waarin: $C_{HRC,y}$ = met HRC voorspelde gemiddelde concentratie voor puttenveld tijdens jaar y ; $(C_{IN,y-R_C t_1})$ = concentratie van stof C in de input voor percentiel 1 tijdens jaar y verminderd met $R_C t_1$ jaren; R_C = retardatiefactor voor stof C betrokken op hele stroombaan [-]; t_x, t_{XA}, t_{XB} = totale reistijd tot puttenveld voor percentiel X volgens de HRC, eerste deel daarvan (tot redoxgrens) en restant daarvan [jaar]; $T_{1/2A}, T_{1/2B}$ = halfwaardetijd van stof C, betrokken op traject A (1^e deel stroombaan) en traject B (restant stroombaan) [jaar]; A = gemiddelde reistijd van maaiveld tot redoxgrens in aquiferzone 1 [jaar]. In plaats van een gemiddelde waarde kan A ook afhankelijk van de afstand X of praktischer van P_X worden gemaakt, b.v. $A = 10 + P_X/3$ [jaar]; t_y = jaar waarvoor t_{XA} bepaald wordt; t_{START} = jaar van geochemische analyse; v_L = uitloogsnelheid volgens de massabalans (zie Fig.6.2); v_{H_2O} = gemiddelde verticale stroomsnelheid grondwater in aquiferzone 1 [jaar].

Voorbeeld: NO_3 en 1,2-dcpa

Met de extra kennis en Eqs.6.4-6.6 is het concentratieverloop voor NO_3 en 1,2-dichloorpropan in het ruwwater voorspeld (Fig.6.7-6.8). De volgende parameterwaarden zijn daarbij gehanteerd: $R_{12dcpa} = 1.2$; $R_{\text{NO}_3} = 1$; $T_{1/212dcpa} = 10^6$ jaar in (sub)oxisch milieu en 50 jaar in anoxisch milieu; $T_{1/2\text{NO}_3} = 10^6$ jaar in (sub)oxisch milieu en 2 jaar in anoxisch milieu; $A = 10$ jaar; $t_{START} = 1998$; $v_{H_2O} = 1$ m/j.

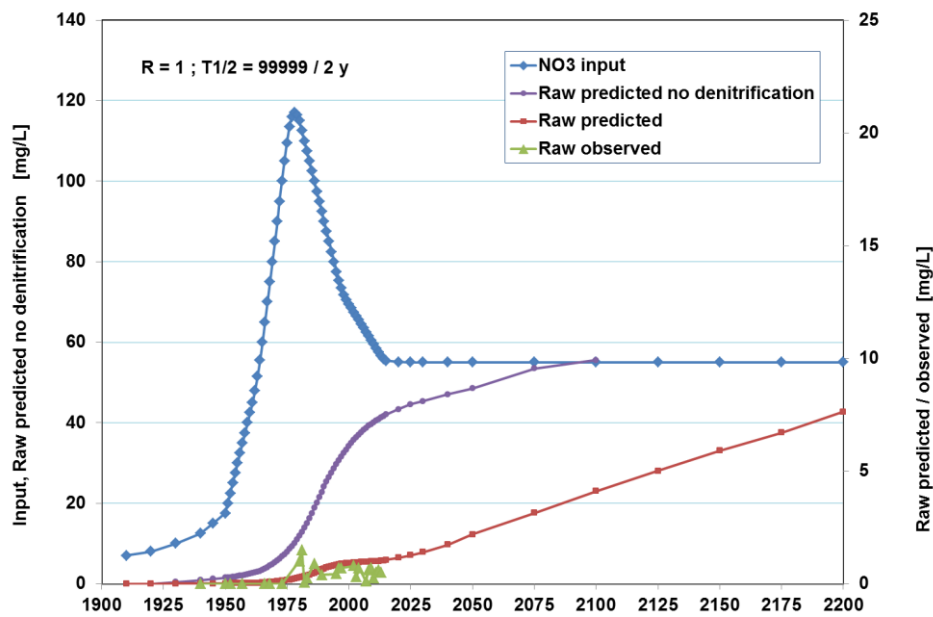


FIG. 6.7. Het verloop van de gereconstrueerde input van nitraat, het gemeten verloop in de output (ruwwater puttenveld Noordbargeres) en het via de HRC voorspelde verloop van de output onder aanname van enerzijds $R = 1.0$ en $T_{1/2} = 10^6$ in uitgeloopte zone en 2 jaar daar voorbij (met denitrificatie) en anderzijds $R = 1.0$ en $T_{1/2} = 10^6$ jaar (zonder denitrificatie). Voorspelling onder aanname van uitloging leidend tot redoxgrens waarboven geen denitrificatie en waaronder $T_{1/2} = 2$ jaar. Redoxgrens zakt met 0.1 m/jaar sinds 1910.

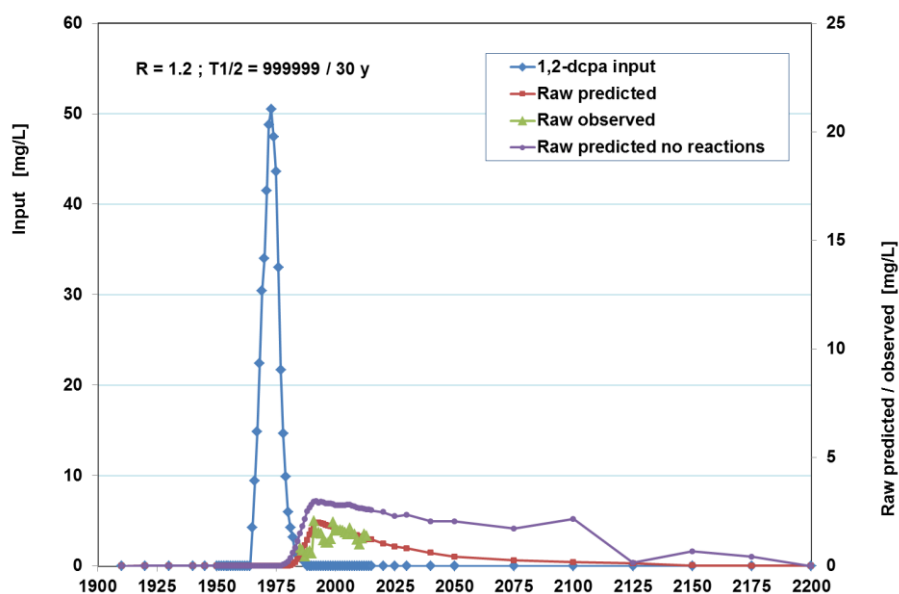


FIG. 6.8. Het verloop van de gereconstrueerde input van 1,2-dichloorpropan, het gemeten verloop in de output (ruwwater puttenveld Noordbargeres) en het via de HRC voorspelde verloop van de output onder aanname van enerzijds $R = 1.0$ en $T_{1/2} = 10^6$ in uitgeloopte zone en 2 jaar daar voorbij (met denitrificatie) en anderzijds $R = 1.0$ en $T_{1/2} = 10^6$ jaar (zonder denitrificatie). Voorspelling onder aanname van uitloging leidend tot redoxgrens waarboven geen denitrificatie en waaronder $T_{1/2} = 2$ jaar. Redoxgrens zakt met 0.1 m/jaar sinds 1910.

Vergelijking van Fig.6.7 met Fig.6.6 (NO₃) en van Fig.6.8 met Fig.6.4 (1,2-dichloorpropan) toont dat uitloging op langere termijn de prognose doet veranderen, en dat de voor modellering benodigde halfwaardetijden voor het suboxische en anoxische deel realistischer worden.

Andere hoofdcomponenten en OMIVE

Met Eqs.6.1-6.6 kunnen we het gedrag voorspellen van alle (vrijwel) conservatieve stoffen zoals Cl, Br, bentazon en carbamazepine, en van afbrekende en/of retarderende stoffen (zoals NO₃, tritium en de meeste OMIVE), met of zonder rekenschap van bodemuitloging. Dit kan met een bekend of fictief inputsignaal van elke vorm, op basis van jaargemiddelde concentraties.

Aan het gedrag van b.v. NO₃ kan verder het niet-conservatieve gedrag van SO₄ en HCO₃ gekoppeld worden door de denitrificatie te koppelen aan de chemische massabalansen (§ 6.1).

→ Kortom we hebben een relatief simpel en krachtig voorspelinstrument in handen, waarmee inzichtelijk kan worden gemaakt welke stoffen in het ruwwater op hinderlijke wijze gaan opspelen en welke niet. En dat vertaalt zich in de monitoring. → zie § 7.5.

6.5 Voorspelling positief geladen ionen, spore-elementen en radionucliden bij een stapinput

De voorspelling van de ruwwaterkwaliteit voor positief geladen species is complex, en vergt voor macrokationen zoals K⁺ een andere aanpak dan die voor spore-elementen of radionucliden of OMIVE. Met de in onderstaande subsecties beschreven methoden zijn berekeningen uitgevoerd ter bepaling van de mobiliteit van anorganische (micro)verontreinigingen, zoals K, Ni, radiostrontium en vele anderen, ervan uitgaande dat hun inputconcentratie aan maaiveld 60 jaar geleden ineens, dus stapsgewijs, en continu zou zijn verhoogd van 0 tot 100%. Ten opzichte van de in § 6.3 en 6.4 gegeven HRC methoden met variabel inputsignaal is dit een vereenvoudiging en een soort worst-case benadering, met als voordeel dat het gedrag van vele stoffen tegelijkertijd wordt doorgelicht.

Ter vereenvoudiging is ook aangenomen dat het aquifersysteem uit 2 lagen met gemiddelde hydrogeochemische kenmerken bestaat: een aërobe, zuurdere aquiferzone 1 (de deklaag; verblijftijd 10 jaar) en een anaërobe, minder zure aquiferzone 2 (het grove pakket waaruit gewonnen wordt; verblijftijd 4 jaar). De karakteristieken van de aquifer, het grondwater en de hydrologie zijn vermeld in Tabel 6.5. Dispersie is verwaarloosd.

6.5.1 Macrokationen

De periode van kationuitwisseling (hier basenuitwisseling) van hoofdelementen kan volgens Stuyfzand (1989) geschat worden met :

$$R_{\text{BEX}} = 1 + f_X \{ \rho_s (1 - n) \text{CEC} \} / (n \Sigma c) \quad (6.7)$$

waarin: CEC = actuele kationuitwisselcapaciteit volgens Eq.3.1 [meq/kg droge stof]; ρ_s = dichtheid korrelskelet, doorgaans 2,65 [kg/l]; n = porositeit, hier ca. 0,35 [volumefractie]. Σc = som van kationen in de verdringende watersoort [meq/L]; f_X = correctiefactor voor kation X: $f_{\text{Na}} = 0.05$, $f_{\text{K}} = 0.65$; $f_{\text{NH}_4} = 0.4$, $f_{\text{Ca}} = 1$; $f_{\text{Mg}} = 0.5$. Deze waarden stelen op grootschalige pilotstudies in open en diepinfiltratiesystemen (zie o.a. Stuyfzand, 1989).

De verwachte doorbraaktijd na de stapsgewijze verhoging (t_{EQ}) bedraagt, in geval van het te doorlopen 2-lagen systeem:

$$t_{\text{EQ}} = t_{\text{H}_2\text{O},1} R_{\text{BEX},1} + t_{\text{H}_2\text{O},2} R_{\text{BEX},2} \quad (6.8)$$

De resultaten van berekening zijn gepresenteerd in Tabel 6.5 (onderin). De belangrijkste conclusie is dat de resulterende toename van Na reeds lang moet zijn doorgedrongen tot de pompputten, maar die van K nog lang niet. K en Ca zijn nog niet in uitwisselingsevenwicht binnen zone 1, hun verwachte doorbraaktijd volgens Eq.6.8 bedraagt resp. 95 en 139 jaar. Dit lijkt in ieder geval voor K redelijk te kloppen met de metingen die in aquiferlaag F nog zeer lage K concentraties laten zien (Tabel 3.3).

6.5.2 Positief geladen spore-elementen

Een simpele analytische benadering die alleen sorptie verdisconteert, baseert zich eveneens op de retardatiecoëfficiënt R_M . Deze laat zich volgens Appelo & Postma (2005) als volgt berekenen, onder aanname dat het spore-element uitwisselt tegen Ca:

$$R_M = 1 + \frac{\rho_s(1-n)K_d}{n} = 1 + \frac{\rho_s(1-n)}{n} \frac{CEC}{m} \left(K_{M/Ca} \frac{\beta_{Ca}^{0,5}}{(Ca^{2+})^{0,5}} \right)^m \quad (6.9)$$

waarin:

K_d = distributiecoëfficiënt over grond en water, dus C_{GROND} / C_{WATER} [L/kg];

$K_{M/Ca}$ = de uitwisselingsconstante (volgens de Gaines-Thomas schrijfwijze) voor een metaal M^{m+} in evenwicht met Ca^{2+} [-] volgens de reactie: $1/m M^{m+} + 1/2 Ca-X_2 \leftrightarrow 1/m M-X_m + 1/2 Ca^{2+}$

Deze constante kan berekend worden uit $K_{Na/M}$ -waarden in Tabel 6.3, door te nemen: $K_{M/Ca} = K_{Na/Ca}/K_{Na/M}$;

β_{Ca} = aandeel van calcium in totale kationuitwisselcapaciteit (CEC) van bodem = Ca_{CEC}/CEC [-];

m = de lading van metaal M; $[Ca^{2+}]$ = totale calciumconcentratie in infiltratiewater [mmol/L]

Om deze vergelijking ook operationaal te krijgen voor lagere pH waarden en (mede) daardoor voor veranderende β_{Ca} waarden, is in Eq.6.9 (Ca^{2+}) vervangen door $(Ca^{2+} + Mg^{2+} + Al^{3+} + H^+)$ en β_{Ca} door $Ca/(Ca+Mg+Al+H)$, alle in mmol/L. Een lagere pH helpt R_M te verlagen, zoals doorgaans waargenomen in de praktijk, enerzijds door verlaging van de CEC volgens Eq.3.1, en anderzijds door genoemde vervanging van (Ca^{2+}) en β_{Ca} . Resultaat is dat R_M met stijgende pH en Ca concentratie flink toeneemt totdat het effect van een toegenomen Ca concentratie dat van de pH toename overschaduw (vanaf pH5 ca.), zodat de R_M waarde weer iets daalt t.g.v. het grotere verdringende vermogen bij hogere Ca concentraties.

De Mg concentratie kan geschat worden door 0.082-0.165 maal de Ca concentratie te nemen in mmol/L. De Al^{3+} concentratie in mmol/L kan als volgt geschat worden onder aanname van evenwicht met microkristallijne gibbsite ($Al(OH)_3$ met $\log K_{SO} = 9.35$):

$$\text{Als pH} > 4.1: \quad Al^{3+} = 10^{12.35} [H^+]^3 / \gamma_{Al} \quad (6.10A)$$

$$\text{Anders:} \quad Al^{3+} = 10^{12.35} [10^{-4.1}]^3 / \gamma_{Al} \quad (6.10B)$$

Waarin: γ_{Al} = activiteitscoëfficiënt Al, waarvoor 0.66 genomen [-]; $H^+ = 10^{-pH}$

In Tabel 6.5 zijn de resultaten van berekening gepresenteerd. De belangrijkste conclusie is dat de verwachte toename van de 8 geselecteerde spore-elementen ongeveer 100-300 jaar duurt, zij lopen nog vast in aquiferzone 1 en zijn derhalve nog niet doorgedrongen tot de pompputten. Co, Cu en Ni zijn mobieler dan Ba, Cd, Pb, Sr en Zn, en Pb is het minst mobiel.

Deze berekeningen kloppen goed met de meetresultaten, want het ruwwater vertoont geen toenames van deze groep spore elementen (Tabel 5.5). Op pompput-niveau zijn hierop afwijkingen.

TABEL 6.3 Lijst van waarden voor de selectiviteitscoëfficiënten $K_{Na/X}$ zoals gepresenteerd door Appelo & Postma (2005, p.255). Hieruit zijn de $K_{M/Ca}$ waarden in Eq.6.8 bepaald als aangegeven in de voetnoot.

Ion I ⁺	$K_{Na/I}$	Ion I ²⁺	$K_{Na/I}$	Ion I ³⁺	$K_{Na/I}$
Li+	1.2 (0.95-1.2)	Mg2+	0,50 (0,4-0,6)	Al3+	0.6 (0.5-0.9)
K+	0,20 (0,15-0,25)	Ca2+	0,40 (0,3-0,6)	Fe3+	?
NH4+	0,25 (0,2-0,3)	Sr2+	0,35 (0,3-0,6)		
Rb+	0.1	Ba2+	0,35 (0,2-0,5)		
Cs+	0.08	Mn2+	0.55		
		Fe2+	0.6		
		Co2+	0.6		
		Ni2+	0.5		
		Cu2+	0.5		
		Zn2+	0.4 (0.3-0.6)		
		Cd2+	0.4 (0.3-0.6)		
		Pb2+	0.3		

Note: $K_{M/Ca} = (K_{Na/Ca} / K_{Na/M})$, thus for $Ba^{2+} = Sr^{2+} = 1.14$; $Cd^{2+} = Zn^{2+} = 1.0$; $Co^{2+} = 0.67$; $Cu^{2+} = Ni^{2+} = 0.8$; $Pb^{2+} = 1.33$.

6.5.3 Radionucliden

Radionucliden retarderen conform het in deze paragraaf behandelde retardatieconcept, waarbij echter de retardatiefactor herleid is uit de K_d -waarde van het element ten opzichte van de K_d -waarde van strontium (K_d -waarden volgens Haberer, 1989). Voor een overzicht zie Tabel 6.4. Daarbij voegt zich natuurlijk nog het effect van radioactief verval met constante halfwaardetijd ($T_{1/2}$; d), die niet beïnvloed wordt door veranderingen in pH of redox milieu, volgens:

$$C_t = \frac{C_0}{2^{\left(\frac{t_{H_2O} R_M}{T_{1/2}}\right)}} \quad (6.11)$$

waarin: C_0 = beginactiviteit van radionuclide ergens in het systeem [Bq/L of 100%]; C_t = activiteit radionuclide na t dagen verblijftijd in bodem [Bq/l of %]; t_{H_2O} = reistijd water [d]

TABEL 6.4. Overzicht van belangrijke radionucliden in water (Stuyfzand en Lüers 1996) en hun eigenschappen. Filtratie-effect ingeschat op basis van expertkennis. Retardatiefactoren uitgaande van kalkrijk water (Ca circa 80 mg/L, pH 7-8). Stralingstype en halfwaardetijden ontleend aan Haberer (1989).

Radionuclide	Radiation type	$T_{1/2}$ (days)	Filtration susp. solids		$(K_d)_l / (K_d)_{Sr}$	Retardation factor (R)			
			- pre-treatment	+ pre-treatment		Dune sand	Gravel	Fluvial sand	Silt / mud
3H	β-	4490	0.00	0.00	0	1	1	1	1
14C	β-	2091450	0.00	0.00	0	1	1	1	1
40K	β-	4.85E+11	0.10	0.05	1.5	25	23	31	1369
58Co	γ	71	0.50	0.29	0.6	3	3	4	123
60Co	β-γ	1924	0.50	0.29	0.6	3	3	4	123
89Sr	β-	51	0.00	0.00	1	7	6	8	340
90Sr	β-	10476	0.00	0.00	1	7	6	8	340
91Y	β-	59	0.90	0.68	100	2944103	2652722	3663581	167889031
103Ru	β-γ	39	0.50	0.29	0.5	9	8	11	457
106Ru	β-γ	368	0.50	0.29	0.5	9	8	11	457
131I	β-γ	8	0.00	0.00	1	17	15	21	913
132Te	β-γ	3	0.90	0.68	1	3	2	3	95
137Cs	β-γ	10950	0.90	0.68	7.5	121	109	150	6840
140Ba	β-γ	13	0.20	0.11	1.25	10	9	13	530
141Ce	β-γ	33	0.90	0.68	25	3715	3347	4622	211786
144Ce	β-γ	285	0.90	0.68	25	3715	3347	4622	211786
147Pm	β-	956	0.90	0.68	30	79492	71624	98918	4533005
240Pu	α	8760000	0.99	0.90	100	2944103	2652722	3663581	167889031
CEC [meq/kg]=						5.0	2.4	5.0	309

De resultaten van berekening zijn gepresenteerd in Tabel 6.5 (bovenin). Daarbij de kanttkening dat de berekende outputactiviteit op nul is gezet als $(R \text{ tH}_2\text{O} / T_{1/2}) > 300$.

De belangrijkste conclusie is dat alleen tritium en ^{14}C snel doorbreken (14 jaar, net als water), en dat vrijwel alle overige radionucliden er niet alleen lang (106 jaar tot $145 \cdot 10^6$ jaar) over doen maar bovendien een verwaarloosbare activiteit zullen etaleren. Uitzondering is ^{90}Sr dat na 270 jaar zodanig doorbreekt dat zijn activiteit niet verwaarloosbaar is (ook gelet op de gezondheidsaspecten), n.l. 0.15% van de inputwaarde.

Voor belangrijke conclusies uit dit hoofdstuk ten aanzien van de monitoring → § 7.5

TABEL 6.5. Voorspelde doorbraak en concentratie of activiteit van 18 radionucliden, 8 spore-elementen en 7 hoofdkationen in het ruwwater van Noordbargeres na 60 jaar 100% input aan maaiveld binnen het intrekgebied, met tussenstand aan onderzijde aquiferlaag D (middenblok) en eindstand in de pompputten (rechterblok).

Doorbraak indien Pollutant pore volume >1. Concentratie of activiteit na doorbraak = C_{OUT} . Voorspelde doorbraaktijd in pompputten = t_{EQ} .

charge	fraction	radionuclide or trace element	KM/Ca TE	(Kd)X(Kd)/Sr Rad	silt-bound after pre-treatment	T1/2		Noordbargeres, suboxic zone A-D					Noordbargeres, anoxic zone below D to wells					Total tEQ year			
						d	year	Kd (kg)	R _{AMP}	Front position [m] after 60 y	Poll. pore volume	C _N %	C _{OUT} %	if T _{TOE} >	Kd (kg)	R _{AMP}	Front position [m] after 60 y		Poll. pore volume	C _N %	C _{OUT} %
PHYSICO-CHEMICAL CHARACTERISTIC OF INORGANIC MICRO-POLLUTANTS (IMPs)																					
0	0	3H		0	0.0	0.00	4489.5	12.3	0 = no filtration; 1 = filtr after presteam; 2 = filtr					0 = no filtration; 1 = filtr after presteam; 2 = filtr							
0	0	14C		0	<1	0.00	2091450	5730	0.0	1.0	>37	6.0	100.0	56.897	0.0	1.0	>100	12.5	56.9	45.408	14
1	0.1	40K	2.00	1.5	1-2	0.05	4.85E+11	1.33E+09	13.8	68.7	3.23	0.1	100.0	100.000	10.9	59.6	0.00	0.0	100.0	100.000	925
2	0.5	58Co	0.67	0.6	0.6	0.29	70.8		1.5	8.3	26.89	0.7	100.0	0.000	0.9	5.9	0.00	0.0	0.0	0.000	106
2	0.5	60Co	0.67	0.6	0.6	0.29	1923.55	5.27	1.5	8.3	26.89	0.7	100.0	0.002	0.9	5.9	0.00	0.0	0.0	0.000	106
2	0	89Sr	1.14	1	1.0	0.00	50.5		4.1	21.2	10.49	0.3	100.0	0.000	2.5	14.6	0.00	0.0	0.0	0.000	270
2	0	90Sr	1.14	1	1.0	0.00	10475.5	28.7	4.1	21.2	10.49	0.3	100.0	0.601	2.5	14.6	0.00	0.0	0.60	0.146	270
3	0.9	91Y		100	100.0	0.68	59		2439933	12007958	0.00	0.0	100.0	0.000	1176297	6328834	0.00	0.0	0.0	0.000	145394921
1	0.5	103Ru		0.5	<1?	0.29	39.3		4.6	23.6	9.42	0.3	100.0	0.000	3.6	20.5	0.00	0.0	0.0	0.000	318
1	0.5	106Ru		0.5	<1?	0.29	368		4.6	23.6	9.42	0.3	100.0	0.000	3.6	20.5	0.00	0.0	0.0	0.000	318
1	0	131I		1	>1?	0.00	8		9.2	46.1	4.81	0.1	100.0	0.000	7.3	40.1	0.00	0.0	0.0	0.000	622
4	0.9	132Te		1	>1?	0.68	3.2		1.6	9.0	24.54	0.7	100.0	0.000	0.6	4.3	0.00	0.0	0.0	0.000	108
1	0.9	137Cs		7.5	5-10	0.68	10950	30	68.8	339.4	0.65	0.0	100.0	0.000	54.5	294.2	0.00	0.0	0.0	0.000	4571
2	0.2	140Ba	1.14	1.25	1-1.5	0.11	12.8		6.4	32.5	6.83	0.2	100.0	0.000	4.0	22.3	0.00	0.0	0.0	0.000	414
2	0.9	141Ce		25	25.0	0.68	32.5		2560	12600	0.02	0.0	100.0	0.000	1582	8514	0.00	0.0	0.0	0.000	160055
2	0.9	144Ce		25	25.0	0.68	285		2560	12600	0.02	0.0	100.0	0.000	1582	8514	0.00	0.0	0.0	0.000	160055
3	0.9	147Pm		30	30.0	0.68	956.3	2.62	65878	324216	0.00	0.0	100.0	0.000	31760	170880	0.00	0.0	0.0	0.000	3925676
3	0.99	240Pu		100	100.0	0.90	8760000	2.40E+04	2439933	12007958	0.00	0.0	100.0	0.000	1176297	6328834	0.00	0.0	0.0	0.000	145394921
TRACE ELEMENT																					
2	0.2	Ba	1.14	1.00		0.11	1E+99		4.1	21.2	10.5	0.3	100.0	100.000	2.5	14.6	0.00	0.0	100.0	100.000	270
2	0.35	Cd	1	0.88		0.19	1E+99		3.2	16.5	13.4	0.4	100.0	100.000	1.9	11.5	0.00	0.0	100.0	100.000	211
2	0.5	Co	0.67	0.59		0.29	1E+99		1.4	8.0	27.9	0.8	100.0	100.000	0.9	5.7	0.00	0.0	100.0	100.000	102
2	0.5	Cu	0.8	0.70		0.29	1E+99		2.0	10.9	20.3	0.5	100.0	100.000	1.2	7.7	0.00	0.0	100.0	100.000	140
2	0.5	Ni	0.8	0.70		0.29	1E+99		2.0	10.9	20.3	0.5	100.0	100.000	1.2	7.7	0.00	0.0	100.0	100.000	140
2	0.9	Pb	1.33	1.17		0.68	1E+99		5.6	28.4	7.8	0.2	100.0	100.000	3.4	19.5	0.00	0.0	100.0	100.000	363
2	0	Sr	1.14	1.00		0.00	1E+99		4.1	21.2	10.5	0.3	100.0	100.000	2.5	14.6	0.00	0.0	100.0	100.000	270
2	0.7	Zn	1	0.88		0.45	1E+99		3.2	16.5	13.4	0.4	100.0	100.000	1.9	11.5	0.00	0.0	100.0	100.000	211
MAIN CATIONS																					
1	0	Na		0.05		0.00	1E+99				1.4	>37	4.2	100.0	100.000	1.5	>100	7.8	100.0	100.000	20
1	0	K		0.65		0.00	1E+99				6.7	33.1	0.9	100.0	100.000	7.1	0.00	0.0	100.0	100.000	95
2	0	Ca		1		0.00	1E+99				9.8	22.7	0.6	100.0	100.000	10.3	0.00	0.0	100.0	100.000	139
2	0	Mg		0.5		0.00	1E+99				5.4	>37	1.1	100.0	100.000	5.7	26.91	0.3	100.0	100.000	77
1	0	NH4		0.4		0.00	1E+99				4.5	>37	1.3	100.0	100.000	4.7	78.66	0.8	100.0	100.000	64
2	0	Fe		0.45		0.00	1E+99				5.0	>37	1.2	100.0	100.000	5.2	50.47	0.5	100.0	100.000	70
2	0	Mn		0.45		0.00	1E+99				5.0	>37	1.2	100.0	100.000	5.2	50.47	0.5	100.0	100.000	70

6.6 Voorspelling OMIVE bij een stapinput

Zoals in de vorige sectie, wordt ook hier de ruwwaterkwaliteit voorspeld voor een groot aantal microverontreinigingen tegelijk, ervan uitgaande dat hun inputconcentratie aan maaiveld 60 jaar geleden ineens, dus stapsgewijs, en continu zou zijn verhoogd van 0 tot 100%. Het betreft OMIVE variërend van zeer mobiel en persistent tot immobiel en snel afbreekbaar.

Ten opzichte van de in § 6.3 en 6.4 gegeven HRC methoden met variabel inputsignaal is dit een vereenvoudiging en een soort worst-case benadering. De transportvergelijking is gelijk aan die van de radionucliden (Eq.6.11), met als belangrijk verschil dat (i) de halfwaardetijden afhankelijk zijn van het redoxmilieu, en (ii) de retardatiefactor berekend wordt op andere wijze, n.l. volgens Eq.6.2-6.3. Ter vereenvoudiging is ook hier aangenomen dat het aquifersysteem uit 2 lagen met gemiddelde hydrogeochemische kenmerken bestaat: een aërobe, zuurdere aquiferzone 1 (de deklaag) en een anaërobe, minder zure aquiferzone 2 (het grove pakket waaruit gewonnen wordt). De karakteristieken van de aquifer, het grondwater en de hydrologie zijn vermeld in Tabel 6.6. Dispersie is verwaarloosd.

TABEL 6.6. Voorspelde doorbraak en concentratie van 45 OMIVE in het ruwwater van Noordbargeres na 60 jaar 100% input aan maaiveld binnen het intrekgebied, met tussenstand aan onderzijde aquiferlaag D (middenblok) en eindstand in de pompputten (rechterblok). Doorbraak indien Pollutant pore volume >1. Concentratie na doorbraak = C_{OUT}. Voorspelde doorbraaktijd in pompputten = t_{EQ}.

Porous medium	porosity [n]	rho solids [kg/L]	Pore flush = ca. bed volume				redox: fill in 1,2 or 3	redox: fill in 1,2 or 3	f	T _{tot}	0.35	0.33									
			DOC after inf [mg/L]	DOC prior to inf [mg/L]	DOC/DOC prior to inf [-]	DOC fraction organic carbon % = 0.001							0.0003	0.0005							
Infiltration water	Pore flush = T _{TOT} / t _{H2O}		Pollutant pore flush = T _{TOT} / (t _{H2O} R _{OMP})		suboxic		anoxic														
	pH-inf	travel time [d]	v-H ₂ O [m/d]	flow path length [m]	time since infiltration [y]	T _{TOT}	0.35	0.33													
Hydrology	#H ₂ O	T _{TOT}	Physico-chemical characteristic of Organic MicroPollutants (OMPs)				Noordbargeres, suboxic zone A-D				Noordbargeres, anoxic zone below D to wells				Total						
			a	b	OMP	logKow	logKoc	Koc	pKa	T1/2 [d]	R _{OMP}	Front position [m] after 60 y	Poll. pore volumes n	C _{IN} %		C _{OUT} %	R _{OMP}	Front position [m]	Poll. pore volumes n	C _{IN} %	C _{OUT} %
0.989	-0.346	1,1,1-trichloroethane	2.47	2.25	178	99.0	273	560	3.5	1.3	>37	4.8	100.00	8.2E-04	1.5	>100	8.0	8.2E-04	5.7E-05	19	
0.989	-0.346	1,2-dichloroethene	2.55	#N/A	150	99.0	28	720	720	1.2	>37	4.9	100.00	1.1E-46	1.4	>100	8.5	1.1E-46	1.5E-47	18	
0.72	0.49	1,2-dichlorobenzene	3.39	2.49	309	20.0	180	1E+99	10	1.5	>37	4.1	100.00	1.3E-07	1.8	>100	6.2	1.3E-07	1.3E-07	22	
0.989	-0.346	1,2-dichloroethane	1.51	1.51	32	99.0	180	720	1E+99	1.0	>37	5.7	100.00	4.0E-05	1.1	>100	11.4	4.0E-05	8.6E-06	15	
1	0	1,2-dichloropropane	1.99	1.66	45.7	99	1E+99	10959	#N/A	1.1	>37	5.6	100.00	1.0E+02	1.12	>100	11.0	1.0E+02	9.0E+01	15	
0.72	0.49	1,3,5-trichlorobenzene	4.19	3.7	5012	99.0	183	365	1E+99	8.4	26.51	0.7	100.00	4.8E-49	14.4	0.00	0.0	4.8E-49	1.9E-66	142	
0.72	0.49	1,3-dichlorobenzene	3.38	#N/A	839	20.0	180	1E+99	7	2.2	>37	2.7	100.00	2.1E-12	3.3	>100	2.9	2.1E-12	2.1E-12	35	
0.72	0.49	1,4-dichlorobenzene	3.39	#N/A	853	20.0	180	1E+99	6	2.3	>37	2.7	100.00	1.6E-12	3.3	>100	2.8	1.6E-12	1.6E-12	36	
1	0	1,4-Dioxane	-0.27	#N/A	1	99.0	1E+99	36525	#N/A	1.0	>37	6.0	100.00	1.0E+02	1.0	>100	12.5	1.0E+02	9.7E+01	14	
#N/A		3-or 5-chlorotoluidine	2.26	2.3	200	99.0	#N/A	#N/A	#N/A	1.3	>37	4.6	100.00	#N/A	1.5	>100	7.7	#N/A	#N/A	19	
1	-0.21	acenafthene	4.33	3.94	8710	99.0	102	408	1E+99	13.8	16.11	0.4	100.00	0.0E+00	24.3	0.00	0.0	0.0E+00	0.0E+00	235	
1	0	Amidotrizoic acid	1.37	#N/A	23	99.0	1E+99	40	#N/A	1.0	>37	5.8	100.00	1.0E+02	1.1	>100	11.7	1.0E+02	2.0E+10	15	
0.72	0.67	atrazine	2.33	1.85	71	1.7	140	20	10	1.0	>37	6.0	100.00	1.4E-06	1.0	>100	12.5	1.4E-06	1.4E-28	14	
1	0	Benzazone	-0.46	#N/A	0	2.9	1E+99	4400	#N/A	1.0	>37	6.0	100.00	1.0E+02	1.0	>100	12.5	1.0E+02	7.9E+01	14	
1	-0.21	benzo(a)pyrene	6.04	6.4	2511886	99.0	530	2120	2120	1370.5	0.16	0.0	100.00	0.0E+00	2696.3	0.00	0.0	0.0E+00	0.0E+00	24490	
0.72	0.49	bis-(2-chloroisopropyl)ether	2.05	#N/A	92	99.0	180	1E+99	1E+99	1.1	>37	5.3	100.00	1.1E-05	1.2	>100	9.7	1.1E-05	1.1E-05	16	
1	0	Carbamazepine	2.45	#N/A	282	99.0	1E+99	14600	#N/A	1.4	>37	4.2	100.00	1.0E+02	1.8	>100	6.5	1.0E+02	8.9E+01	21	
1	0	Carbendazim	1.56	#N/A	36	99.0	1E+99	25	#N/A	1.1	>37	5.7	100.00	1.0E+02	1.1	>100	11.3	1.0E+02	4.9E-18	15	
#N/A	#N/A	chlorate	#N/A	1.0	10	2.0	1E+99	3	1.5	1.0	>37	6.0	100.00	1.0E+02	1.0	>100	12.5	1.0E+02	0.0E+00	14	
0.989	-0.346	chloroform	1.97	2.0	100	99.0	80	2.5	2.5	1.1	>37	5.2	100.00	1.7E-14	1.3	>100	9.6	1.7E-14	0.0E+00	17	
1	0	Diglyme	-0.36	#N/A	0	99.0	1E+99	1E+99	#N/A	1.0	>37	6.0	100.00	1.0E+02	1.0	>100	12.5	1.0E+02	1.0E+02	14	
1.029	-0.18	dinoseb	3.69	#N/A	4140	5.0	123	10	5	1.6	>37	3.9	100.00	1.2E-12	1.1	>100	9.8	1.2E-12	1.1E-62	20	
0.72	0.67	diurone	2.81	2.6	398	2.2	240	25	12.5	1.0	>37	6.0	100.00	2.6E-03	1.0	>100	12.5	2.6E-03	6.7E-21	14	
0.72	0.49	gamma-HCH	3.69	3.3	1995	99.0	240	7	3.5	3.9	>37	1.5	100.00	8.7E-17	6.4	80.89	0.8	8.7E-17	0.0E+00	65	
0.72	0.49	HCB	5.73	4.6	39811	99.0	969	8356	2557	58.2	>37	3.81	0.1	100.00	8.5E-65	105.6	0.00	0.0	8.5E-65	2.3E-70	1005
0.72	0.67	hexachlorobutadiene	5.73	4.5	31623	99.0	28	112	720	46.7	>37	4.75	0.1	100.00	0.0E+00	84.5	0.00	0.0	0.0E+00	0.0E+00	805
1	-0.21	indeno(1,2,3-cd)pyrene	7.66	6.77	5888437	99.0	730	2400	2920	1738.3	0.13	0.0	100.00	0.0E+00	3495.5	0.00	0.0	0.0E+00	0.0E+00	31365	
1	0	lohexol	-3.05	#N/A	0	99.0	1	#N/A	#N/A	1.0	>37	6.0	100.00	0.0E+00	1.0	>100	12.5	0.0E+00	#N/A	14	
1	0	lomeprol	low	#N/A	1	99.0	0	#N/A	#N/A	1.0	>37	6.0	100.00	0.0E+00	1.0	>100	12.5	0.0E+00	#N/A	14	
1	0	lopamidol	-2.42	#N/A	0	99.0	58	140	#N/A	1.0	>37	6.0	100.00	1.1E-17	1.0	>100	12.5	1.1E-17	8.0E-21	14	
1	0	lpropione	-2.05	#N/A	0	99.0	0.7	#N/A	#N/A	1.0	>37	6.0	100.00	0.0E+00	1.0	>100	12.5	0.0E+00	#N/A	14	
1	0	MCCP	0.1	#N/A	1	3.8	1E+99	4400	#N/A	1.0	>37	6.0	100.00	1.0E+02	1.0	>100	12.5	1.0E+02	7.9E+01	14	
1	0	MTBE	1.07	#N/A	12	99.0	1E+99	1E+99	#N/A	1.0	>37	5.9	100.00	1.0E+02	1.0	>100	12.1	1.0E+02	1.0E+02	14	
#N/A	-0.21	naphthalene	3.37	3.11	1288	99.0	0.5	25	258	2.9	>37	2.1	100.00	0.0E+00	4.5	>100	1.7	0.0E+00	0.0E+00	47	
#N/A		o-chloroaniline	1.926	2.0	100	99.0	50	#N/A	#N/A	1.1	>37	5.2	100.00	5.8E-24	1.3	>100	9.6	5.8E-24	#N/A	17	
0.904	-0.55	PCB-180	6.56	#N/A	240016	99.0	1E+99	1E+99	3300	305.6	0.73	0.0	100.00	1.0E+02	565.4	0.00	0.0	1.0E+02	1.0E+02	5318	
0.904	-0.55	PCB-28	5.6	4.61	40738	99.0	1E+99	1E+99	3300	59.5	3.73	0.1	100.00	1.0E+02	108.0	0.00	0.0	1.0E+02	1.0E+02	1027	
0.82	0.02	pentachlorophenole	5.12	4.52	33113	4.7	23	42	1520	3.3	>37	1.8	100.00	0.0E+00	1.6	>100	4.3	0.0E+00	0.0E+00	40	
1	-0.21	phenantrene	4.56	4.36	22909	99.0	28	64	800	34.3	6.47	0.2	100.00	0.0E+00	61.8	0.00	0.0	0.0E+00	0.0E+00	590	
1	0	Phenazone	0.38	#N/A	2	99.0	2	1460	#N/A	1.0	>37	6.0	100.00	0.0E+00	1.0	>100	12.4	0.0E+00	0.0E+00	14	
0.72	0.67	simazine	2.83	2.12	132	1.7	90	10	5	1.0	>37	6.0	100.00	6.1E-11	1.0	>100	12.5	6.1E-11	6.3E-55	14	
1	0	Sulfamethoxazole	0.89	#N/A	8	6	1E+99	30	#N/A	1.0	>37	6.0	100.00	1.0E+02	1.0	>100	12.5	1.0E+02	2.0E-13	14	
0.72	0.49	toluene	2.79	2.31	204	99.0	4	56	6	1.3	>37	4.6	100.00	0.0E+00	1.5	>100	7.6	0.0E+00	0.0E+00	19	
0.989	-0.346	trichloroethene	2.35	2.2	158	99.0	360	1653	18	1.2	>37	4.9	100.00	1.7E-02	1.4	>100	8.4	1.7E-02	7.1E-03	18	
1	-0.317	xylene	3.17	#N/A	713	99.0	7	180	360	2.1	>37	2.9	100.00	0.0E+00	2.9	>100	3.4	0.0E+00	0.0E+00	32	

De resultaten van berekening zijn gepresenteerd in Tabel 6.6. Daarbij de kanttekening dat de berekende outputactiviteit op nul is gezet als $(R \text{ tH}_2\text{O} / T_{1/2}) > 300$.

De belangrijkste conclusies zijn de volgende:

- Van de 45 OMIVE breken er slechts 7 snel door (bijna zo snel als water) en met hoge concentratie, rond inputniveau. Dit zijn derhalve vrijwel conservatieve stoffen ($T_{1/2}$ zeer hoog en R dichtbij 1.0). Het betreft: 1,2-dichloorpropan, 1,4-dioxaan, bentazon, carbamazepine, diglyme, mcpp en mtbe.
- De overige OMIVE hebben of (i) een zeer hoge R en persistentie waardoor zij uitermate traag maar wel voor 100% doorkomen zoals de PCB, of (ii) een zeer hoge R en beperkte persistentie waardoor zij uitermate traag en vrijwel onmeetbaar (<0.001%) doorkomen zoals de zwaarder PAK, of (iii) een lage R maar hoge mate van afbreekbaarheid zodat zij snel maar vrijwel onmeetbaar (<0.001%) doorkomen zoals vele chlooralkanen, chlooralkenen, chloorbenzenen en pesticiden.
- De bodempassage vormt derhalve een behoorlijk robuuste barriere tegen vele OMIVE (en AMIVE, zie § 6.5), dankzij de relatief lange verblijftijden in de aërobe (= suboxische) aquiferzone 1 (>10 jaar) en anaërobe (= anoxische) aquiferzone 2 (>4 jaar), en dankzij de serieschakeling van eerst suboxisch en dan anoxisch. Daarbij geldt het grote voordeel dat elk redoxmilieu zijn eigen groep aan stoffen kan afbreken (Stuyfzand & Lüers 1996).

Voor belangrijke conclusies en aanbevelingen m.b.t. de monitoring → § 7.5.

6.7 Uitbreiding van TRANSATOMIC

TRANSATOMIC (version 1.2) is een Excel program ontwikkeld door Stuyfzand in 2012. TRANSATOMIC is het acronym voor TRANS Aquifer Transport Of MICropollutants.

Met TRANSATOMIC worden concentratieveranderingen berekend met analytische oplossingen, voor hoofd-kationen, spore-elementen, radionucliden en organische microverontreinigingen tijdens bodem/aquifer passage en, indien van toepassing, ook tijdens verblijf in een infiltratiebekken of riviercompartiment alvorens daar te infiltreren. De geadresseerde processen omvatten volatiliseren, filtratie, advectie, dispersie (+ diffusie), lineaire sorptie en eerste orde afbraak (door hetzij radioactief verval hetzij biodegradatie), in een stationaire situatie. Het betreft transport langs 1 stroombaan, is dus 1D.

De volgende inputsignalen zijn mogelijk: constant, stap, puls, sinusoidaal en Gauss. De output bestaat uit een concentratie-tijd plot op bepaalde afstand, of een concentratie-afstand plot op zeker moment, of een tabel die het gedrag toont van meerdere microverontreinigingen voor een bepaalde set condities (zoals Tabel 6.5 en 6.6).

TRANSATOMIC is gebruikt bij de in § 6.5 gepresenteerde voorspelling van positief geladen kationen, spore-elementen, radionucliden en OMIVE, bij een stapinput.

De in § 6.3 en 6.4 gepresenteerde voorspelling van het concentratieverloop in een put of puttenveld gaat in zekere zin verder. Het betreft immers een quasi 3D voorspelling dankzij de HRC, laat een variabel/vrij te kiezen inputsignaal toe en biedt oplossingen voor een 2-lagen opbouw van de ondergrond inclusief uitlogingseffecten.

Het is derhalve gewenst dat TRANSATOMIC wordt uitgebreid met de HRC berekening incl. tritium ijking, en de in § 6.3 en 6.4 gepresenteerde voorspellingsmethoden, opdat een 'all-in-one' pakket ontstaat dat inzetbaar is voor waterwinplaatsen met freatische puttenvelden, kunstmatige infiltratie of oeverfiltratie.

7 Regels voor optimalisatie van het bestaande monitoringprogramma

In dit hoofdstuk worden conclusies en aanbevelingen gedestilleerd uit de onderzoeksresultaten die in Ch.2-6 zijn gepresenteerd. Daarbij worden algemene, voor freatische puttenvelden geldende en specifieke voor Noordbargeres geldende regels onderscheiden. Alvorens dit te doen, volgt in § 7.1 een aantal algemeen geldende regels voor optimalisatie, die gedeeltelijk aan de literatuur zijn ontleend.

7.1 Enkele algemeen geldende regels

Over grondwaterkwaliteitsmeetnetten en meetnetoptimalisatie is veel geschreven, zowel nationaal (zie b.v. Van Duijvenbouden 1987, Baggelaar 1992, Baggelaar & Van Beek 1995, Stuyfzand, 1996, 1998, Puijker & Van Beek 1999, Van Beek & Puijker 2001, Broers 2002), als internationaal (zie b.v. Meyer & Brill 1988, Ward et al. 1990, Hudak & Loaigica 1993, Chilton & Foster 1996). Het voert te ver om dit allemaal samen te vatten, ik beperk me tot enkele algemene regels die daaruit en uit eigen ervaring volgen.

7.1.1 Geohydrochemische screening

Deze methode (Stuyfzand, 1996, 1998) bestaat uit de 3 in Bijlage 4 nader omschreven stappen, waarbij de volgorde afhankelijk is van de huidige situatie. Het betreft screening (stap 1), kartering van de grondwaterkwaliteit (stap 2; zie voor de bepaling van de hydrochemische facies ook Bijlage 2) en kartering van de bodemkwaliteit (stap 3). Ter toelichting volgt in onderstaande enige informatie over screeningsparameters en zuur- en redoxgrenzen.

Een *screeningsparameter* is een eenvoudig en goedkoop analyseerbare stof die bij een bepaalde concentratie de aanwezigheid suggereert van 1 of meerdere stoffen die lastig (duur) te analyseren zijn. Alleen als de screeningsparameter positief wordt bevonden, dan volgt een uitgebreide analyse op de daarvan afhankelijke groep parameters, en anders niet. Belangrijke soorten screeningsparameters zijn in Tabel 7.1 opgenomen.

Men dient zich echter te realiseren dat screening op basis van 1 of enkele parameters de normale monsterrouting in het laboratorium beïnvloedt (ingewikkelder maakt), en dat deze screening minder effectief wordt waar multicomponentanalyse wordt toegepast zonder extra kosten voor die parameters waar men niet om gevraagd heeft. Waar men gebonden is aan wettelijke verplichtingen conform het Waterleidingbesluit (1984), valt minder te verdienen met screeningsparameters, maar dat betreft meestal slechts enkele meetpunten (vooral het drink- en ruwwater).

In geval van Noordbargeres vormen enkele screeningsparameters ook bruikbare handvatten voor inperking of uitbreiding van het analysepakket. Een korte toelichting voor enkele volgt in onderstaande:

- Analyse van 1,4-dioxaan heeft in feite alleen zin op (geïnfiltreerd) Oranjekanaalwater, te herkennen aan relatief hoge concentraties ^{18}O , B en Mo en een hoge Cl/Br-verhouding (nader onderzoek naar beste multitracerset gewenst). De screening op herkomst heeft vooral zin als er standaard een ICP-MS/OES scan wordt doorgevoerd (aanbevolen; → § 7.1.5).

- Het heeft alleen zin om de analyse van diverse spore-elementen afhankelijk te stellen van de pH, als een ICP-MS/OES scan (aanbevolen) *niet* wordt doorgevoerd.
- OMIVE die in suboxisch of anoxisch milieu voldoende snel afbreken krijgen in Noordbargeres in principe voldoende tijd (5-100 jaar) om daadwerkelijk af te breken. Het diep anoxische milieu komt slechts in beperkte mate voor en biedt derhalve beperkt soulaas. Probleem is natuurlijk dat de afbraaksnelheid, zoals doorgaans beschikbaar in handboeken, alleen geldt voor de onderzochte omstandigheden, welke fors kunnen afwijken van de lokale condities. Zo kent de oxische bouwvoor een hogere (micro)biologische activiteit dan de onderliggende onverzadigde en verzadigde zone. Metaboliëten vormen een apart aandachtspunt vanwege gebrek aan informatie. Voor spore-elementen waaronder de zware metalen zijn eenduidiger voorspellingen te doen in combinatie evenwel met de pH.
- Het oude grondwater (b.v. volgens ³H datering, hydrologische berekening of zichtbaar aan de natuurlijke samenstelling) behoeft geen analyse op OMIVE. Dit geldt in intrekgebied Noordbargeres voor de meeste watermonsters uit aquiferlaag G of meer specifiek voor monsters type N (diep natuurlijk; Tabel 5.5). Analyse op macroparameters en spore-elementen blijft nuttig, vooral aan de bovenzijde om de verdringing door verontreinigde watersoorten te bewaken, en aan de onderzijde om eventuele opkegeling van brak grondwater te signaleren.
- Er is weinig ervaring met toepassing van AOX, EON en HPLC/UV-fingerprint als screeningsparameters voor Noordbargeres. Daarbij rijst de vraag of en hoeveel op kosten bespaard wordt ten opzichte van 1-2 OMIVE-multicomponentanalyses.

Zuur- en redoxbarrières zijn overgangszones in het aquifersysteem waar uitloging plaats vindt van resp. zuurbuffers (met name kalk) dan wel redoxbuffers (met name organische stof en pyriet), en waar bijgevolg stoffen worden tegengehouden en mobiliseren. In veruit de meeste gevallen schuiven beide grenzen met verschillende snelheid traag op richting pompputfilters (zie ook § 6.4). Dat opschuiven dient goed in de gaten gehouden te worden, omdat dit grote consequenties heeft voor het puttenveld. Meetpunten net onder deze grenzen zijn dus belangrijke kwaliteitsbewakers.

TABEL 7.1. Overzicht van bruikbare screeningsparameters die, indien positief, uitnodigen tot uitgebreider of beperkter onderzoek op de aangegeven parameters. Gewijzigd naar Stuyfzand (1998). Voor meer details over invloed van redoxklasse zie Tabel 7.2-7.3.

SCREENINGSPARAMETERS:	CONCLUSIES
Herkomst (detectie via Cl, δ ¹⁸ O, Cl/Br; EJ)	Analyseer specifieke OMIVE en SEn alleen in specifieke wateren (Na-dikegulac en chloor(iso)propylethers in Rijnoverfiltraat; Ag, Hg, Mo, Pb, Se, Sn, U in zuur mijnwater)
Cl, SO ₄ , NO ₃ , Ca, K	Toename kan wijzen op landbouweffecten of stedelijke verontreiniging, en daardoor ook op bepaalde OMIVE en SEn
pH	Als pH>6, analyseer niet op Al, Be, Lanthaniden, Sc, Ti. als pH<4,5, analyseer niet op As, Mo, Se, W
Redox klasse (via O ₂ , NO ₃ , SO ₄ , CH ₄ , Fe, Mn; EJ)	Als sulfaatreducerend of methanogeen, analyseer niet op: Ag, Cd, Co, Cu, Hg, Ni, Pb, Se, Zn, AOX, VOX, chloor-alkanen, chloor-alkenen, atrazin, simazin, diuron, AMPA.
Ouderdom (bepaling met ³ H, ¹⁴ C, Cl, CFK; EJ)	Als pre-industrieel (>150 j), analyseer niet op OMIVE; als pre-tritium (>45 j), analyseer niet op recent ontwikkelde OMIVE zoals CFK en bep. pesticiden of geneesmiddelen.
AOX en EON #1	Als '<MDL', analyseer niet op specifieke OMIVE zonder specifieke redenen (EJ*).
HPLC/UV-fingerprint #2 (EJ)	Als aantal c.q. oppervlak van pieken op 'humeuze bul' voldoende groot, dan nader onderzoek op (specifieke) OMIVE
Indicatieve analyse OMIVE via Immunoassays 3	Als '>MDL' kwantificeer dan nader en analyseer eventueel op andere OMIVE.
Meest mobiele, persistente OMIVE (EJ)	Als niet aanwezig, analyseer niet op de minder mobiele / persistente verbindingen.
Meest mobiele zware metalen (EJ)	Dito. Als b.v. Ni insignificant (EJ), analyseer niet op Pb, Cu, Zn, Cd.
Geohydrochemische tweelingen	Analyseer op de moeilijk-te-analyseren stof alleen als de makkelijk-te-analyseren stof significant is (EJ): Ca-Sr, Cl-Br, K-Rb, Na-Li, PO ₄ -As, SiO ₂ -Ge, Zn-Cd.
Geohydrochemische antagonisten	Dito, echter als insignificant (EJ): Ca-F, Fe(II)-O ₂ , NO ₃ -Fe(III), O ₂ -CH ₄ , OH-Al.
OMIVE = Organische Microverontreinigingen; EON = met petroleum-ether extraheerbare organostikstof EJ = door Geohydrochemisch Expert Judgement	SEn = spore-elementen #1 en #2: zie Stowa 1996. AOX = adsorbierbare organohalogenen (aan actieve kool)

Er zijn bij de bodempassage 3 redoxbarrières te onderscheiden: de (sub)oxische, anoxische en diep anoxische (Stuyfzand & Lüers, 1998). Elke barrière houdt een bepaalde groep in water opgeloste stoffen in meer of mindere mate tegen (Tabel 7.2- 7.3). Het redoxmilieu bepaalt dus in belangrijke mate het gedrag van vele stoffen tijdens bodempassage (Tabel 7.2). Daarmee vormt de relatief goedkope bepaling van het redoxmilieu op basis van de in bijlage 2 genoemde parameters, een goede screeningsparameter.

TABEL 7.2. Indeling van stoffen (die in oppervlaktewater vóór infiltratie zijn aangetoond) in 12 stofgroepen op basis van gedrag tijdens bodempassage als functie van het redox milieu (Stuyfzand & Lüers 1998).

NB: Onderzoek aan gedrag van andere OMIVE rechtvaardigt een update van deze tabel.

Stof-gedragstype (1-4)	1	2	3	4
Redox-milieu (A-D)	1	2	3	4
	1	2	3	4
	Sterke en langdurige verwijdering (>70%) ($T_{1/2} < 30$ d, en/of $R \geq 100$)*	Matige of tijdelijke verwijdering (20-70%) ($T_{1/2} = 30-120$ d en/of $R = 10-100$)*	Vrijwel geen verwijdering (<20%) ($T_{1/2} > 120$ d en/of $R < 10$)*	Toename
A. (sub)oxisch**	Groep 1A: NH ₄ BTEX, THM (excl. chloroform), DOP-sorbofuranose, NTA? MCA, lactonen, PCF?, palmitinezuur, MCP, MCPA	Groep 2A: O ₂ , PO ₄ , As, Cd, Co, Cu, Ni, Sb, Se, Te, V, Zn chloroform, simazin, dinoseb tri(iso)butylfosfaat, tetraglyme?, TCB, EDTA?	Groep 3A: O ₂ , NO ₃ 1,2-dichloorethaan, tri, tetra, per, trichloorethaan AMPA, atrazin, diuron, metolachloor t-butylfenol, trifenylfosfineoxyde, 2,4-DCA, N-methylbenzamide?, tetrachloororthohtaalzuur	Groep 4A: SO ₄ [@] , As [@]
B. anoxisch**	Groep 1B: O ₂ , NO ₃ , chloraat TCFZ, palmitinezuur, PCF?, THM, tetra, trichloorethaan, AMPA, atrazin, simazin, diuron, dinoseb	Groep 2B: As, Cd, Co, Cu, Ni, Sb, Se, Te, V, Zn tetraglyme?, per, TCB	Groep 3B: SO ₄ , 1,2-dichloorethaan, 1,2-dichlooretheen, tri, MCPA, MCP, EDTA?, t-butylcresol, tri(iso)butylfosfaat, trifenylfosfineoxyde, lactonen, DOP-sorbofuranose, diacetonglucose	Groep 4B: Fe, Mn, NH ₄ , PO ₄ , As
C. diep anoxisch**	Groep 1C: O ₂ , NO ₃ , SO ₄ , chloraat Cd, Co, Cu, Ni, Sb, Se, Te, Zn THM, dinoseb, t-butylcresol, AMPA, atrazin, simazin, diuron, trifenylfosfineoxyde, tetra, TCFZ, trichloorethaan, per tri(chloorpropyl)fosfaat	Groep 2C: SO ₄ difenylsulfon 1,2-dichloorethaan 1,2-dichlooretheen	Groep 3C: palmitinezuur, DOP-sorbofuranose diacetonglucose, EDTA?, MCPA, MCP, benzeen, xyleen, tri(iso)butylfosfaat, dimethylaniline, lactonen	Groep 4C: H ₂ S, CH ₄ , Fe, Mn, NH ₄ , PO ₄ , DOC, I
D. (sub)oxisch t/m diep anoxisch (A-C)	Groep 1D: zweev. stof, lanthaniden, actiniden, Al, Be, Cr, Cs, Hg, Pb, chloriet meeste PAK, PCB en OCP, bromoform, DCA, nitrobenzeen, nitrotolueen, chloornitrobenzeen, pathogenen	Groep 2D: K, B, Ba, F, Li, ⁹⁰ Sr diglyme	Groep 3D: Cl, HCO ₃ , Na, K, Ca, Mg Br, F, ³ H, ² H, ¹⁸ O, diglyme, bentazon, DEET?, CAE, N-butylbenzeensulfonamide trichloorethylfosfaat, joodcyclo- hexaan, 1,3,3-trimethylxindool	Groep 4D: Ca, HCO ₃ , SiO ₂

BTEX = benzeen, toluen, ethylbenzeen en xyleen; CAE = chlooralkylethers; DCA = dichlooraniline; DCB = dichloorbenzeen; DOP-sorbofuranose = di-ortho-propylideen-1-sorbofuranose; MCA = (mono)chlooraniline; OCP = organochloorpesticiden; PCF = pentachloorfenol; TCB = trichloorbenzeen; TCFZ = tetrachloororthohtaalzuur; THM = trihalomethanen.
 @ = alleen indien er pyriet oxydeert; *: $T_{1/2}$ = halveringstijd; R = retardatiefactor; **: Criteria voor redox milieus: (Sub)oxisch: indien $O_2 \geq 1$ of $NO_3 \geq 1$ mg/l; Anoxisch: indien $O_2 < 0,5$ en $NO_3 < 0,5$ mg/l, $SO_4 \geq 0,9$ (SO_4)₀ en $CH_4 < 0,5$ mg/l; Diep anoxisch: indien $O_2 < 0,5$ en $NO_3 < 0,5$ mg/l, $SO_4 < 0,9$ (SO_4)₀ of $CH_4 > 0,5$ mg/l. (SO_4)₀ = oorspronkelijke sulfaat-concentratie (te berekenen via lineaire regressie met Cl⁻).

7.1.2 Prioritering OMIVE op basis van stoffeigenschaften, toepassing en aantreffen

Prioritering van OMIVE voor de ontwikkeling van analysemethoden en voor waterkwaliteitsbewaking, is een belangrijke tak van onderzoek o.a. bij CTB, KWR en RIVM. Belangrijke criteria daarbij zijn: de stoffeigenschaften (vervluchtiging, opname door gewassen, mobiliteit, afbreekbaarheid, toxiciteit etc.), omvang van gebruik / toepassing / lozing, en het aantreffen (concentratie en frequentie) in water (hier grondwater).

Gustafson (1989) stelde de Groundwater Ubiquity Score (GUS) voor om de uitloogbaarheid van pesticiden naar het grondwater te voorspellen. Deze wordt berekend als volgt:

TABEL 7.3. Overzicht van het gedrag van 14 stoffen (excl. metaboliten) tijdens bodempassage in kunstmatige infiltratiesystemen met geschatte halfwaardetijd als functie van het redox milieu (Stuyfzand et al. 2007).

OMP		Removal process			T _{1/2} [d] †		
		Basin##	Filtration	Sorption	Biodegr	(Sub)oxic	Anoxic
Phac	Carbamazepine	?	no	R=2.2 \$	<10	9999	>7300
	Phenazone	?	no	no	0-100	2	>> 730
	Sulfamethoxazole	?	no	no	0-70	9999	30
X-ray	Amidotrizoic acid	45	no	no	0-70	9999	25 - 55
	Iohexol	0-40	no	no	>90	<1 - <7	no data
	Iomeprol	0-20	no	no	>90	<0.5 - <6	no data
	Iopamidol	30	no	no	0-90	25 - 85	140 - 9999
	Iopromide	20-40	no	no	>90	0.7 - <7	no data
Var	1,4-Dioxane	prob	no	no	<20	9999	9999
	Diglyme	?	no	no	<20	9999	9999
	MTBE	prob	no	no	0-70	9999?	9999?
Pest	Bentazone	?	no	no	<20	?	>2200
	Carbendazim	?	no	no	0-90	9999	25
	MCPP	?	no	no	<20	?	>2200

: removal by volatilization or photolysis [%];
\$ = in dune sand

prob = probable but not quantified
† : 9999 = >365 days probably, hard to quantify

$$GUS = \log(DT_{50}) (4 - \log(K_{OC})) \quad (7.1)$$

waarin: DT_{50} = halfwaardetijd in de bodem / bouwvoor [dagen]; K_{OC} = distributiecoëfficiënt tussen organische koolstof en water [L/kg].

TABEL 7.4. Overzicht van geprioriteerde bestrijdingsmiddelen die onder specifieke omstandigheden vaak, soms of niet zijn aangetroffen (gewijzigd naar Puijker & Van Beek 1999). Vaak = primaire risicostof, noodzakelijkerwijs onderdeel van monitoring; Soms = secundaire risicostof, eventueel aanvullend onderdeel van monitoring; niet = geen echte risicostof want niet aangetroffen en derhalve niet noodzakelijk onderdeel van monitoring. GWT = grondwaterstand. NB: update van Tabel gewenst.

Situatie / Landgebruik	Redox milieu	GWT	Risicostoffen	
			Primair	Secundair
Infiltrerend oppervlaktewater	Anoxisch	Ondiep	bentazon, MCPP, MCPA, DEET, dikegulac	2,4-D, 2,4-dinitrofenol, AMPA, chloortoluron, diuron, DNOC, isoproturon, metobromuron, metolachloor, metoxuron, propachloor
Spoorwegen op zand	vooral (sub)oxisch	Diep	bromacil, BAM	amitrol
Stedelijke gebieden	(sub)oxisch t/m anoxisch		BAM, MCPA, MCPP	2,4-D, amitrol, bentazon, diuron, linuron, monolinuron, simazin + metabolieten
Grasland en maïs	vooral anoxisch		bentazon, MCPP, MCPA	atrazin + metabolieten, simazin + metabolieten, methabenzthiazuron, metolachloor, propachloor
Bouwland (o.a. aardappels, granen)	(sub)oxisch t/m anoxisch		1,2-dichloorpropaan, MITC, pendimethalin	aldicarbulsulfon, aldicarbulsulfide, chloortoluron, diuron, ETU, isoproturon, methabenzthiazuron, propachloor, thiofanoxsulfide, trichloorpropaan

Prioritaire middelen met geen / weinig risico op overleving van bodempassage:

anthranilzuurisopropylamide (= metaboliet bentazon), carbamaten (diverse), chloorthalonil, dalapon, dichlobenil, dinoseb, dinoterb, glyfosaat, glufosinaat, HIT, lindaan, organofosforpesticiden (diversen), oxadixyl, trichloorazijnzuur

Stoffen met GUS >2.8 zijn volgens Gustafson (1989) de 'leachers', stoffen met GUS <1.8 de 'non-leachers', en stoffen met tussenliggende waarde (1.8-2.8) zijn de mogelijke uitspoelers.

Puijker & Van Beek (1999) pasten de GUS-index toe in combinatie met zowel pesticidengebruikscijfers in Nederland als het aantreffen in grondwater binnen intrekgebieden van Nederlandse, kwetsbare puttenvelden, om aan te geven waar en onder welke omstandigheden bestrijdingsmiddelen in Nederland een bedreiging vormen voor grondwater dat wordt onttrokken voor de drinkwaterproductie. Het resultaat van hun omvangrijke studie is samengevat in Tabel 7.4, omdat het nuttige richtlijnen bevat. Voor aanvullende informatie zie b.v. Baggelaar (1992).

7.1.3 Onderscheid in homogene deelgebieden

Homogene deelgebieden binnen het intrekgebied kennen een vergelijkbaar landgebruik en bodemtype, een overeenkomstige hydro(geo)logische en hydrogeochemische stratificatie, en een identieke herkomst van het daarbinnen infiltrerende water. Elk homogeen deelgebied dient, mits voldoende relevant (d.w.z. merkbaar bijdragend aan de kwaliteit van het ruwwater, vroeg of laat), 1 of meerdere waarnemingspunten te hebben in het meetnet.

Binnen het intrekgebied van Noordbargeres worden de volgende homogene deelgebieden onderscheiden, met tussen haakjes 1 of meerdere relevante/representatieve waarnemingsput(ten) met als code 'put-nr' indien meerdere filters, en 'putnr-diepte' indien specifieke filter (diepte in m-NAP):

- overwegend landbouw met keileem in de ondiepe ondergrond (N8/N9, 25);
- dito zonder keileem in de ondergrond (18-5, 23);
- overwegende stedelijke beïnvloeding met keileem in de ondergrond (O5, 30/31, 20, 21);
- overwegend infiltratie van oppervlaktewater uit het Oranjekanaal zonder keileem in de ondergrond (N4-16, N4-24, 23-35, 22-10, 22-20, 18-17, 18-27); en
- volkomen natuurlijk, oud grondwater (17-40, 18-41, 21-56, 23-45).

Alle in HGC opgenomen watermonsters uit de meetronde Vromans van 2010 en de exploratieronde van 2011 zijn op de in Tabel 5.5 onderscheiden typen voedingswater geklassificeerd.

7.1.4 Meetfrequentie

De meetfrequentie dient afhankelijk te zijn van de filterlengte, positie van het meetpunt t.o.v. zuur- en redox-grenzen en afstand tot nabije watersoorten (zoals opkegelend fossiel brak grondwater of infiltrerend kanaalwater), de totale en residuele reistijd, gesignaleerde kwaliteitsproblemen, waargenomen trends op het meetpunt en de gewenste nauwkeurigheid van te detecteren trends. Deze set determinanten is te complex om in de praktijk te hanteren.

Waarnemingsputten

Om wille van de eenvoud wordt als algemene vuistregel een meetinterval Δt_{SAMP} [jaar], voor waarnemingsfilters met lengte $L > 0.5$ m en met een totale reistijd (tijdens winning; $t_{\text{TOT-1}}$) > 1 jaar (dus alle filters van Noordbargeres), ten behoeve van de uitgebreide waterkwaliteitsbewaking (exploratieronde) van een puttenveld, voorgesteld volgens:

$$\Delta t_{\text{SAMP}} = (t_{\text{RES}}^{0.25} + t_{\text{TOT-1}}^{0.5})(0.5 L) \quad (7.2)$$

Hiermee komen we voor het bestaande meetnet van Noordbargeres met $L = 2$ m op berekende meetintervallen van 4 tot 8 jaar in aquiferzones 1-2 (bovenin 4, onderin 8), en 8-16 jaar in aquiferzone 3 (voor elk meetpunt afzonderlijk → [Model Noordbargeres.XLSX](#)). Dat sluit voor

aquiferzones 1-2 gemiddeld goed aan bij de meetfrequentie van de exploratieronde van eens per 6 jaar. Voor aquiferzone 3 kan de frequentie hiervan dus omhoog, b.v. naar 1x/12 jaar.

Naast de uitgebreide exploratieronde loopt een jaarlijks toetsingsonderzoek (§ 2.1), waarbij vrijwel alle filters van alle waarnemingsputten behorende tot het meetnet geanalyseerd worden op de meeste of een beperkt aantal (pH, temp, EC, HCO₃, NO₃) macroparameters en geen of een beperkt aantal kritische OMIVE. Deze frequentie zou meer afhankelijk gemaakt kunnen worden van de reistijden, b.v. door hantering van jaarlijks in zone 1, tweejaarlijks in zone 2 en vierjaarlijks in zone 3. Daarbij nog 4 kanttekeningen: (i) het beperkte macroparameterpakket verdient uitbreiding met Cl en SO₄ (eventueel Cl te berekenen vanuit som der anionen en EC); (ii) ook de 3 diepste filters in WP21 dienen mee te lopen in het programma om zicht te krijgen op de veranderende indringdiepte van antropogeen beïnvloed grondwater en op eventuele verzilting vanuit de diepte; (iii) te overwegen valt om in het epicentrum van de winning een zeer diepe waarnemingsput te installeren ter verkenning en bewaking van enerzijds de veranderende indringdiepte van antropogeen beïnvloed grondwater en anderzijds de ligging van het zoet/zout grensvlak i.v.m. risico van verzilting op de lange termijn. Om opkegeling van diep zout grondwater tijdig te ontwaren, zouden waarnemingsfilters in enkele pompputten diep onder het putfilter geplaatst kunnen worden, b.v. wanneer een pompput vervangen moet worden; en (iv) onderzocht moet worden of aansluiting bij de landelijke of provinciale meetnetten oppervlaktewater (met name Oranjekanaal) en grondwaterkwaliteit zinvol en mogelijk is.

Pompputten, ruw en rein

De Nederlandse overheid stelt conform EU richtlijnen bepaalde eisen aan de waterkwaliteitsbewaking voor de openbare drinkwatervoorziening (LIT). Zo geldt er een wettelijke verplichting tot 3-maandelijks en jaarlijks onderzoek van het ruwwater indien dit uit grondwater bestaat, alsmede een wettelijke verplichting tot minimaal 37x/jaar onderzoek van het reinwater bij een productie van 4 Mm³/j (4+3x11).

Voor de afzonderlijke pompputten hanteert WMD de exploratieronde van eens per 6 jaar, plus een jaarlijks toetsingsonderzoek. Laatstgenoemde omvat de meeste macroparameters, t/m 2011 tevens enkele SEn, en een beperkte set OMIVE. Suggestie is om jaarlijks een ICP-MS/OES scan uit voeren, welke vele macroparameters en zeer vele SEn omvat.

7.1.5 Multicomponentanalyses

Analysekosten kunnen verminderen, indien slim gebruik wordt gemaakt van *multicomponentanalyses* (binnen 1 analysegang worden tegelijk, zonder extra kosten meerdere stoffen geanalyseerd). Voorbeelden hiervan zijn:

- de ICP-MS/OES scan van 40-72 in water opgeloste elementen (waaronder de hoofdkationen, Cl, Br, SO₄, PO₄, SiO₂, zware metalen, zeldzame aarden etc.). Hoewel de resultaten vaak als scan worden gezien, blijken zij zeer tot extreem nauwkeurig en daarom frequenter door laboratoria te worden ingezet. Kosten 30-200 euro/monster;
- de ionchromatografie (IC) in combinatie met conductometrie ter analyse van een groep anionen (Cl, Br, SO₄, NO₃, NO₂, F en PO₄). Kosten 40-100 euro/monster; en
- de in Bijlage 1 geliste analysepakketten voor groepen OMIVE.

7.2 Conclusies uit de hitlijst van stoffen en correlatiematrix (Ch.2 + § 5.2)

Hitlijst van geanalyseerde stoffen (Ch.2)

Het grote aantal analyses van organische microverontreinigingen (OMIVE) met als resultaat <MDL of niet-aantoonbaar (vooral klasse 0 in Tabel 2.2) zou een forse beperking van het analyseprogramma rechtvaardigen. Dat is evenwel te kort door de bocht, want (i) er is sprake van **multicomponent-analyses**, en (ii) wat in het verleden niet aantoonbaar was, kan in de toekomst wel verschijnen dankzij recente introductie, mobilisatie, trage doorbraak of verbeterde analysetechnieken.

Niettemin lijkt uitdunning mogelijk t.a.v. de zeer weinig/nooit òf erg laag scorende N-P bestrijdingsmiddelen, organochloorbestrijdingsmiddelen, N-methylcarbamaten en nitrofenolen (zie Bijlagen 1 en 3). Dit betekent niet dat zij 100% geschrapt dienen te worden, maar wel drastisch beperkt kunnen worden.

Anderzijds zijn er ook oude en nieuwe stoffen die (meer) aandacht behoeven. Een kleine greep: B, Br en ^{18}O (multitracing), $^3\text{He}/^3\text{H}$ (datering), EDTA, perfluorverbindingen, kunstmatige zoetstoffen (acesulfaam-K en sucralose) en carbamazepine (Oranjekanaal en stad) etc.

Onderlinge verbanden volgens correlatiematrix (§ 5.2)

Zoals gesteld in § 5.2, zou het mooi geweest zijn, als de relatief kostbare analyse van OMIVE en spore-elementen (SEn) afhankelijk zou kunnen worden gesteld van een goedkoop meetbare screeningsparameter zoals de EC, pH, Cl of NO_3 . De correlatiematrix in Tabel 5.3 toont dat dit goed werkt voor de pH en SEn (hogere trefkans voor positief geladen SEn bij $\text{pH}<6$, en dan juist lagere trefkans van de oxyanionen zoals arsenaat, chromaat, molybdaat en vanadaat).

Voor de OMIVE geldt evenwel dat screening hierop niet werkt, en dat alleen CH_4 of DOC bruikbaar lijken: Als zij een hoge concentratie hebben, dan zijn enkele OMIVE (en 2 spore-elementen) waarschijnlijk aantoonbaar, namelijk de positief correlerende SEn B en V, en de volgende OMIVE, in volgorde van afnemende correlatiecoëfficiënt, biphenylether, tetrahydrofuraan, ethofumesaat, carbendazim, chloridazon, bentazon, MCPP en glyfosaat. Van alleen carbendazim is bekend dat de afbreekbaarheid in diep anoxisch milieu (hoog CH_4) afneemt, van de overige componenten lijkt vooral sprake van een schijnrelatie, omdat de verhoogde concentraties CH_4 en DOC corresponderen met type C (Oranjekanaalwater).

7.3 Conclusies uit de stratificatie-analyse en hydrologische systeemanalyse (Ch.3-4)

Stratificatie-analyse (Ch.3)

De hydrogeologische, geochemische en hydrochemische opbouw van de ondergrond laat een vrijwel horizontale stratificatie zien van 3 aquiferzones, waarbinnen 7 aquiferlagen (A-G). De belangrijkste verstoring van dit beeld schuilt in de aanwezigheid van enkele meters keileem nabij maaiveld, globaal beperkt tot de oostelijke helft van het studiegebied. Deze laag zorgt voor opharding van percolerend bodemvocht/grondwater en een relatief sterke sorptie en afbraak van diverse OMIVE.

Dit beeld wordt zoals gebruikelijk lokaal verstoord door stoorlaagjes, die niet alleen hydrologisch maar ook chemisch kunnen storen. Zo bestaat het vermoeden dat chemische putverstopping van enkele pompputten samenhangt met lithologische onregelmatigheden (Van der Moot, mond. meded.).

De ondiepe lagen A-C (tot 10 m-NAP) zijn grotendeels uitgeloozd, (sub)oxisch en kwetsbaar voor verontreiniging. Monitoring dient hier dus breed explorerend te zijn, nieuwe stoffen hebben hier de hoogste trefkans.

In de middeldiepe lagen D en E (10-26 m-NAP) wordt het deels zure en grotendeels (sub)oxische grondwater omgezet in kalkrijker, anoxisch grondwater, dankzij reactie met kalk, organische stof en pyriet. Monitoring op doorslag van zuur, O₂, NO₃ en reactieproducten van genoemde bodembestanddelen verdient hier speciale aandacht.

Diepe laag F (26-38 m-NAP) is in zekere zin de racelaag waaruit de bulk van het grondwater gewonnen wordt. In deze laag wordt het natuurlijke diepe grondwater steeds meer verdrongen door licht verontreinigd grondwater uit de ondiepere lagen. Dit aspect en de herkomst (agrarisch gebied, stedelijk gebied of Oranjekanaal) verdienen hier in de monitoring bijzondere aandacht.

De diepste laag G (38-110 m-NAP) bevat nog grotendeels natuurlijk diep grondwater van uitmuntende kwaliteit. Belangrijke monitoringsaspecten zijn de verspreiding van licht verontreinigd water van boven, en de eventuele stijging of upconing van brak/zout grondwater van onder. Hoewel er sinds de start van de winning in 1937 geen verziltingsverschijnselen gesignaleerd zijn, wil dit niet zeggen dat er heel traag sprake is van een opkruipend grensvlak.

HRC en ondergrondse reistijden (Ch.4)

De hier op tritium geijkte en gevalideerde hydrologische respons curve (HRC) laat zien dat het opgepompte water gemiddeld ouder is dan eerdere schattingen op basis van 3D modellen zonder tritium validatie. Een belangrijke reden hiervoor is waarschijnlijk de grotere rol van de diepste aquiferlaag G, een wat hogere effectieve porositeit of lagere grondwateraanvulling.

Bijgevolg zijn de reistijden tot de filters van alle waarnemingsputten langer. De residuele reistijden in aquifer zone 2 (de racelaag) sluiten echter goed aan bij die van Eijsink (1985) maar pakken korter uit dan die van o.a. Foppen & Kremers (1997).

De HRC vervult een belangrijke rol in de voorspelling van de doorbraak (moment en maximum concentratieniveau) van verontreinigingen in het opgepompte ruwwater. De voorspellingen pakken derhalve gunstiger uit dan eerdere prognoses.

7.4 Conclusies uit de hydrochemische systeemanalyse (Ch.5)

Identificatie van mengende eindleden (§ 5.3-5.4)

Het opgepompte ruwwater bestaat uit 4 mengende eindleden, elk met een eigen samenstelling waarin specifieke verontreinigingen of tracers aanwijsbaar zijn. Het betreft: (A) door landbouw (agricultuur) beïnvloed water, (C) geïnfiltreerd oppervlaktewater, voornamelijk vanuit het Oranjekanaal; (N) natuurlijk, schoon, geïnfiltreerd regenwater; en (U) water geïnfiltreerd in stedelijk (urbaan) gebied.

Dankzij herkenning van het type eindlid is een toegesneden monitoring mogelijk, waarbij die verontreinigingen aandacht krijgen die er ook in verwacht worden.

Via 'trial and error' is berekend dat het ruwwater anno 2011 waarschijnlijk voor 37% bestaat uit A, 3% uit C, 50% uit N en 10% uit U. De aandelen van vooral A en U zullen fors toenemen ten koste van N, namelijk van 37 naar 69% A, en van 10 naar 22% U. Dit heeft gevolgen voor de monitoring (inspanning, accenten).

Ruimtelijke patronen in 2011 (§ 5.5)

Kartering van waterkwaliteitsparameters in bovenaanzicht en in circumsectie (2D profiel rond het puttenveld, met daarin de belangrijkste waarnemingsputten) leverde voor 2011 bevestiging op van de stratificatie-analyse, maar uiteraard meer details. Zo is de aanstroomrichting van eindleden A, C en U beter in beeld gekomen, en vastgesteld dat de bovengrens van eindlid N in 2011 ten opzichte van 1988/89 5-10 m dieper is komen te liggen ten gevolge van expansie van typen A, C en U.

Gunstig is de constatering dat (i) de NO_3 concentraties in aquiferlagen B-C gemiddeld lager zijn geworden, (ii) de NO_3 -redoxbarriere en de zuurbarriere in lagen D-E nog immer stand houden, (iii) Ni uit oxiderend pyriet vrij snel vastloopt in laag E, (iv) 1,2-dichloorpropaan en 1,4-dioxaan in lagen B en C bijna niet meer aantoonbaar zijn, en (v) 1,2-dichloorpropaan nauwelijks voorkomt waar keileem het aquifersysteem afdekt.

Deze constateringen bevestigen de waarde van het huidige meetsysteem, omdat bovenstaande constateringen inzicht geven in eventueel benodigde ingrepen in de monitoring (conclusie: geen intensivering nodig) of procesvoering (conclusie: geen aanvullende zuivering nodig op korte termijn).

Trendmatige ontwikkelingen (§ 5.6)

Trendmatige ontwikkelingen zijn afleesbaar uit ruimtelijke patronen (zie boven), maar nog beter uit tijdreeksen van de kwaliteitsontwikkeling in waarnemingsputten, pompputten en het ruwwater. Binnen het kader van dit project was alleen ruimte voor een snelle blik op ontwikkelingen in de ruwwaterkwaliteit.

Er is duidelijk sprake van een toenemende trend voor Cl, SO_4 , Ca, HCO_3 en Fe, niet voor de overige macroparameters en ook niet voor de spore-elementen c.q. zware metalen. De sterkste stijging geldt voor SO_4 , waarvan de ^{34}S massabalans aangeeft dat ongeveer 1/3 deel komt door pyrietoxidatie en 2/3 deel door een toegenomen atmosferische depositie en landbouw. Van de OMIVE vertoont 1,2-dichloorpropaan een mogelijk dalende tendens, 1,4-dioxaan een afname, en 1,2,3-trichloorpropaan een vrij stabiel niveau.

Voor de monitoring betekenen deze tendenzen dat er voor het huidige meetprogramma geen grote veranderingen nodig zijn.

7.5 Conclusies uit de hydrogeochemische massabalans (§6.1–6.2)

Identificatie en omvang van bodemreacties

Met R+ is de gemiddelde massabalans bepaald met ruwwater van Noordbargerres anno 2011 als output, met 50% diep, natuurlijk grondwater als bijmengsel en met gemiddeld ondiep grondwater anno 2011 in aquiferlaag B binnen het intrekgebied als input. Hieruit volgt dat kationuitwisseling (vooral adsorptie van Na, K en Fe, onder desorptie van Ca en Mg) kwantitatief de belangrijkste reactie is, gevolgd door de oxidatie van BOM (Bulk Organische Stof) en oxidatie van pyriet (FeS_2). Daarbij is de NO_3 reductie t.g.v. pyrietoxidatie 2.7 maal groter dan die door BOM. Dit geeft aan dat de rol van pyrietoxidatie aanzienlijk groter is dan vroeger gedacht.

Hoewel de oxidatie van pyriet in de aquifer zorgt voor significante toenames van As, Co, Ni en Zn, worden deze toenames weer teniet gedaan door sorptie, o.a. aan vers gevormd ferrihydriet.

Voor de monitoring betekenen deze bevindingen dat er voor het huidige meetprogramma geen grote veranderingen nodig zijn.

Uitloogsnelheid van de bodem

Met de berekende oplossing van mineralen volgens de hydrochemische massabalans, samen met de omvang van sorptie, is de uitloogsnelheid in aquiferlagen C en D (25 m dik) berekend met een geochemische massabalans. Daaruit volgt dat BOM waarschijnlijk het snelste uitloopt (11 m in 61 jaar), dan het kationuitwisselcomplex (9 m in 61 jaar), vervolgens pyriet (6 m in 61 jaar) en tenslotte kalk. De uitloogsnelheid van kalk kon niet goed worden vastgesteld omdat kwantificering ervan het opstellen van 2 gescheiden massabalansen vergt, n.l. één voor het oostelijk deel met keileem en één voor het westelijke deel zonder. De tragere uitloging van pyriet vergeleken met BOM, bevestigt dat de rol van pyrietoxidatie in het denitrificatieproces gaat toenemen.

Voor de monitoring betekenen deze bevindingen dat er voor het huidige meetprogramma geen grote veranderingen nodig zijn.

7.6 Conclusies uit de analytische transportberekeningen (§6.3–6.6)

Real-case voorspellingen met een variabel ingangssignaal

Voor de situatie van een bekend of geschat inputsignaal van opgeloste stof C is een analytische oplossing ontwikkeld ter voorspelling van het verloop van de ruwwaterconcentratie van een put(tenveld). Dit op basis van gegevens over de HRC, retardatiefactor van C, redoxafhankelijke halfwaardetijd van C en de constant veronderstelde uitloogsnelheid van het anoxische milieu dat een barriere vormt tegen oprukkend O_2 en NO_3 . De uitloogsnelheid volgt uit de chemische massabalans. De gepresenteerde methode is toegepast op tritium, 1,2-dichloorpropaan, 1,4-dioxaan en nitraat, met en zonder uitloging van aquiferlaag C+D. De verkregen resultaten wijken fors af van die verkregen voor NO_3 met VOORSP (Laeven 1991), 1,2-dichloorpropaan volgens Van der Moot (1991) en Beugelink (1987), en 1,4-dioxaan volgens Peeters et al. (1999). Zij passen echter veel beter bij de recente metingen, waarover genoemde auteurs niet beschikten. Als oorzaken vallen te noemen de langere reistijden volgens de met tritium geijkte HRC, de toepassing van redoxafhankelijke halfwaardetijden en de uitloging van de anoxische zone.

Voor de monitoring betekenen deze prognoses dat er voor het huidige meetprogramma geen grote veranderingen nodig zijn. De voorspelde NO_3 -doorbraak (Fig.6.7) kan evenwel leiden tot chemische putverstopping door $Fe(OH)_3$, omdat hetzij NO_3 zelf het in hoge concentraties aanwezige Fe^{2+} oxideert, hetzij meekomend O_2 . Ter bewaking en preventie van chemische putverstopping is een apart monitoringsysteem nodig, waarbij o.a. metingen van het specifieke debiet, stijghoogteverschillen binnen en buiten de put, camera-inspecties etc. nodig zijn.

De gepresenteerde methode smaakt naar verfijning en meer toekomstvoorspellingen.

Worst-case voorspelling met een stap-input

De ruwwaterkwaliteit is ook voorspeld voor een groot aantal kationen, spore-elementen, radionucliden en OMIVE tegelijk, ervan uitgaande dat hun inputconcentratie aan maaiveld b.v. 60 jaar geleden ineens, dus stapsgewijs, en continu zou zijn verhoogd van 0 tot 100%. Het betreft stoffen variërend van zeer mobiel en persistent tot immobiel en snel afbreekbaar.

Aangenomen is dat het aquifersysteem uit 2 lagen met gemiddelde hydrogeochemische kenmerken bestaat zonder uitlogingseffecten: een aërobe, zuurdere aquiferzone 1 (de deklaag) en een anaërobe, minder zure aquiferzone 2 (het grove pakket waaruit gewonnen wordt).

De belangrijkste conclusie t.a.v. kationen en spore-elementen is dat de verwachte toename van K en 8 zware metalen nog 40-240 jaar op zich kan laten wachten t.g.v. sorptie. Dit klopt met de metingen die in aquiferlaag F en in het ruwwater nog zeer lage concentraties laten zien.

De belangrijkste conclusie t.a.v. radionucliden is dat alleen tritium en ^{14}C snel doorbreken (14 jaar, net als water), en dat vrijwel alle overige radionucliden er niet alleen lang (106 jaar tot $145 \cdot 10^6$ jaar) over doen maar bovendien een verwaarloosbare activiteit zullen etaleren. Uitzondering is ^{90}Sr dat na 270 jaar zodanig doorbreekt dat zijn activiteit niet verwaarloosbaar is (ook gelet op de gezondheidsaspecten), n.l. 0.15% van de inputwaarde.

Van de 45 onderzochte OMIVE breken er slechts 7 snel door (bijna zo snel als water) en met hoge concentratie, rond inputniveau. Dit zijn derhalve vrijwel conservatieve stoffen ($T_{1/2}$ zeer hoog en R dichtbij 1.0). Het betreft: 1,2-dichloorpropaan, 1,4-dioxaan, bentazon, carbamazepine, diglyme, mcpp en mtbe. De overige OMIVE hebben of (i) een zeer hoge R en persistentie waardoor zij uitermate traag maar wel voor 100% doorkomen zoals de PCB, of (ii) een zeer hoge R en beperkte persistentie waardoor zij uitermate traag en vrijwel onmeetbaar ($<0.001\%$) doorkomen zoals de zwaardere PAK, of (iii) een lage R maar hoge mate van afbreekbaarheid zodat zij snel maar vrijwel onmeetbaar ($<0.001\%$) doorkomen zoals vele chlooralkanen, chlooralkenen, chloorbenzenen en pesticiden.

De gepresenteerde methode leent zich goed voor het testen van het gedrag van stoffen, zodat het meetprogramma daarop kan worden afgesteld. Stoffen die veel te lang nodig hebben om door te breken en stoffen die in onmeetbaar lage concentraties snel of ooit doorbreken, behoeven geen monitoring.

7.7 Overige aanbevelingen specifiek voor Noordbargeres

1. In het algemeen geldt, dat een verhoging van het aantal meetpunten ten koste van de meetfrequentie over de brede linie meer informatie oplevert (Foster 199?). Te overwegen valt derhalve om b.v. enkele oude, verlaten meetpunten, na kwaliteitscontrole, in beperkte mate mee te laten draaien in meetrondes. Binnen het intrekgebied ontbreekt een waarnemingsput in bos (eventueel data te extrapoleren uit wingebed Valtherbos?) en binnen het puttenveld zou een diepe waarnemingsput hetzij in het epicentrum van de winning hetzij als peilfilter onderin een bestaande pompput 2 grensvlakken moeten bewaken: (i) het grensvlak van ondiep antropogeen beïnvloed grondwater en onderliggend (oud) natuurlijk grondwater, en (ii) het zoet/zout grensvlak. Feit dat brak tot zout grondwater tot op heden geen issue vormt bij Noordbargeres, sluit niet uit dat dit in de (verre) toekomst aan de orde komt.
2. Toepassing van de chemische massabalans op onderdelen van het intrekgebied, zoals met en zonder (kalkhoudende) keileem, met en zonder agrarische beïnvloeding.
3. Uitwerking van de bestaande isotoopgegevens van ^{13}C en ^{15}N .
4. Datering van het grondwater middels $^3\text{He}/^3\text{H}$ en ^{14}C op enkele sleutellocaties, waaronder enkele piezometernesten en enkele pompputten.
5. Bestudering van de omvang en eventuele effecten van beregening ten behoeve van de landbouw.
6. Controle van enkele kwetsbare pompputten op chemische putverstopping.
7. Vervolg van de hydrochemische systeemanalyse door diepgaander kartering van ruimtelijke en temporele patronen. Zo zijn de kwaliteitsontwikkelingen in de afzonderlijke waarnemingsputten en pompputten nu niet onderzocht, terwijl daarin ongetwijfeld interessante informatie besloten ligt.
8. Toevoeging van N_2 gasanalyse aan de komende exploratieronde, ter kwantificering van denitrificatie.

8 Algemene conclusies en aanbevelingen

In dit finale hoofdstuk worden algemene conclusies en aanbevelingen gepresenteerd, ten aanzien van Model-Based Groundwater (Quality) Monitoring (MBGM) van freatische, kwetsbare puttenvelden.

Mogelijkheden en beperkingen MBGM

De verbeterde bepaling van ondergrondse reistijden en doorbraakmomenten van probleemstoffen maakt het nu mogelijk om de analysespakketten en meetfrequenties scherper en met meer vertrouwen bij te stellen. Zo heeft het weinig zin om aantoonbaar oud grondwater te analyseren op een breed pakket OMIVE, of om grondwater ver van de randen van zowel zijn grondwaterlichaam als hydrochemische zones daarbinnen, met hoge frequentie door te lichten.

De indeling in grondwatersoorten en hydrogeochemische zones op basis van een hydrochemische systeemanalyse helpt in het verder verlichten van de meetinspanning, wanneer b.v. bekend is dat bepaalde verontreinigingen alleen voorkomen in een specifieke watersoort (b.v. geïnfiltreerd kanaalwater) en deze b.v. in diep anaëroob milieu 100% gegarandeerd afbreken. Het gebruik van screeningsparameters, die indien positief uitnodigen tot uitgebreider onderzoek, vormt een waardevolle controle op verschuivingen in de hydrogeochemische status-quo.

Er zijn evenwel ook beperkingen aan de toepassing van MBGM, vooral door de volgende factoren:

- (i) het verschijnen van goedkope multi-analysepakketten maakt krappe maatwerk-analysepakketten overbodig;
- (ii) maatwerk staat eenvoudig in procesvoering in de weg en kan tot meer fouten leiden;
- (iii) stoffeigenschappen uit handboeken zijn niet zonder meer overdraagbaar naar het te modelleren intrekgebied;
- (iv) prognoses op basis van modellen kennen een grote, moeilijk te kwantificeren bandbreedte;
- (v) kennis van metabolieten van afbrekende OMIVE en hun gedrag is zeer beperkt; en
- (vi) thans voorspelde of gemeten lage concentraties kunnen in de toekomst gevaarlijk hoog blijken, zodat zij niet uitgesloten mogen worden van monitoring. Zo is de norm van As verschoven van 50 naar 10 µg/L en zal in de toekomst mogelijk 1-2 µg/L worden.

Extra baten van MBGM

Een belangrijke conclusie is dat de 7-stapsbenadering van MBGM niet alleen leidt tot betere monitoring, maar ook tot een gestructureerde uitwerking en interpretatie van de verkregen informatie. Zodoende wordt het gevreesde datakerkhof omgetoverd in een datalusthof voor onderzoekers en beleidsmakers! Alleen door te tonen dat de data waardevolle informatie opleveren voorkomt men dat de begroting van langjarige meetprogramma's geplunderd wordt tijdens recidiverende bezuinigingsrondes.

Aanbevelingen

1. Het fullproof en foolproof maken van de Excel-tools (LGC, HRC+, HGC, UnMix, R+, TRANSATOMIC) voor gebruik door derden, het ter beschikking stellen aan de BTO-participanten en het geven van een korte (~2 dagen) cursus voor gebruikers.

2. Toepassing van MBGM met de 7-staps benadering op enkele winningen, ter vergroting van het vertrouwen in deze werkwijze en ter verfijning ervan indien wenselijk. Optie om MBGM-varianten te maken specifiek voor kunstmatige infiltratie, oeverfiltratie en diep grondwater.
3. Uitbouw van HRC+ met (i) een onafhankelijke analytische schatting van de reistijd in de afdeklaag als functie van de afstand tot het epicentrum van een puttenveld, (ii) module voor verbeterde verdiscontering van longitudinale dispersie langs elke stroombaan, (iii) gedetailleerdere uitloogmodule met variabel ingangssignaal van oxidatoren, en (iv) gedetailleerdere retardatiemodule met laagsgewijze verandering van de retardatiefactor.
4. Uitwerking van een protocol voor isotopenonderzoek incl. de interpretatie van isotoopgegevens. Focus daarbij op de stabiele (natuurlijke) isotopen ^2H , ^3He , ^{13}C , ^{15}N , ^{18}O en ^{34}S , en de radioactieve ^3H + ^{14}C , en hun relevantie voor MBGM.
5. Bestudering van de omvang en effecten van beregening ten behoeve van de landbouw (irrigation return flow).

9 Referenties

- Appelo, C.A.J. and D. Postma 2005. *Geochemistry, groundwater and pollution*. 2nd edition, Balkema Publishers, Leiden, 649p.
- Baggelaar, P.K. 1992. Naar een meetsysteem waterkwaliteit bij grondwaterwinning. *Kiwa-Meded.* 117, 179p.
- Broers, H.P. 2002. *Strategies for regional groundwater quality monitoring*. PhD thesis Univ. Utrecht, Nederlandse Geografische Studies NSG 306, 231p.
- Chilton, P.J. & S.S.D. Foster 1996. Monitoring for groundwater quality assessment: current constraints and future strategies. *Proc. Monitoring Tailor-Made II: Information strategies in water management*. Sept. 1996, Nunspeet, Netherlands, 53-64.
- De Jonge, E.H. 1985. Bodemgebruik en grondontsmetting rond pompstation Noordbargeres; II. Aanvullingen tot en met 1985. *Kiwa-rapport SWE 86.005*, 4 p.
- De Jonge, E.H. 1986. Onderzoek naar de grondwaterkwaliteit rondom pompstation Noordbargeres; uitspoeling van mineralen naar het grondwater. *Kiwa-rapport SWE 86.014*, 31 p.
- Eijsink, R. 1985a. Onderzoek naar de relatie landbouw, bewoning, grondwaterkwaliteit, rondom grondwaterpompstation Noordbargeres. *Kiwa-rapport SWE 85.001*, 39p.
- Eijsink, R. 1985b. Bodemgebruik en grondontsmetting rond pompstation Noordbargeres; inventarisatie van gegevens. *Kiwa-rapport SWE 85.018*, 16p.
- Engelen, G.B., J.M.J. Gieske & S.O. Los 1988. *Grondwater stromingsstelsels in Nederland* Werkdocument. *Rapport Staatsbosbeheer 1988-36*, 166 p.
- EPA 2006. *Treatment Technologies for 1,4-Dioxane: Fundamentals and Field Applications*. EPA-542-R-06-009, USA.
- Foppen, J.W. en A.H.M. Kremers, 1997. *Pompstation Noordbargeres. Meetnetontwerp voor de grondwaterkwaliteit*. TNO-NITG. NITG 97-125-B
- Griffioen, J., E.A. Buijs, A.H.M. Kremers 1997. *De herkomst van 1,4-dioxaan bij drinkwaterwinning Noordbargeres te Emmen*. TNO-rapport NITG 97-107-B.
- Gustafson, D.I. 1989. Groundwater ubiquity score: A simple method for assessing pesticide leachability. *Envir. Toxic. & Chem.* 8, 339-357.
- Hudak, P.F. & H.A. Loaiciga 1993. An optimization method for monitoring network design in multilayered groundwater flow systems. *Water Resources Research* 29, 2835-2845.
- Janssen, H.M.J. en L.M. Puijker, 1991. *Onderzoek naar grondontsmettingsmiddelen in het grondwater van Noordbargeres en Valtherbos*. KIWA. SWE 91.031
- Konert, M. & J. Vandenberghe 1997. Comparison of laser grain size analysis with pipette and sieve analysis: a solution for the underestimation of the clay fraction. *Sedimentology* 44, 523-535.
- Laeven, M.P., 1991. *Nitratvoorspelling pompstation Noordbargeres*. KIWA. SWE 91.034, 31p.
- Lagas, P., B. Verdam & J.P.G. Loch 1989. *Bedreiging van de grondwaterkwaliteit door bestrijdingsmiddelen*. *H2O* 22, 422-427.
- Lindenschot, 1988. *Onderzoek naar de ontwikkeling in de nitraatconcentratie in het grondwater in de omgeving van pompstation Noordbargeres*. WMD-rapport.
- Meyer, P.D. & E.D. Brill 1988. A method for locating wells in a groundwater monitoring network under conditions of uncertainty. *Water Resources Research* 24, 1277-1282.
- Peeters, J.E.M., J. Griffioen, R.A.A. Hetterschijt, 1999. *De herkomst van 1,4-dioxaan bij grondwaterwinning Noordbargeres te Emmen*. Vervolgonderzoek. NITG-TNO. NITG 99-114B.

- Provincie Drenthe 2011. Gebiedsdossier grondwater beschermingsgebieden in Drenthe, Valterbos en Noordbargeres, 56p.
- Raat, K.J., G.J. Zwolsman, R.M.A. Sjerps en P.J. Stuyfzand. 2015. Kansen en beperkingen van model based monitoring van de kwaliteit van grond- en oppervlaktewater. BTO 2015.031, in prep.
- Raats, P.A.C. 1978. Convective transport of solutes by steady flows II: specific flow problems. *Agric. Water Management* 1, 219-232.
- Scheffer, F. & P. Schachtschabel 2002. *Lehrbuch der Bodenkunde*, 15th ed, Elsevier, Amsterdam, 607p.
- Steffan, R.J., K.R. McClay, H. Masuda, and G.J. Zylstra. 2007. Biodegradation of 1,4-Dioxane. Strategic Environmental Research and Development Program (SERDP), Shaw Environmental, Inc. 17 Princess Rd. Lawrenceville, New Jersey USA, 103p.
- Stuyfzand, P.J. 1989. Vergelijking van kunstmatige infiltratie via vijvers en putten in geohydrochemisch op-zicht. *H2O* 22, 721-728.
- Stuyfzand, P.J. 1993. Hydrochemistry and hydrology of the coastal dune area of the Western Netherlands. Ph.D Thesis Vrije Univ. Amsterdam, published by KIWA, ISBN 90-74741-01-0, <http://dare.uvu.vu.nl/handle/1871/12716>, 366 p.
- Stuyfzand, P.J. 1996. The geohydrochemical approach in optimizing groundwater quality monitoring. Proc. 'Monitoring tailor-made II' (Ottens et al., eds), Intern. Work-shop Nunspeet (Neth.) September 1996, 415-419.
- Stuyfzand, P.J. 1998. Meetnetten voor de grondwaterkwaliteit gebaat met geohydrochemische screening. *H2O* 31, 85-88.
- Stuyfzand, P.J. (2010-2014). REACTIONS+ (R+), a chemical mass balance program set in Excel spreadsheet, for identification and quantification of chemical reactions acting on natural waters. For backgrounds see Stuyfzand 2011.
- Stuyfzand, P.J. 2011. Hydrogeochemical processes during river bank filtration and artificial recharge of polluted surface waters: zonation, identification and quantification. In C. Ray and M. Shamrukh (eds), *Riverbank Filtration for Water Security in Desert Countries*, Nato Science for Peace and Security Series C: Environmental Security, 97-128.
- Stuyfzand, P.J. 2012. Hydrogeochemical (HGC 2.1), for storage, management, control, correction and interpretation of water quality data in Excel (R) spread sheet. KWR Watercycle Research Institute, KWR-report BTO.2012.244(s), 76p.
- Stuyfzand, P.J. 2013. TRANSATOMIC (TRANS Aquifer Transport Of MICropollutants), a model set in Excel spreadsheet for calculating concentration changes with analytical solutions, for trace elements, radionuclides and organic micropollutants during aquifer passage and, if applicable, during detention in a spreading basin or fluvial compartment prior to infiltration.
- Stuyfzand P.J. in prep. Hydrological, hydrochemical and managed aquifer recharge systems. VU Course Syllabus 'Hydrological Systems and Water Management', 1st edition, part of MSc Hydrology Programme at VU University Amsterdam.
- Stuyfzand, P.J., W. Segers & N. Van Rooijen 2007. Behavior of pharmaceuticals and other emerging pollutants in various artificial recharge systems in the Netherlands. In: Management of aquifer recharge for sustainability, P. Fox (ed), Proc. ISMAR-6, 28 Oct - 2 Nov 2007, Phoenix AR USA, Acacia Publ. INC., Phoenix, 231-245.
- Tesoriero, A., F. Löffler & H. Liebscher 2001. Fate and Origin of 1,2-Dichloropropane in an Unconfined Shallow Aquifer. *Environ. Sci. Technol.* 2001, 35, 455-461.
- Van Beek, C.G.E.M. en A.J. Vogelaar, 1992. Bestrijdingsmiddelen en nitraat rond de winning Noordbargeres. KIWA. SWE 92.005.
- Van Beek, C.G.E.M. en L.M. Puijker, 2002. Meer weten, minder meten; optimalisatie monitoringprogramma grondstof. KIWA.BTO 2001.210c, 47p.
- Van der Grift, B., 1999. Pompstation Noordbargeres. Bepaling organisch-koolstof en totaal-zwavelgehalte van de ondergrond. TNO-NITG. NITG 99-15-B

- Van der Moot, N.L., 1991. Geo-hydrologisch modelonderzoek en 1,2-DCP-voorspelling pompstation Noordbargeres. KIWA, WMD. SWE 91.039.
- Van der Moot, N.L. 2014. Chloridazon-desfenyl in het ruwwater van Gasselte, Noordbargeres en Valtherbos. WMD-notitie, 9p.
- Van der Moot, N.L. & H. Zeewuster 2000. Rapportage monitoringsysteem Noordbargeres Exploratieronde 1999. WMD-rapport, 47p.
- Van Duijvenbooden, W. 1987. Groundwater quality monitoring networks: design and results. In "Vulnerability of soil and groundwater to pollutants". Proc. and Information No.38 of Internat. Conf, TNO Committee on Hydrologic Research, Delft, The Netherlands, 179-192.
- Van Ommen, H.C. 1985. Invloed van diffuse verontreiniging op de kwaliteit van gewonnen of afstromend grondwater: een analogie met een eenvoudig mengproces. H2O (18), 313-316.
- Van Vugt, A. en B. van den Eijnden, 1999. Stoftransportmodellering Pompstation Noordbargeres. Een studie naar de haalbaarheid van een meetnetoptimalisatie met behulp van een fijn gediscetiseerd stoftransportmoodel. NITG-TNO. NITG 99-118-B.
- Vogelaar, A.J., 1990. De hydrochemie van het gebied in de omgeving van de winplaats Noordbargeres. KIWA. SWE90.004.
- Vromans, N. 2011. Screening en multitracing Noordbargeres; benoeming van (anorganische) tracers voor het traceren van oppervlaktewater, landbouwwater en rioolwater. Thematic Research ersity Amsterdam as part of M.Sc. education program, 28p.
- Ward, R.C., J.C. Loftis & G.B. McBride 1990. Design of water quality monitoring systems. Van Nostrand Reinhold, NY USA.

Bijlage 1: Exploratiepakket WMD

Onderstaande opgave van het exploratiepakket is gebaseerd op gegevens verstrekt door Van de Maas (WLN) in april 2015.

Meth-nr	Omschrijving	Omschrijving	WPs	PPs	Meth-nr	Omschrijving	Omschrijving	WPs	PPs
1025	Temperatuur	Temperatuur	X	X	3832	Aromaten/alifaten	cyclohexaan	X	X
1045	Zuurstof elektrochemisch	Zuurstof	X	X	3832	Aromaten/alifaten	methylcyclohexaan	X	X
1046	* Zuurstof gemeten bij (temperatuur)	* Zuurstof gemeten bij (temperatuur)	X	X	3832	Aromaten/alifaten	cyclohexeen	X	X
1051	Zuurstof Winkler	Zuurstof	X	X	3832	Aromaten/alifaten	1,2,3,4-tetrachloorbenzeen	X	X
1052	Zuurstof veld	Zuurstof	X		3832	Aromaten/alifaten	1,2,3,5+1,2,4,5-tetrachloorbenzeen	X	X
1189	pH, ter plekke	pH veldmeting	X		3832	Aromaten/alifaten	broombenzeen	X	X
1190	* pH veldmeting gemeten bij (temp.)	* pH veldmeting gemeten bij (temp.)	X						
1198	Zuurgraad	Zuurgraad	X	X	3855	DD-componenten en mitc	1,1-dichloorpropaan	X	X
1199	* Zuurgraad gemeten bij (temperatuur)	* Zuurgraad gemeten bij (temperatuur)	X	X	3855	DD-componenten en mitc	1,2-dichloorpropaan	X	X
1248	EGV veldmeting bij 20 C	Elektrisch geleidend vermogen bij 20 C	X	X	3855	DD-componenten en mitc	1,3-dichloorpropaan	X	X
1252	* EGV gemeten bij (autom. compensatie)	* EGV gemeten bij (autom. compensatie)	X	X	3855	DD-componenten en mitc	2,2-dichloorpropaan	X	X
1257	Elektrisch geleidend vermogen bij 20 C	Elektrisch geleidend vermogen bij 20 C	X	X	3855	DD-componenten en mitc	1,1-dichloorpropeen	X	X
1259	Elektr. geleiden vermogen, laag niveau	Elektr. geleiden vermogen, laag niveau	X	X	3855	DD-componenten en mitc	cis-1,3-dichloorpropeen	X	X
1267	* EGV gemeten bij (autom. compensatie)	* EGV gemeten bij (autom. compensatie)	X	X	3855	DD-componenten en mitc	trans-1,3-dichloorpropeen	X	X
1355	Vrij Kooldioxide	Vrij Kooldioxide	X	X	3855	DD-componenten en mitc	2,3-dichloorpropeen	X	X
1359	Waterstofcarbonaat	Waterstofcarbonaat	X	X	3855	DD-componenten en mitc	1,2,2-trichloorpropaan	X	X
1381	Chloride, diskrete analyser	Chloride	X	X	3855	DD-componenten en mitc	1,2,3-trichloorpropaan	X	X
1388	Sulfaat	Sulfaat	X	X	3855	DD-componenten en mitc	methylsithiocyanaat	X	X
1407	Ammonium (mg N)	Ammonium (mg N)	X	X	3855	DD-componenten en mitc	1,1,2-trichloorpropaan	X	X
1449	Nitriet (mg N)	Nitriet (mg N)	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	trichloormethaan (chloroform)	X	X
1457	Nitraat (mg N)	Nitraat (mg N)	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	tetrachloormethaan (tetra)	X	X
1505	Ortho-fosfaat, diskrete analyser	Ortho-fosfaat	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	broomchloormethaan	X	X
1542	Opstarten ICP-MS	Opstarten ICP-MS	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	broomdichloormethaan	X	X
1593	Aluminium, ICP-MS	Aluminium	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	broomtrichloormethaan	X	X
1650	Arsen, ICP-MS	Arsen	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	tribroomchloormethaan	X	X
1735	Cadmium, ICP-MS	Cadmium	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	tribroommethaan (bromofom)	X	X
1776	Calcium, ICP-MS	Calcium	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1,2-dichloorethaan	X	X
1800	Chroom, ICP-MS	Chroom	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1,1,1-trichloorethaan	X	X
1830	Cobalt, ICP-MS	Kobalt	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1,1,2-trichloorethaan	X	X
1856	Kalium, ICP-MS	Kalium	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1,1,2,2-tetrachloorethaan	X	X
1880	Koper, ICP-MS	Koper	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	trichlooretheen (tri)	X	X
1936	Lood, ICP-MS	Lood	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	tetrachlooretheen (per)	X	X
1965	Magnesium, ICP-MS	Magnesium	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	hexachloorethaan	X	X
1988	Mangaan, ICP-MS	Mangaan	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	hexachloor-1,3-butadien	X	X
2024	Natrium, ICP-MS	Natrium	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1,1,1,2-tetrachloorethaan	X	X
2045	Nikkel, ICP-MS	Nikkel	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1,2-dibroomethaan	X	X
2192	Ijzer, ICP-MS	Ijzer	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1,2-dibroom-3-chloorpropaan	X	X
2238	Zink, ICP-MS	Zink	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1-broom-3-chloorpropaan	X	X
2350	D.O.C., verbrandingsanalyse	D.O.C. (opgelost organisch koolstof)	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	dibroommethaan	X	X
3809	Voorbewerking GCMS vluchtigen	Voorbewerking GCMS vluchtigen	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	epichloorhydrine	X	X
3814	Diversen GC/MS	1,4-dioxaan	X	X	3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1-chloorpropaan	X	X
3814	Diversen GC/MS	butylmethylether	X	X	3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbindingen	chloormethaan	X	X
3814	Diversen GC/MS	ETBE	X	X	3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbindingen	dichloormethaan	X	X
3814	Diversen GC/MS	MTBE	X	X	3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbindingen	chlooretheen (vinylchloride)	X	X
3814	Diversen GC/MS	tetrahydrofiofeen	X	X	3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbindingen	1,1-dichlooretheen	X	X
3814	Diversen GC/MS	tetrahydrofuraan	X	X	3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbindingen	cis-1,2-dichlooretheen	X	X
3814	Diversen GC/MS	TAME	X	X	3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbindingen	trans-1,2-dichlooretheen	X	X
3814	Diversen GC/MS	diisopropylether	X	X	3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbindingen	chloorethaan	X	X
3832	Aromaten/alifaten	benzeen	X	X	3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbindingen	1,1-dichloorethaan	X	X
3832	Aromaten/alifaten	tolueen	X	X	3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbindingen	3-chloor-1-propeen	X	X
3832	Aromaten/alifaten	ethylbenzeen	X	X	3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbindingen	2-chloor-1-propeen	X	X
3832	Aromaten/alifaten	n-propylbenzeen	X	X	3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbindingen	cis-1-chloor-1-propeen	X	X
3832	Aromaten/alifaten	iso-propylbenzeen	X	X	3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbindingen	trans-1-chloor-1-propeen	X	X
3832	Aromaten/alifaten	n-butylbenzeen	X	X	3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbindingen	dichloordifluormethaan	X	X
3832	Aromaten/alifaten	iso-butylbenzeen	X	X	3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbindingen	trichloordifluormethaan	X	X
3832	Aromaten/alifaten	secundair-butylbenzeen	X	X	3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbindingen	freon 113	X	X
3832	Aromaten/alifaten	tertiair-butylbenzeen	X	X	3926	GCMS voorbewerking	GCMS voorbewerking	X	X
3832	Aromaten/alifaten	n-pentylbenzeen	X	X	3927	GCMS voorbewerking (binnen 24 uur)	GCMS voorbewerking (binnen 24 uur)	X	X
3832	Aromaten/alifaten	o-xyleen	X	X	3929	Chloorfenolen	3+4-chloorfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	m+p-xyleen	X	X	3929	Chloorfenolen	2,3-dichloorfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	4-isopropyltolueen	X	X	3929	Chloorfenolen	2,4+2,5-dichloorfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	1,2,3-trimethylbenzeen	X	X	3929	Chloorfenolen	2,6-dichloorfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	1,2,4-trimethylbenzeen	X	X	3929	Chloorfenolen	3,4-dichloorfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	1,3,5-trimethylbenzeen	X	X	3929	Chloorfenolen	3,5-dichloorfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	1,2,3,4-tetramethylbenzeen	X	X	3929	Chloorfenolen	2,3,4-trichloorfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	1,2,3,5-tetramethylbenzeen	X	X	3929	Chloorfenolen	2,3,5-trichloorfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	1,2,4,5-tetramethylbenzeen	X	X	3929	Chloorfenolen	2,3,6-trichloorfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	2-ethyltolueen	X	X	3929	Chloorfenolen	2,4,5-trichloorfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	3-ethyltolueen	X	X	3929	Chloorfenolen	2,4,6-trichloorfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	4-ethyltolueen	X	X	3929	Chloorfenolen	3,4,5-trichloorfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	1,2-diethylbenzeen	X	X	3929	Chloorfenolen	2,3,4,5+2,3,4,6-tetrachloorfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	1,3-diethylbenzeen	X	X	3929	Chloorfenolen	2,3,5,6-tetrachloorfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	1,4-diethylbenzeen	X	X	3929	Chloorfenolen	pentachloorfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	1,3-diisopropylbenzeen	X	X	3929	Chloorfenolen	4-chloor-2-methylfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	1,3,5-triisopropylbenzeen	X	X	3929	Chloorfenolen	4-chloor-3-methylfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	styreen	X	X	3929	Chloorfenolen	2-chloorfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	naftaleen	X	X	3932	Alkyfenolen	fenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	biphenyl	X	X	3932	Alkyfenolen	2-methylfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	biphenylether	X	X	3932	Alkyfenolen	3+4-methylfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	chloorbenzeen	X	X	3932	Alkyfenolen	2,3-dimethylfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	1,2-dichloorbenzeen	X	X	3932	Alkyfenolen	2,4+2,5-dimethylfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	1,3-dichloorbenzeen	X	X	3932	Alkyfenolen	2,6-dimethylfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	1,4-dichloorbenzeen	X	X	3932	Alkyfenolen	3,4-dimethylfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	1,2,3-trichloorbenzeen	X	X	3932	Alkyfenolen	2-nitrofenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	1,2,4-trichloorbenzeen	X	X	3932	Alkyfenolen	2-ethylfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	1,3,5-trichloorbenzeen	X	X	3932	Alkyfenolen	3+4-ethyl+3,5-dimethylfenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	2-chloortolueen	X	X	3932	Alkyfenolen	3-nitrofenol	X	X
3832	Aromaten/alifaten	4-chloortolueen	X	X	3932	Alkyfenolen	4-nitrofenol	X	X

Meth-nr	Omschrijving	Omschrijving	WPs	PPs	Meth-nr	Omschrijving	Omschrijving	WPs	PPs
3855	DD-componenten en mitc	1,1-dichloorpropan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	b-endosulfan	X	X
3855	DD-componenten en mitc	1,2-dichloorpropan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	op-DDE	X	X
3855	DD-componenten en mitc	1,3-dichloorpropan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	pp-DDE	X	X
3855	DD-componenten en mitc	2,2-dichloorpropan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	op-DDD	X	X
3855	DD-componenten en mitc	1,1-dichloorpropeen	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	pp-DDD	X	X
3855	DD-componenten en mitc	cis-1,3-dichloorpropeen	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	op-DDT	X	X
3855	DD-componenten en mitc	trans-1,3-dichloorpropeen	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	pp-DDT	X	X
3855	DD-componenten en mitc	2,3-dichloorpropeen	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	pentachloorbenzeen	X	X
3855	DD-componenten en mitc	1,2,2-trichloorpropan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	tecnazeen	X	X
3855	DD-componenten en mitc	1,2,3-trichloorpropan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	propachloor	X	X
3855	DD-componenten en mitc	methylisothiocyanaat	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	alachloor	X	X
3855	DD-componenten en mitc	1,1,2-trichloorpropan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	metazachloor	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	trichloormethaan (chloroform)	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	cis-permethrin	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	tetrachloormethaan (tetra)	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	trans-permethrin	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	broomchloormethaan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	dichloran	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	broomdichloormethaan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	metolachloor	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	broomtrichloormethaan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	isobenzan (telodrin)	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	tribroomchloormethaan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	mirex	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	tribroommethaan (bromoform)	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	methoxychloor	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1,2-dichloorethaan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	pentachlooraniline	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1,1,1-trichloorethaan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	PCB-28	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1,1,2-trichloorethaan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	PCB-52	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1,1,2,2-tetrachloorethaan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	PCB-101	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	trichlooretheen (tri)	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	PCB-118	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	tetrachlooretheen (per)	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	PCB-138	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	hexachloorethaan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	PCB-153	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	hexachloor-1,3-butadien	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	PCB-180	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1,1,1,2-tetrachloorethaan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	2,6-dichloorbenzamide (BAM)	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1,2-dibroomethaan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	isodrin	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1,2-dibroom-3-chloorpropan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	vinchlozolin	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1-broom-3-chloorpropan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	cis-chloordaan	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	dibroommethaan	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	trans-chloordaan	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	epichloorhydrine	X	X	3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	e-HCH	X	X
3868	Vluchtige organohalogenen verbindingen	1-chloorpentaan	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	ametryn	X	X
3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbind.	chloormethaan	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	atrazine	X	X
3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbind.	dichloormethaan	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	atrazine-desethyl	X	X
3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbind.	chlooretheen (vinylchloride)	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	atrazine-desisopropyl	X	X
3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbind.	1,1-dichlooretheen	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	benazolin-ethylester	X	X
3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbind.	cis-1,2-dichlooretheen	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	bromophos-ethyl	X	X
3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbind.	trans-1,2-dichlooretheen	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	bromophos-methyl	X	X
3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbind.	chloorethaan	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	chloryrifos-ethyl	X	X
3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbind.	1,1-dichloorethaan	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	chloryrifos-methyl	X	X
3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbind.	3-chloor-1-propeen	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	cis+trans-mevinphos	X	X
3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbind.	2-chloor-1-propeen	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	cis-chloorfenvinphos	X	X
3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbind.	cis-1-chloor-1-propeen	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	cyazazine	X	X
3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbind.	trans-1-chloor-1-propeen	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	deltamethrin	X	X
3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbind.	dichloordifluormethaan	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	demeton-S-methyl	X	X
3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbind.	trichloordifluormethaan	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	desmetryn	X	X
3887	Zeer vluchtige organohalogenen verbind.	freon-113	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	diazinon	X	X
3926	GCMS voorbewerking	GCMS voorbewerking	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	dichloorvos	X	X
3927	GCMS voorbewerking (binnen 24 uur)	GCMS voorbewerking (binnen 24 u	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	disulfoton	X	X
3929	Chloorfenolen	3+4-chloorfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	ethion	X	X
3929	Chloorfenolen	2+3-dichloorfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	ethopros	X	X
3929	Chloorfenolen	2+4,5-dichloorfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	etrimphos	X	X
3929	Chloorfenolen	2,6-dichloorfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	fenchloorphos	X	X
3929	Chloorfenolen	3,4-dichloorfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	fenitrothion	X	X
3929	Chloorfenolen	3,5-dichloorfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	fenthion	X	X
3929	Chloorfenolen	2,3,4-trichloorfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	fonofos	X	X
3929	Chloorfenolen	2,3,5-trichloorfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	hexazinon	X	X
3929	Chloorfenolen	2,3,6-trichloorfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	malathion	X	X
3929	Chloorfenolen	2,4,5-trichloorfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	methacrifos	X	X
3929	Chloorfenolen	2,4,6-trichloorfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	methidathion	X	X
3929	Chloorfenolen	3,4,5-trichloorfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	metribucin	X	X
3929	Chloorfenolen	2,3,4,5+2,3,4,6-tetrachloorfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	parathion-ethyl	X	X
3929	Chloorfenolen	2,3,5,6-tetrachloorfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	parathion-methyl	X	X
3929	Chloorfenolen	pentachloorfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	penconazool	X	X
3929	Chloorfenolen	4-chloor-2-methylfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	phoraat	X	X
3929	Chloorfenolen	4-chloor-3-methylfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	pirimifos-methyl	X	X
3929	Chloorfenolen	2-chloorfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	prometon	X	X
3932	Alkylfenolen	fenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	prometryn	X	X
3932	Alkylfenolen	2-methylfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	propazine	X	X
3932	Alkylfenolen	3+4-methylfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	pyrazophos	X	X
3932	Alkylfenolen	2,3-dimethylfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	simazine	X	X
3932	Alkylfenolen	2,4+2,5-dimethylfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	sulfotep	X	X
3932	Alkylfenolen	2,6-dimethylfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	terbutryn	X	X
3932	Alkylfenolen	3,4-dimethylfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	terbutylazine	X	X
3932	Alkylfenolen	2-nitrofenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	tetrachloorvinphos	X	X
3932	Alkylfenolen	2-ethylfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	tolclofos-methyl	X	X
3932	Alkylfenolen	3+4-ethyl+3,5-dimethylfenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	trans-chloorfenvinphos	X	X
3932	Alkylfenolen	3-nitrofenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	triadimefon	X	X
3932	Alkylfenolen	4-nitrofenol	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	triadimenol	X	X
3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	a-HCH	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	triazophos	X	X
3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	b-HCH	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	trichloronaton	X	X
3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	d-HCH	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	trietazine	X	X
3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	g-HCH (lindaan)	X	X	4002	Stikstof-Fosforbestrijdingsmiddelen	trifluralin	X	X
3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	HCB	X	X	4008	PAK	naftaleen	X	X
3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	PCNB	X	X	4008	PAK	acenafyleen	X	X
3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	dichlobenil	X	X	4008	PAK	acenafteen	X	X
3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	aldrin	X	X	4008	PAK	fluoreen	X	X
3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	dieldrin	X	X	4008	PAK	fenantreen	X	X
3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	endrin	X	X	4008	PAK	anthraceen	X	X
3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	heptachloor	X	X	4008	PAK	fluorantheen	X	X
3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	cis-heptachloorepoxide	X	X	4008	PAK	pyreen	X	X
3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	trans-heptachloorepoxide	X	X	4008	PAK	benz(a)antracene	X	X
3940	Chloorbestrijdingsmiddelen	a-endosulfan	X	X	4008	PAK	chryseen	X	X

Meth-nr	Omschrijving	Omschrijving	WPs	PPs	Meth-nr	Omschrijving	Omschrijving	WPs	PPs
4008	PAK	benzo(b)fluorantheen		X	4112	Fenylureumherbiciden, LC/MS	penycycuron	X	X
4008	PAK	benzo(k)fluorantheen		X	4116	Nitrofenolen, LC/MS	2,4-dinitrofenol	X	X
4008	PAK	benzo(a)pyreen		X	4116	Nitrofenolen, LC/MS	2,5-dinitrofenol	X	X
4008	PAK	dibenz(ah)antraceen		X	4116	Nitrofenolen, LC/MS	2,6-dinitrofenol	X	X
4008	PAK	benzo(ghi)peryleen		X	4116	Nitrofenolen, LC/MS	3,4-dinitrofenol	X	X
4008	PAK	indeno(1,2,3-cd)pyreen		X	4116	Nitrofenolen, LC/MS	D.N.O.C.	X	X
4032	Amines	aniline		X	4116	Nitrofenolen, LC/MS	dinoseb	X	X
4032	Amines	o+m+p-toluidine		X	4116	Nitrofenolen, LC/MS	dinoterb	X	X
4032	Amines	2,3-dimethylaniline		X	4116	Nitrofenolen, LC/MS	3+4-nitrofenol	X	X
4032	Amines	2,4+2,5+2,6+3,5-dimethylaniline		X	4116	Nitrofenolen, LC/MS	2,3-dinitrofenol	X	X
4032	Amines	3,4-dimethylaniline		X	4116	Nitrofenolen, LC/MS	2-nitrofenol	X	X
4032	Amines	2,4,6-trimethylaniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	1,2-benzisothiazool-3-on	X	X
4032	Amines	N-methylaniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	boscalid	X	X
4032	Amines	N,N-dimethylaniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	bromoxynil	X	X
4032	Amines	N-ethylaniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	chlorothalonil	X	X
4032	Amines	N,N-diethylaniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	cymoxanil	X	X
4032	Amines	2,6-diethylaniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	difenoconazool	X	X
4032	Amines	4-isopropylaniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	dimethenamid	X	X
4032	Amines	dibenzylamine		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	dimethomorf	X	X
4032	Amines	tribenzylamine		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	dithianon	X	X
4032	Amines	2-chlooraniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	epoxycanazool	X	X
4032	Amines	3+4-chlooraniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	fenmedifam	X	X
4032	Amines	2,3-dichlooraniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	fluazinam	X	X
4032	Amines	2,4+2,5-dichlooraniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	fluopicolide	X	X
4032	Amines	2,6-dichlooraniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	flutolanil	X	X
4032	Amines	3,4-dichlooraniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	haloxyfop-methyl	X	X
4032	Amines	3,5-dichlooraniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	imidacloprid	X	X
4032	Amines	2,3,4-trichlooraniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	irgarol	X	X
4032	Amines	2,4,5-trichlooraniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	lambda-cyhalothrin	X	X
4032	Amines	2,4,6-trichlooraniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	lenacil	X	X
4032	Amines	3,4,5-trichlooraniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	mesosulfuron-methyl	X	X
4032	Amines	2,3,4,5-tetrachlooraniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	metamitron	X	X
4032	Amines	2,3,5,6-tetrachlooraniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	methomyl	X	X
4032	Amines	3-chloor-4-methoxyaniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	padbutrazool	X	X
4032	Amines	3-chloor-4-methylaniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	pendimethalin	X	X
4032	Amines	4+5-chloor-2-methylaniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	prothiacanazool	X	X
4032	Amines	3,3'-dichloorbenzylidine		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	pyriproxyfen	X	X
4032	Amines	4-broomaniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	quizalofop-p-ethyl	X	X
4032	Amines	o-ansidine		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	tebuconazool	X	X
4032	Amines	2-nitroaniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	thiacloprid	X	X
4032	Amines	3-nitroaniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	trialaaf	X	X
4032	Amines	4-methoxy-2-nitroaniline		X	4123	Polaire bestrijdingsmiddelen, LC/MS	triflusulfuron-methyl	X	X
4032	Amines	4-methyl-2-nitroaniline		X	4134	Metaboliëten	chloridazon-desfenyl	X	X
4032	Amines	4-methyl-3-nitroaniline		X	4134	Metaboliëten	chloridazon-methyl-desfenyl	X	X
4032	Amines	2,6-dichloor-4-nitroaniline		X	4134	Metaboliëten	dimethachloorsulfonzuur	X	X
4032	Amines	2-phenylsulfonaniline		X	4134	Metaboliëten	dimethachloorzuur	X	X
4032	Amines	pentachlooraniline		X	4134	Metaboliëten	metazachloorsulfonzuur	X	X
4044	Voorbewerking ftalaten	Voorbewerking ftalaten		X	4134	Metaboliëten	metazachloorzuur	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	di-n-pentylftalaat		X	4134	Metaboliëten	metolachloorsulfonzuur	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	di-ethylftalaat		X	4134	Metaboliëten	metolachloorzuur	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	di-n-heptylftalaat		X	4134	Metaboliëten	pirimicarb-desmethyl	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	di-n-propylftalaat		X	4134	Metaboliëten	pirimicarb-desmethyl-formamido	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	di-methylftalaat		X	4134	Metaboliëten	spiromesfen metaboliet M01	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	di-iso-nonylftalaat		X	4134	Metaboliëten	terbutylazine-desethyl	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	di-n-butylftalaat		X	4140	Geneesmiddelen, LC/MS	atenolol	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	di-n-hexylftalaat		X	4140	Geneesmiddelen, LC/MS	caffeine	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	di-undecylftalaat		X	4140	Geneesmiddelen, LC/MS	carbamazepine	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	di-decylftalaat		X	4140	Geneesmiddelen, LC/MS	carbamazepine epoxide 10,11	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	di-dodecylftalaat		X	4140	Geneesmiddelen, LC/MS	diclofenac	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	bis(2-ethylhexyl)ftalaat		X	4140	Geneesmiddelen, LC/MS	dihydroxycarbamazepine	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	di-iso-propylftalaat		X	4140	Geneesmiddelen, LC/MS	hydrochlorothiazide	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	bis(2-methoxyethyl)ftalaat		X	4140	Geneesmiddelen, LC/MS	ibuprofen	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	di-n-octylftalaat		X	4140	Geneesmiddelen, LC/MS	ketoprofen	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	di-iso-butylftalaat		X	4140	Geneesmiddelen, LC/MS	lidocaine	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	bis(2-butoxyethyl)ftalaat		X	4140	Geneesmiddelen, LC/MS	metoprolol	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	benzylbutylftalaat		X	4140	Geneesmiddelen, LC/MS	naproxen	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	di-cyclohexylftalaat		X	4140	Geneesmiddelen, LC/MS	paracetamol	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	di-n-nonylftalaat		X	4140	Geneesmiddelen, LC/MS	propranolol	X	X
4046	Ftalaten (weekmakers)	di(2-ethylhexyl)adiapaat		X	4140	Geneesmiddelen, LC/MS	sotalol	X	X
4105	Chloorfenoxycarbonzuren, LC/MS	2,4,5-T	X	X	4140	Geneesmiddelen, LC/MS	sulfametoxazool	X	X
4105	Chloorfenoxycarbonzuren, LC/MS	2,4,5-TP	X	X	4143	Zoetstoffen, LC/MS (geen Q)	acesulfaam(K)	X	X
4105	Chloorfenoxycarbonzuren, LC/MS	2,4-D	X	X	4143	Zoetstoffen, LC/MS (geen Q)	cyclamaaf	X	X
4105	Chloorfenoxycarbonzuren, LC/MS	2,4-DB	X	X	4143	Zoetstoffen, LC/MS (geen Q)	saccharine	X	X
4105	Chloorfenoxycarbonzuren, LC/MS	2,4-DP (dichloorprop)	X	X	4146	N/P bestrijdingsmiddelen, LC/MS	azinphos-ethyl	X	X
4105	Chloorfenoxycarbonzuren, LC/MS	4-CPA	X	X	4146	N/P bestrijdingsmiddelen, LC/MS	azinphos-methyl	X	X
4105	Chloorfenoxycarbonzuren, LC/MS	MCPA	X	X	4146	N/P bestrijdingsmiddelen, LC/MS	bifenox	X	X
4105	Chloorfenoxycarbonzuren, LC/MS	MCPB	X	X	4146	N/P bestrijdingsmiddelen, LC/MS	bromacil	X	X
4105	Chloorfenoxycarbonzuren, LC/MS	MCP	X	X	4146	N/P bestrijdingsmiddelen, LC/MS	chloridazon	X	X
4105	Chloorfenoxycarbonzuren, LC/MS	bentazon	X	X	4146	N/P bestrijdingsmiddelen, LC/MS	dimethoaf	X	X
4105	Chloorfenoxycarbonzuren, LC/MS	dicamba	X	X	4146	N/P bestrijdingsmiddelen, LC/MS	spiromesfen	X	X
4105	Chloorfenoxycarbonzuren, LC/MS	fluroxypyr	X	X	4146	N/P bestrijdingsmiddelen, LC/MS	thiabendazool	X	X
4105	Chloorfenoxycarbonzuren, LC/MS	fluroxypyr-meptyl	X	X	4146	N/P bestrijdingsmiddelen, LC/MS	paraoxon-ethyl	X	X
4112	Fenylureumherbiciden, LC/MS	chloortoluron	X	X	4146	N/P bestrijdingsmiddelen, LC/MS	paraoxon-methyl	X	X
4112	Fenylureumherbiciden, LC/MS	diuron	X	X	4150	Carbamaten, LC/MS	3-hydroxycarbofuran	X	X
4112	Fenylureumherbiciden, LC/MS	isoproturon	X	X	4150	Carbamaten, LC/MS	aldicarb	X	X
4112	Fenylureumherbiciden, LC/MS	linuron	X	X	4150	Carbamaten, LC/MS	aldicarb-sulfon	X	X
4112	Fenylureumherbiciden, LC/MS	metabenzthiazuron	X	X	4150	Carbamaten, LC/MS	aldicarb-sulfoxide	X	X
4112	Fenylureumherbiciden, LC/MS	metoxuron	X	X	4150	Carbamaten, LC/MS	aminocarb	X	X
4112	Fenylureumherbiciden, LC/MS	monolinuron	X	X	4150	Carbamaten, LC/MS	barban	X	X
4112	Fenylureumherbiciden, LC/MS	monuron	X	X	4150	Carbamaten, LC/MS	butocarbomix	X	X
4112	Fenylureumherbiciden, LC/MS	metobromuron	X	X	4150	Carbamaten, LC/MS	butocarbomix-sulfoxide	X	X
4112	Fenylureumherbiciden, LC/MS	chloorbromuron	X	X	4150	Carbamaten, LC/MS	butoxycarbomix	X	X
4112	Fenylureumherbiciden, LC/MS	fenuron	X	X	4150	Carbamaten, LC/MS	carbaryl	X	X
4112	Fenylureumherbiciden, LC/MS	chlooroxuron	X	X	4150	Carbamaten, LC/MS	carbendazim	X	X
4112	Fenylureumherbiciden, LC/MS	fluometuron	X	X	4150	Carbamaten, LC/MS	carbetamide	X	X

Meth-nr	Omschrijving	Omschrijving	WPs	PPs
4150	Carbamaten, LC/MS	carbofuran	X	X
4150	Carbamaten, LC/MS	chloorpropham	X	X
4150	Carbamaten, LC/MS	fenoxycarb	X	X
4150	Carbamaten, LC/MS	joodpropynylbutylcarbamaat	X	X
4150	Carbamaten, LC/MS	methiocarb	X	X
4150	Carbamaten, LC/MS	molinaat	X	X
4150	Carbamaten, LC/MS	oxamyl	X	X
4150	Carbamaten, LC/MS	pirimicarb	X	X
4150	Carbamaten, LC/MS	profam	X	X
4150	Carbamaten, LC/MS	propamocarb	X	X
4150	Carbamaten, LC/MS	propoxur	X	X
4150	Carbamaten, LC/MS	prosulfocarb	X	X
4150	Carbamaten, LC/MS	sweep	X	X
4163	Fosfonzure herbiciden, LC/MS	aminomethylfosfonzuur	X	X
4163	Fosfonzure herbiciden, LC/MS	glyfosaat	X	X
4169	Broomfenolen	2,4,6-tribroomanisol	X	X
4169	Broomfenolen	2,4,6-tribroomfenol	X	X
4169	Broomfenolen	2,4-dibroomanisol	X	X
4169	Broomfenolen	2,4-dibroomfenol	X	X
4169	Broomfenolen	2,6-dibroomfenol	X	X
4169	Broomfenolen	3-broomanisol	X	X
4169	Broomfenolen	3-broomfenol	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	aclonifen	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	azoxystrobine	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	bifenazaat	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	bifenox	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	broompropylaet	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	carbofenthion	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	chloroneb	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	deet	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	diflufenican	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	epoxyconazool	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	esvenvaleraat	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	ethofumesaat	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	etridiazool	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	fenamifos	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	fenpropimorf	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	fluazifop-butyl	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	folpet	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	fosalon	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	fosfamidon-a	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	fosfamidon-b	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	iprodion	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	kresoxim-methyl	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	metalaxyl	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	oxadixyl	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	propiconazool-a	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	propiconazool-b	X	X
4180	Polaire bestrijdingsmiddelen	tetrahydroftaalimide	X	X
4183	Brandvertragers	BDE-028	X	X
4183	Brandvertragers	BDE-047	X	X
4183	Brandvertragers	BDE-066	X	X
4183	Brandvertragers	BDE-085	X	X
4183	Brandvertragers	BDE-099	X	X
4183	Brandvertragers	BDE-100	X	X
4183	Brandvertragers	BDE-138	X	X
4183	Brandvertragers	BDE-153	X	X
4183	Brandvertragers	BDE-154	X	X
5129	Vb:Glyfosaat	Vb:Glyfosaat	X	X
7042	Voorbewerking LC/MS	Voorbewerking LC/MS screening	X	X

Bijlage 2: Bepaling en betekenis van de hydrochemische facies

Onderstaande is ontleend aan Ch.8 van Stuyfzand (2012).

8.1 Introduction

The Hydrochemical Systems Analysis (HSA) was introduced by Stuyfzand (1993, 1999) to provide tools for mapping groundwater quality in a way similar to mapping the geology, pedology or hydrological systems of an area (Table 8.1). The methodology presented here deviates slightly from the original HSA, in order to better address the mapping of man-made groundwater bodies in (semi)natural environments, in the larger variety of hydrogeochemical environments in the European Union today. The methodology presented here results in the mapping of generic water types. For a further characterization of inorganic water quality a chemical classification of water types can be useful, like the one presented in Ch.5 (in Stuyfzand, 2012).

Definitions

A *hydrochemical groundwater system*, or *hydrosome* (water body; ύδωρ = water, σωμα = body), was defined by Stuyfzand (1993, 1999) as a coherent, 3-dimensional unit of groundwater with a specific origin. Examples are: coastal dune groundwater recharged by local rainwater, intruded seawater, recharged Rhine River water and polder water. Within a given hydrosome the chemical composition of water varies in time and space, due to changes in recharge composition and in flow patterns, and due to chemical processes between water and its porous medium. Such variations in chemical character can be used to subdivide a hydrosome into characteristic zones or 'hydrochemical facies', a term introduced by Back (1960). A hydrosome is therefore composed of various facies units.

The *hydrochemical facies* is a mappable hydrochemical unit within a single water body, based on a broad spectrum of chemical analyses. It can be determined, for example, by the 4 indices in Table 8.2 that are individually calculated (Stuyfzand, 1993, 1999, 2006):

- the pH class or calcite saturation index SI_C (Stuyfzand, 1989a);
- redox index (based on the major redox sensitive species in water: O_2 , NO_3 , SO_4 , Fe-total, Mn-total, NH_4 and CH_4);
- Base Exchange index (BEX); and
- a Water Pollution Index (WAPI).

TABLE 8.1. Comparison of the mapping of geological, pedological, hydrological and hydrochemical data, with a first grouping according to the genesis or origin, and subsequent subdivision on the basis of specific characteristics (modified after Stuyfzand, 1993).

	(SUB)SOIL		GROUNDWATER	
	GEOLOGY	PEDOLOGY	HYDROLOGY	CHEMISTRY
1. GENETICAL UNIT:	Formation	Soil Type	Flow System	Water body (Hydrosome)
Example	Westland Formation	Podzol	North Sea	Dune water
2. ZONES WITHIN:	Sedimentary Facies	Horizon	Flow Branch	Hydrochemical Facies
Examples	Younger dune sand	A0	1st order (local)	acid, polluted
	Older dune sand	A1	2nd order (subregional)	acid, (sub)oxic
	Beach sand	A2	3rd order (regional)	calcareous, anoxic
	Shallow marine sand	B	4th order	ditto, deep anoxic
	Lagoonal clay	B2	(supraregional)	ditto, freshened
	Basal peat	C		

TABLE 8.2. The various hydrochemical facies descriptors and their code. If standard state, then the code is omitted for simplicity. After Stuyfzand (2006).

Facies Code	Facies descriptor	Value	Standard state
pH-classes			
N	Neutral / basic	>6.2	yes
a	Slightly acid	5.0 - 6.2	no
A	Acid	< 5.0	no
Redox			
M	mixed	-	no
o	(sub)oxic	1 - 3	yes
r	reduced (anoxic)	4 - 5	no
d	deeply anoxic	6 - 7	no
WAPI			
u	unpolluted	0 - 2	yes
b	bit (slightly) polluted	2 - 6	no
m	moderately polluted	6 - 20	no
p	polluted	>20	no
BEX			
f	freshened	> +(0.5 + 0.02Cl)	no
e	equilibrium	0	yes
s	salinized	< -(0.5 + 0.02Cl)	no

For mapping purposes each of these 4 chemical indices receives an appealing code. In order to reduce the number of codes on the map, those codes are not displayed which are considered 'standard state' of the hydrochemical system. The *standard state* is: neutral, (sub)oxic, unpolluted and without base exchange. So, a water sample with coding 'df' signifies that it is pH-neutral, deeply anoxic, unpolluted and freshened.

9.1 Acidity (pH or SI_c)

One of the most important hydrochemical parameters is pH (Appelo & Postma, 2005). It determines a.o. the mobility of pollutants in infiltration water and the leaching rate of aquifer minerals. The classes discerned are listed in Table 8.3. They correspond with the general acid buffer sequence for multi-mineral soils (Ulrich et al., 1979).

TABLE 8.3. pH-classes as part of the hydrochemical facies determination. Top: the finest subdivision, with principal acid buffers and metal mobility. Below: the less differentiated subdivision.

pH-classes	Facies descriptor	Value	Principal acid buffer	Mobility metals
B	Basic	>8.2	CaCO ₃ , (H)CO ₃	Oxy-anions#
N	Neutral	6.2 - 8.2	CaCO ₃ , HCO ₃	Oxy-anions#
a	Slightly acid	5.0 - 6.2	Al-silicates	Zn, Cd
A	Acid	4.2 - 5.0	Ca + Mg exchange	Cu, Ni
H	Strongly acid	<4.2	Al(OH) ₃ , Fe(OH) ₃	Al, Cr, Fe, Pb

like arsenate, molybdate, selenate, vanadate

Facies Code	Facies descriptor	Value	Standard state
pH-classes			
N	Neutral / basic	>6.2	yes
a	Slightly acid	5.0 - 6.2	no
A	Acid	< 5.0	no

9.2 Redox environment and redox index

The redox environment determines the mobility, dissolution, degradation and toxicity of inorganic and organic substances in or in contact with the water phase (Stumm & Morgan, 1981; Stuyfzand, 1998). The direct measurement of the redox potential E_H with electrodes runs into practical problems, however, and is handicapped by unreliable results (Lindberg & Runnells, 1984) or difficulties in quantitative thermodynamic interpretation (Peiffer et al., 1992). Unfortunately the same holds for its calculation from a single redox pair like Fe^{2+}/Fe^{3+} (Lindberg & Runnells, 1984; Barcelona et al., 1989). Therefore Stuyfzand (1988, 1993) developed a semi-empirical redox index as based on all redox sensitive main components of water, i.e. O_2 , NO_3^- , SO_4^{2-} , Fe, Mn, H_2S and CH_4 . The system as followed by HGC is shown in Table 8.4.

Redox assessment systems similar to Table 8.4 were presented by a.o. McMahon & Chapelle (2008) and Chapelle et al. (2009). These use (somewhat) different and less practical criteria considering data availability and data precision, they do not deal with lacking data (which is frequently occurring), and do not define the 'mixed' redox classes shown in Table 8.4. Mixed redox classes are very common in water samples from pumping wells and even more from well fields, due to the inherent mixing of waters from different origins and redox environments, when long well screens are pumped (Mendizabal & Stuyfzand, 2011).

A mixed redox (M) results when antagonistic redox sensitive main components of water are present above a specific threshold concentration. For mapping purposes it can be useful to combine several redox levels into the redox clusters indicated in Table 8.4 (and 8.2).

Assessment of SO_4 -reducing conditions

Water is classified as SO_4 -reducing or methanogenic (redox level 6.7) if $SO_4 = 0$ or $<MDL$. With additional CH_4 data a distinction can be made between level 6 or 7 (Table 8.4). With higher SO_4 concentrations the assessment of SO_4 -reducing conditions becomes difficult (Chapelle et al., 2009), especially when estimates of the original SO_4 concentrations $(SO_4)_0$ cannot be made (see below), or when information regarding H_2S smell during sampling, ^{34}S , H_2S or H_2 data from laboratory measurements are lacking.

In case of watertypes M, O, P, T and S we assume by default that the measured SO_4 concentration equals $(SO_4)_0$. This excludes an SO_4 -reducing environment for these watertypes. Only under particular conditions this assumption may be wrong, for instance in case of surface water in a swamp or close to the bottom where muds accumulated. A way to circumvent this, is to assign such waters (erroneously) watertype F but marking this for instance by giving F a red colour.

In case of groundwater the approach is as follows, with a different approximation for watertypes F and G. In case of type F (infiltrated Fluvial water in the saturated zone) the concentration of $(SO_4)_0$ can normally be determined by using a known linear positive relation between SO_4 and Cl concentrations as observed in many Dutch surface waters (Stuyfzand, 1986):

$$\text{For type F: } (SO_4)_0 = a \text{ Cl} + c \quad (8.1A) \quad \text{or} \quad (SO_4)_0 = a \text{ Cl}^c \quad (8.1B)$$

Where: concentrations in mg/L; a, c = constants, for instance for Rhine River water $a = 0.277$ and $c = 29.7$ mg/L in Eq.8.1A.

The values of a and b need to be entered in 3-Row, cells GK7 and GK8 respectively.

In Eq.8.1 conservative behavior of Cl and no SO_4 sources during and after infiltration are assumed for type F. Thereby, SO_4 mobilization by pyrite oxidation and SO_4 mobilization by dissolution of gypsum are ignored. Reactive behavior of SO_4 is frequently revealed somehow in the overall hydrochemistry. SO_4 reduction is normally manifested by a significant HCO_3^- increase, high ^{34}S concentrations, and the presence of gypsum can be revealed by an SI_G approaching 0 or by anomalous values of ^{34}S or Sr. Gypsum may introduce an underestimate of the redox level, but can be ignored in many aquifers used for fresh water supply, as in the Netherlands.

In case of type G (infiltrated local rain water in the saturated zone, with or without admixing of intruded or relict seawater) the concentration of $(SO_4)_0$ can only be approximated, on the condition that SO_4 measured is $< SO4_C$ (sea salt corrected), by taking:

$$\text{For type G, if } \text{SO}_4 < 0.14 \text{ Cl: } (\text{SO}_4)_0 = 0.14 \text{ Cl} + c \quad (8.2)$$

Where: 0.14 = SO_4/Cl ratio in SMOW [mg/L-basis]; c = local constant depending e.g. on atmospheric deposition; all concentrations in mg/L.

The resulting estimate of $(\text{SO}_4)_0$ is in all cases on the conservative, i.e. low side, thus resulting in a bias yielding too few identifications of SO_4 reducing conditions. This applies in particular to groundwaters that show pyrite oxidation by either excessive fertilizer loads or declining water tables. In order to reduce this error, a second criterion was added for assigning SO_4 reduction, namely that methane should be 0.2–0.5 mg/L.

TABLE 8.4. Practical criteria for the determination of the redox index (slightly modified after Stuyfzand, 1988, 1993). Concentrations in mg/L.

Level	Unmixed redox environment	Redox cluster	Criteria [mg/L]						
			O_2	NO_3^-	Mn^{2+}	Fe^{2+}	SO_4^{2-}	$\text{H}_2\text{S}^\#$	CH_4
1	Oxic	(sub)oxic	$\text{O}_2 \geq 0.8 (\text{O}_2)_{\text{SAT}}$		< 0.1	< 0.1	$\geq 0.8 (\text{SO}_4)_0$	no	< 0.1
2	O ₂ -reducing		$1 \leq \text{O}_2 < 0.8 (\text{O}_2)_{\text{SAT}}$		< 0.1	< 0.1	$\geq 0.8 (\text{SO}_4)_0$	no	< 0.1
3	NO ₃ -reducing		< 1	≥ 1	< 0.1	< 0.1	$\geq 0.8 (\text{SO}_4)_0$	no	< 0.1
4	Mn-reducing	anoxic	< 1	< 1	≥ 0.1	< 0.1	$\geq 0.8 (\text{SO}_4)_0$	no	< 0.1
5	Iron reducing		< 1	< 1		≥ 0.1	$\geq 0.8 (\text{SO}_4)_0$	no	< 0.2
6	Sulfate reducing	deeply	< 1	< 1			0.2-0.8 (SO ₄) ₀	yes	0.2 - 0.5
7	Methanogenic	anoxic	< 1	< 1			< 0.2 (SO ₄) ₀		≥ 0.5

Level	Mixed redox environment	Mix of levels	Criteria [mg/L]						
			O_2	NO_3^-	Mn^{2+}	Fe^{2+}	SO_4^{2-}	$\text{H}_2\text{S}^\#$	CH_4
2.4	O ₂ – Mn	2 + 4	≥ 1		≥ 0.1	< 0.1	$\geq 0.8 (\text{SO}_4)_0$	no	< 0.1
2.5	O ₂ – Fe	2 + 5	≥ 1			≥ 0.1	$\geq 0.8 (\text{SO}_4)_0$	no	< 0.1
2.6	O ₂ – H ₂ S	2 + 6	≥ 1				0.2-0.8 (SO ₄) ₀	yes	< 0.1
2.7	O ₂ – CH ₄	2 + 7	≥ 1				< 0.2 (SO ₄) ₀		> 0.1
3.5	NO ₃ – Fe	3 + 5	< 1	≥ 1		≥ 0.1	$\geq 0.8 (\text{SO}_4)_0$	no	<0.1
3.6	NO ₃ – H ₂ S	3 + 6	< 1	≥ 1			0.2-0.8 (SO ₄) ₀	yes	< 0.1
3.7	NO ₃ – CH ₄	3 + 7	< 1	≥ 1			< 0.2 (SO ₄) ₀		<0.1
3.7	NO ₃ – CH ₄	3 + 7	< 1	≥ 1					> 0.1
5.6	Fe – H ₂ S	5 + 6	< 1	< 1		≥ 0.1	0.2-0.8 (SO ₄) ₀	yes	< 0.1
5.6	Fe – H ₂ S	5 + 6	< 1	< 1		≥ 0.1	$\geq 0.8 (\text{SO}_4)_0$	yes	0.2 - 0.5
5.7	Fe – CH ₄	5 + 7	< 1	< 1		≥ 0.1	$\geq 0.8 (\text{SO}_4)_0$		≥ 0.5
6.7	H ₂ S – CH ₄	6 + 7	< 1	< 1			< 0.2 (SO ₄) ₀	yes	< 0.5
6.7	H ₂ S – CH ₄	6 + 7	< 1	< 1			0.2-0.8 (SO ₄) ₀	yes	≥ 0.5

[#] yes/no = yes/no clear H₂S-smell in field, or H₂S \geq / < 0.1 mg/L. If data unavailable not a criterion

$(\text{O}_2)_{\text{SAT}}$: see Eq.10.1.

$(\text{SO}_4)_0$ = original SO₄ concentration [mg/L], see text

9.3 Water Pollution index WAPI

Aggregated quality parameters like pollution indices help to summarize a large amount of chemical and physical characteristics of water or soil, into a single number or figure which is understandable and informative to both layman and specialist. However, such a parameter or index normally addresses only one specific target (for instance the suitability of water for either consumption, irrigation or deep well injection) and very often it is valid for only one type of water (for instance either fresh surface water, groundwater or sea water). This explains why there are in fact so many indices in use (Stuyfzand, 1993; BKH, 1994).

9.3.1 Calculation and general aspects

The Water Pollution Index WAPI is determined on the basis of 10 water quality subindices, following the method developed by Stuyfzand & Lüers (2000) with minor modifications according to Stuyfzand (2006). The method is summarized in Table 8.5 and 8.6. The standard calculation is based on the simple average:

$$WAPI = (A + B + C + D + E + F + G + H + I + J) / 10 \quad (8.3)$$

In addition to WAPI, HGC also reports the individual score of each subindex (A-J). Most sub-indices consist of the unweighted mean of scores for related quality parameters, on the basis of the ratio of the measured value and the natural background (or target) value (NB) or maximum permissible concentration for drinking water (MPC). Their values are tabulated in Table 8.6.

In the Netherlands we use NBs according to LBB (1998), and MPCs according to WLB (2001), also valid in EU. The use of such ratio's is advantageous thanks to (a) their clear environmental significance, e.g. 3 meaning 3 times more polluted than natural background, and (b) the possibility to plot each subindex in a radar plot.

Subindices A-J cover the following water quality aspects: esthetics (A), acidity (B), oxidation or reduction capacity (C), nutrients (D), total salt content (E), inorganic micropollutants (F), organic micropollutants, pesticides excluded (G), pesticides (H), radioactivity (I) and microbiology (J).

WAPI can be easily adapted to embrace the available data on water quality and to relate to other (deviating) natural backgrounds.

The parameter B was squared, in order to obtain a range of scores comparable to the other 9 quality aspects. WAPI is based on total concentrations, because only these data are usually available. This means that there are no corrections of for instance heavy metals and PAHs for suspended solids or particulate organic carbon (POC).

TABLE 8.5. Determination of the Water Pollution Index WAPI by averaging quality aspects A – J (modified after Stuyfzand, 2002). Values >1 indicate that natural background levels are exceeded. N.B.:if parameters are omitted, then the final division factor should decrease accordingly (C excluded). The natural background of each parameter equals its individual division factor.

WAPI = (A + B + C + D + E + F + G + H + I + J) / 10			Unit(s)
with:			
A =	Esthetics	(suspended solids + colour/20 + taste/2 + odour/2 + turbidity/4) / 5	#
B =	Acidity	(pH – 7) ²	-
C =	Oxidation or reduction capacity	MOC / 2.7 [me/L] with:	me/L
		MOC = 4O ₂ + 5NO ₃ ⁻ + 7SO ₄ ²⁻ - 3NH ₄ ⁺ - Fe ²⁺ - 2Mn ²⁺ - 8CH ₄	mmol/L
D =	Nutrients (eutrophication potential)	(PO ₄ -P/0.02 + TIN/0.9) / 2	mg/L
E =	Total salt content	(Cl/12 + EC/350) / 2	##
F =	Inorg. micropollutants (Trace elements)	(As/5 + Ba/50 + Cd/0.05 + Cr/5 + Cu/3 + Hg/0.02 + Ni/9 + Pb/4 + Zn/9) / 9	ug/L
G =	Org. Micropollutants (excl. Pesticides)	(ΣBTEX + ΣLUMP + Σothers + ΣPAH + ΣVOC)/5	ug/L
		ΣPAH = (naf/0.1 + (ant+fen)/0.02 + (2fla+baa+chr+bkf+bap)/0.003 + (2bpe+ipy)/0.002) / 10	
		ΣLUMP = (AOX/5 + EOX/0.5) / 2	
		ΣVOC = (benz/0.2 + tolu/0.2 + chlo/0.01 + tri/0.01) / 4	
		Σothers = (4-N-phenol + Tbfosf + lbfura + Btzole) / 0.04	
H =	Pesticides	(atra + sima + diur + α-HCH + γHCH + HCB + bent) / 0.07	
I =	Radioactivity	(restβ/10 + ³ H/8) / 2	\$
J =	Microbiology	([Colc ₂₂]/10000 + [Coli ₄₄]/10 + [Fs]/10) / 3	CFU/L

Units: # = resp. mg/L, mg/L Pt/Co, number of dilutions until no taste, dito odour, FTE;
= resp. mg/L, uS/cm at 20°C \$ = resp. mBq/L, TU

TABLE 8.6. Survey of parameters involved in the determination of the Water Pollution Index WAPI, with their natural backgrounds (division factor in WAPI), and various water quality standards applied in the Netherlands.

Quality Aspect	Quality Parameter	Unit	WAPI	Target quality	Drinking Water	Artificial Recharge
			applied	Groundwater	Standard	MACs Neths
			background	LBB, 1998	WLB, 2001	IB, 1993
A (esthetics)	Colour	mg/L Pt/Co	20		20	
	Odour	N*	2		2	
	Suspended solids	mg/L	0.5			0.5
	Taste	N*	2		2	
	Turbidity	FTE	1		1	
B (acidity)	pH	-	7		7-9.5	
C (ox/red cap)	CH4	mg/L	4.8			
	Fe(II)	mg/L	11		0.2 (tot)	
	Mn(II)	mg/L	1.1		0.05 (tot)	
	O2	mg/L	11		>2	
	SO4	mg/L	15	150	150	150
C + D	NH4	mg/L	0.4	2.6-12.9#	0.2	3.23
	NO2	mg/L	0.1		0.1	
	NO3	mg/L	2.5	24.8	50	24.8
D (nutrients)	total PO4	mg/L	0.06	1.22-9.2\$	6.1 (tot)	1.22 (tot)
E (total salt)	Cl	mg/L	12	100	150	200
	Electr. Conductivity	uS/cm	350		1250	
F (IMPs)	As	µg/L	5	10	10	10
	Cd	µg/L	0.05	0.4	5	0.4
	Cr	µg/L	2	1	50	2
	Cu	µg/L	3	15	2,000 (plateau)	15
	Hg	µg/L	0.02	0.05	1	0.05
	Ni	µg/L	10	15	20	15
	Pb	µg/L	4	15	10	15
	Zn	µg/L	10	65	3,000	65
G (OMPs, BTEX)	benzene	µg/L	0.2	0.2	1 (sum BTEX)	
	toluene	µg/L	0.2	0.2	1 (sum BTEX)	
G (OMPs, Lump)	AOX	µg Cl/L	5			30
	EOX	µg Cl/L	0.5			
G (OMPs, others)	4-nitrofenol	µg/L	0.01			
	benzothiazole	µg/L	0.01			
	isobutylfuranone	µg/L	0.01			
	tributylphosphate + -iso-	µg/L	0.01			
G (OMPs, PAHs)	anthracene	µg/L	0.02	0.02	0.05	0.02
	benzo(a)anthracene	µg/L	0.002	0.002	0.05	
	benzo(a)pyrene (Borneff)	µg/L	0.001	0.001	0.01	0.1(ΣB)
	benzo(ghi)perylene (Borneff)	µg/L	0.002	0.002	0.05	0.1(ΣB)
	benzo(k)fluoranthene (Borneff)	µg/L	0.001	0.001	0.05	0.1(ΣB)
	chrysene	µg/L	0.002	0.002	0.05	0.02
	fluoranthene (Borneff)	µg/L	0.005	0.005	0.05	0.1(ΣB)
	indeno(123cd)pyrene (Borneff)	µg/L	0.0004	0.0004	0.05	0.1(ΣB)
	naphtalene	µg/L	0.1	0.1		0.1
	phenanthrene	µg/L	0.02	0.02	0.05	0.02
G (OMPs, THMs)	chloroform	µg/L	0.1	0.01	25 (sum THM)	
G (OMPs, VOCs)	trichloroethene	µg/L	0.01	0.01	10 (+tetra)	0.5
H (Pesticides)	alpha-HCH	µg/L	0.01	0.01	0.1	0.05
	atrazine	µg/L	0.01	0.0075	0.1	0.1
	bentazone	µg/L	0.01		0.1	0.1
	gamma-HCH (lindane)	µg/L	0.01	0.00002	0.1	0.05
	hexachlorobenzene	µg/L	0.01	0.01	0.1	0.05
	simazine	µg/L	0.01		0.1	0.1
I (Radioactivity)	rest-beta	mBq/L	10		1	
	tritium	TU	8		840	
J (Microbiology)	colony counts 22°C	CFU/L	10000			
	faecal streptococcs	CFU/L	10			
	thermotolerant coli counts	CFU/L	10			

WAPI-classes for mapping are suggested in Table 8.2. In HGC, parameters to calculate organic micropollutants, radioactivity and microbiology can be included or excluded, depending on data availability. There are 2 options to be indicated in cell HK8 of worksheet 3-ALL: option 1 is the full fledged version using all 10 subindices if available, and option 2 is the inorganic version based on subindices A-F. Therefore the simplified, inorganic WAPI ($WAPI_S$) becomes:

$$WAPI_S = (A + B + C + D + E + F) / 6 \quad (8.4)$$

Lacking data are dealt with as indicated below.

9.3.2 WAPI-A: esthetics

Included are the content of suspended solids, turbidity, color, taste and odor, of which the latter 2 have not been included in HGC. The natural backgrounds of suspended solids (1 mg/L), turbidity (4 FTU), color (20 mg/L Pt/Co), taste (2 dilutions) and odor (2 dilutions) derive from MPCs for drinking water according to WLB (2001).

Missing parameters (empty cells) automatically reduce the division factor, which is max 5, in HGC max. 3 (data on taste and odour are lacking too frequently), and min. 1. If all 3 parameters are lacking, but the water type is either F, G or M then A is set at 0, because these waters are normally without suspended particles. If all 3 parameters are lacking, but the water type is not F, G or M, then A is set at not available (empty cell) resulting in not taking part in Eq.8.3 or 8.4.

9.3.3 WAPI-B: acidity

The pH is a measure for the degree of acidification on the one hand ($pH < 7$) and alkalization on the other ($pH > 7$). pH-values of 6-8 are within the range of natural backgrounds (target values). A lower pH is regarded as undesirable in connection with the leaching of bases from the soil and the mobilization of heavy metals in soil and transport mains. A higher pH is undesirable as well because of (a) promoting the deposition of a.o. carbonates and phosphates, (b) its relation with algae blooms in surface water, and (c) enhancing the dissolution of silicate minerals and various metals.

9.3.4 WAPI-C: oxidation or reduction capacity

This capacity is calculated with MOC (Modified Oxidation Capacity) as indicated section 10.1.3 (see also Table 8.4). A positive value indicates oxidizing, a negative value reducing capacity.

A MOC-value in between +2.7 and -2.7 me/L is considered as the natural background because this agrees with respectively. (a) oxygen saturation at 11°C (11,3 mg O₂/L yielding $4 \cdot 11,3 / 32 = 1,4$ me/L) in absence of NO₃⁻ which is considered as largely anthropogenic, and with natural SO₄²⁻ ≤ 15 mg/L (dissolution of gypsum is thus considered as undesirable), and (b) modal concentration levels of natural NH₄⁺, Fe²⁺, Mn²⁺ and CH₄ in anoxic water which are easily removed by conventional water treatment systems.

Strongly positive MOC-values are associated with: (a) nitrate pollution for instance by agricultural activities, (b) sulfate pollution by for instance pyrite oxidation as a result of lowered water tables or nitrate pollution, (c) gypsum dissolution which is natural but quite problematic for drinking water supply, or (d) sea water admixing.

Strongly negative MOC-values normally result from deeply anoxic conditions by strong interaction of water with unstabilized organic matter and iron minerals. Deeply anoxic conditions can be purely natural and even advantageous for the (bio)degradation of various organic micropollutants and for immobilizing heavy metals (Schwarzenbach et al., 1993; Stuyfzand & Lüers, 1996; Appelo & Postma, 2005). The resulting, raised concentrations of NH₄⁺, Fe²⁺, Mn²⁺ and methane are, however, disadvantageous for (1) the air compartment (oxidation of CH₄, Fe²⁺ and Mn²⁺ leads to CO₂ emissions, and methane also contributes itself to the greenhouse effect), (2) the acidity of seepage water (oxidation of Fe²⁺ with precipitation of Fe(OH)₃ and oxidation of NH₄⁺, both producing a lot of acidity), and (3) water supply companies (lots of purification sludges being produced).

9.3.5 WAPI-D: nutrients

Orthophosphate and TIN (= Total Inorganic Nitrogen = $\text{NO}_3^- + \text{NO}_2^- + \text{NH}_4^+$) are regarded as the most prominent and critical nutrients for plants and plankton, as other nutrients usually do not pose limits to growth (SiO_2 and K^+ sometimes excluded). The natural background for orthophosphate is set at 0.02 mg P/L, for TIN at 0.9 mg N/L. These values are close to the upper limits for mesotrafent environments (Vollenweider, 1976; Schindler, 1981). Higher values are undesirable due to increased risks on surface water eutrophication.

9.3.6 WAPI-E: total salt content

This parameter combines (a) the total amount of dissolved solids (TDS), for which Electrical Conductivity (EC) forms an excellent indicator, with (b) the share of sodium chloride in TDS, with Cl⁻ concentration as indicator. Natural backgrounds of resp. 350 $\mu\text{S}/\text{cm}$ and 12 mg Cl⁻/L are based on (i) natural backgrounds for Rhine River water and old groundwater in the Netherlands, and (ii) the adverse effects of higher levels. Higher levels may lead to (1) adverse effects on plants bound to fresh water ecosystems, sensitive crops, cattle and man, and (2) corrosion of water treatment plants and transport mains. Of course natural backgrounds can be both higher and lower, necessitating adjustments in the division factors if desirable.

9.3.7 WAPI-F: inorganic micropollutants

The heavy metals Cd, Cr, Cu, Hg, Ni, Pb and Zn as well as As belong to the environmentally hazardous inorganic micropollutants. Natural backgrounds of resp. 0.05, 5, 3, 0.02, 9, 4, 9 and 5 $\mu\text{g}/\text{L}$ derive from those for surface water according to MILBOWA (1991). These values are, Cr excluded, considerably lower (more severe) than those for groundwater. The parameter F_{WAPI} can, if appropriate, be easily extended with for instance Al, B, Ba, F, Sb and Se (for which MPCs for drinking water are available).

9.3.8 WAPI-G: organic micropollutants, non-pesticide

Included are 4 groups of organic microcontaminants, which have been measured on a very frequent basis: 10 PAHs, 2 sum parameters (ΣLUMP ; AOX and EOX), 4 Volatile hydroCarbons (VOCs; benzene, toluene, chloroform and trichloroethene) and 4 other OMPs (free to define in yellow cells; for example: 4-nitro-phenol, benzothiazole, isobutylfuranone and tributylphosphate). Natural backgrounds (0.001-3 $\mu\text{g}/\text{L}$; see division factor in Table 8.7) derive from those for surface water according to MILBOWA (1991) with several deviations when necessitated by MDLs of analysis and with few additions (AOX and Σothers).

G_{WAPI} can be assumed zero, when data on all OMPs are lacking, if water type = F, G or M, and if tritium < 2 TU, because the soil or groundwater than normally infiltrated before 1954 (when the use of many OMPs still was rather limited). The parameter G_{WAPI} can be easily modified by regarding other OMPs, or be extended with more OMPs (within each of the 4 groups or with more groups).

9.3.9 WAPI-H: pesticides

This category includes 7 pesticides, amongst which 2 triazines (atrazine and simazine), 3 organochlorine pesticides ($\alpha\text{-HCH}$, γHCH and HCB), a phenylureum-herbicide (diuron) and bentazone. The choice of these pesticides was determined by their availability in data records and their frequent presence.

Natural backgrounds (0.01 $\mu\text{g}/\text{L}$; see division factor in Table 8.7) derive from those for surface water according to MILBOWA (1991), with deviating higher values for atrazine, $\alpha\text{-}$ and $\gamma\text{-HCH}$ due to their higher MDL of the current analysis.

For water of type F, G or M with tritium < 2 TU we can assume that H_{WAPI} , if measurements are lacking, equals zero, because the water in that case normally infiltrated prior to 1954 (when the use of pesticides mostly was at minimum). The parameter H_{WAPI} can be easily extended with other or more pesticides, pharmaceuticals, endocrine disruptors or personal care products.

9.3.10 WAPI-I: radioactivity

Rest- β and tritium have been taken together as a measure for radioactive contamination, because of their frequent measurement. Rest- β is equal to the total beta-radiation after subtracting a calculated contribution of natural ^{40}K (ca. 0.02 Bq/L per mg K^+/L) and after excluding tritium. Tritium (^3H) is a beta-radiating element as well and has a half life of 12.43 years. This heaviest isotope of hydrogen (part of the water molecule and therefore an excellent tracer) mainly originated from above ground

nuclear tests (especially in the period 1954-1970), regular discharges by nuclear power plants, reactor incidents and cosmic radiation.

Natural backgrounds for Rest- β and tritium are estimated at respectively. 10 mBq/L and 8 TU, which are considerably lower than the target values posed by MILBOWA (1991). Tritium also constitutes, for groundwater, an indicator of potential contamination with modern, anthropogenic organic micropollutants. The parameter I_{WAPI} can be easily extended with for instance total alpha and gamma radiation.

9.3.11 WAPI-J: microbiology

The number of colony forming units (CFU) of cultivable cells on PCA at 22°C ($ColC_{22}$; also called colony counts), thermotolerant bacteria of the coli group ($Coli_{44}$) and faecal streptococci (Fs) have been taken together as a measure for bacteriological infection of water. One of the arguments to take these is the availability of their measurement. The natural backgrounds of respectively 10000, 10 and 10 CFU/L are based on data regarding surface water (RIWA, 1971-1996), dune infiltrate (Hoekstra, 1984) and Rhine bank filtrate (Van der Kooij, 1985). J_{WAPI} can be set standard at 0.3 in case of groundwater (type F or G), if there are no measurements at all, because groundwater does not contain any $Coli_{44}$ nor Fs, while showing a median $ColC_{22}$ of ca. 10^4 CFU/L (Hoekstra, 1984; Van der Kooij, 1985).

The parameter J_{WAPI} can be easily extended with sulfite reducing clostridia, aeromonas, giardia etc.

9.4 Radar plot of WAPI

The pollution index WAPI has the advantage that it (a) groups various quality parameters, and (b) relates analytical results to natural backgrounds or target values. This enables to directly plot each subindex into a radar plot, which is a standard plotting facility in spread sheets like Excel.

Such a radar plot is similar to the so-called 'AMOEBE'-approach (Ten Brink & Hosper, 1989; Baptist & Laane, 1996). AMOEBE is the acronym for 'Algemene Methode voor OECosysteem BEoordeling' (General Method for Ecosystem Evaluation). It consists of a circular plot of many parameters with natural background or environmental target values forming the central circle. A kind of amoeba results when each parameter is plotted as a percentage of its natural background or environmental target value.

The principle of the WAPI radar plot is shown in Fig.8.1. It differs from the AMOEBE-approach by using a logarithmic scale, styling into radar instead of circles, and addressing other parameters.

→ In HGC go to worksheet #8 to define the samples to be shown on one Radar plot.

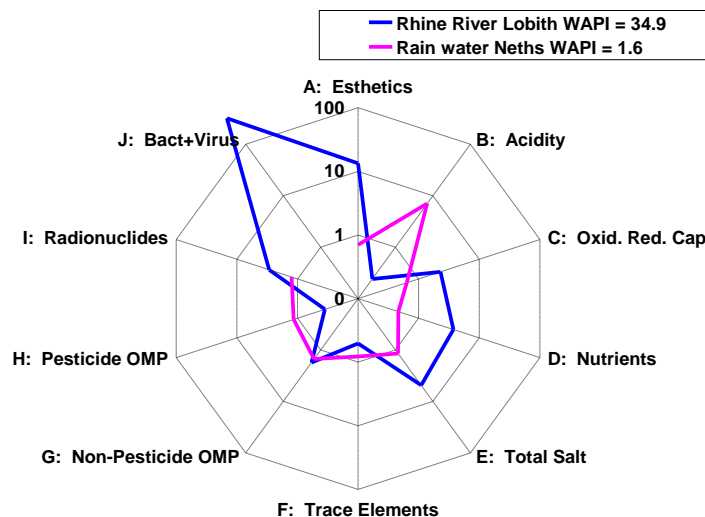


FIG. 8.1 Example of the WAPI radar plot (WAPI = WAter Pollution Index). 0, 1, 10, 100 = number of times the natural background value.

Bijlage 3: Lijst van geanalyseerde stoffen e hun hits

Sort on A (low to high), H and I (high to low) Total number of samples = 1664						Sort on L (low to high), S and T (high to low) Total number of samples = 4133						Sort on W (low to high), AD and AE (high to low) Total number of samples = 2200																				
Par.	Parameter	Unit	Raw Count	Raw Count	Raw Count <	PP4 Count	PP4 Count	PP4 Count <	Mean	Max	Par.	Parameter	Unit	Raw Count	Raw Count	Raw Count <	PP4 Count	PP4 Count	PP4 Count <	Mean	Max	Par.	Parameter	Unit	Raw Count	Raw Count	Raw Count <	PP4 Count	PP4 Count	PP4 Count <	Mean	Max
1	egv	Electrisch geleidend verm	mS/m	296	296	0	100	38.715	47.300	1	opgz-t	Totaal opgeloste zouten	(mg/l)	296	296	0	100	336.375	453.000	1	opgz-t	Totaal opgeloste zouten	(ber mg/l)	820	820	0	100	433.204	1790.000			
2	ph	Zuurgraad	pH	304	304	0	100	6.879	7.110	1	hardheid	Totale Hardheid	mmol/l	558	558	0	100	1.521	7.700	1	tmp-egv ^v	EGV gemeten bij (autom. co	graden C	411	411	0	100	10.839	18.600			
3	hardheid	Totale Hardheid	mmol/l	293	293	0	100	1.494	1.760	1	tmp	Temperatuur	graden C	154	154	0	100	0.739	1.100	1	tmp-egv ^v	EGV controle na afpompen	graden C	936	936	0	100	10.556	14.500			
4	c-index	Corrosie-Index	CI	64	64	0	100	0.715	0.900	1	c-index	Corrosie-Index	CI	142	142	0	100	0.737	1.100	1	phv	pH veldmeting	pH	493	493	0	100	6.615	7.870			
5	c-index	Corrosie-Index	CI	51	51	0	100	0.710	0.820	1	sind	Saturatie-Index	pH	277	277	0	100	-0.935	-0.360	1	hardheid	Totale Hardheid	mmol/l	1265	1265	0	100	1.994	9.290			
6	sind	Saturatie-Index	pH	115	115	0	100	-0.927	-0.640	1	temp	Temperatuur	graden C	515	511	4	99	10.010	19.900	1	c-index	Corrosie-Index	CI	620	620	0	100	1.053	6.900			
7	sind	Saturatie-Index	pH	4	4	0	100	-1.005	-0.930	1	tmp-egv ^v	EGV gemeten bij (autom. graden C	128	120	8	94	10.241	14.100	1	c-index	Corrosie-Index	CI	201	201	0	100	0.992	5.000				
8	temp	Temperatuur	graden C	294	292	2	99	10.140	13.600	1	phv	pH veldmeting	pH	149	134	15	90	6.821	7.400	1	sind	Saturatie-Index	pH	816	813	3	100	-1.357	0.370			
9	co2	Vrij Kooldioxide	mg/l	197	197	0	100	48.711	58.000	1	tmp-phv	pH veldmeting gemeten	graden C	128	113	15	88	10.227	14.200	1	phv-c	EGV controle na afpompen	mS/m	177	176	1	99	6.473	7.790			
10	co2g	Vrij CO2 (gecorrigeerd voor	mg/l	299	299	0	100	29.274	61.000	1	egv	EGV veldmeting bij 20 C	mS/m	559	526	233	58	38.210	64.900	1	tmp-phv	pH veldmeting gemeten bij	graden C	411	392	19	95	10.743	14.500			
11	methaan	Methaan	mg/l	70	67	3	96	0.052	0.100	1	co2	Vrij Kooldioxide	mg/l	529	529	0	100	45.945	75.000	1	tijdhh	Tijdelijke hardheid	mmol/l	28	24	4	86	0.989	2.270			
12	o2	Zuurstof	mg/l	293	96	197	33	0.360	7.000	1	co2g	Vrij CO2 (gecorrigeerd voor	mg/l	406	406	0	100	26.682	48.000	1	ph	Zuurgraad	pH	1701	1281	420	75	6.637	8.000			
13	kleur	Kleur bij 455 nm	mg/l	79	79	0	100	9.278	27.000	1	2.0 methaan	Methaan	mg/l	181	121	60	67	0.061	0.400	1	sind	Saturatie-Index	pH	7	5	2	71	-0.978	-0.280			
14	uv	UV absorptie bij 254 nm	abs/m	22	22	0	100	6.468	8.000	1	2.02	Zuurstof	mg/l	406	5	401	1	13.700	35.000	1	egv	EGV veldmeting bij 20 C	mS/m	1800	815	985	45	50.414	420.000			
15	geur-v	Geur kwaliteitief	kwaf.	97	97	0	100	4.804	10.000	1	1.6 uv	UV absorptie bij 254 nm	abs/m	35	35	0	100	7.377	13.800	1	2.02	Vrij Kooldioxide	mg/l	1024	1024	0	100	51.172	265.000			
16	held	Helderheid kwalitatief	kwaf.	97	97	0	100	2.268	10.000	1	1.6 geur-v	Geur kwaliteitief	kwaf.	44	44	0	100	3.750	10.000	1	1.6 pmni	Permangaanaat index	mg O2/l	912	910	2	100	40.888	245.000			
17	doc	D.O.C.	mg/l	158	158	0	100	1.476	3.400	1	21	1.6 pmni	Permangaanaat index	mg O2/l	26	26	0	100	2.077	3.900	1	1.2 methaan	Methaan	mg/l	179	103	76	58	0.410	7.600		
18	pmni	Permangaanaat index	mg O2/l	95	95	0	100	1.024	5.200	1	22	1.8 tritium	Tritium	T.U.	3	3	0	100	5.770	6.200	1	1.2	Zuurstof	mg/l	921	9	912	1	7.311	8.900		
19	tritium	Tritium	T.U.	3	3	0	100	5.770	6.200	1	23	1.8 alfa	Alfa Radioactiviteit	Bq/l	25	8	17	32	0.037	0.051	1	1.6 pmv	Permangaanaat verbruik	mg KMn ^v	107	106	1	99	4.161	12.000		
20	alfa	Alfa Radioactiviteit	Bq/l	25	8	17	32	0.037	0.051	1	24	1.8 beta	Beta Radioactiviteit	Bq/l	33	10	23	30	0.014	0.030	1	1.6 kleur	Kleur bij 455 nm	mg/l	67	58	9	87	9.534	29.000		
21	beta	Beta Radioactiviteit	Bq/l	33	10	23	30	0.014	0.030	1	25	1.8 h3	Tritium	Bq/l	22	2	20	9	0.515	1.010	1	2 hco3	Waterstofcarbonaat	mg/l	558	558	0	100	19.242	206.000		
22	h3	Tritium	Bq/l	22	2	20	9	0.515	1.010	1	26	2	fe	Liizer	mg/l	505	504	1	100	13.838	18.200	1	2	so4	Sulfaat	mg/l	539	539	0	100	59.775	425.000
23	fe	Liizer	mg/l	505	504	1	100	13.838	18.200	1	27	2	mn	Mangaan	mg/l	502	501	1	100	0.498	0.620	1	2	ca	Calcium	mg/l	539	539	0	100	49.246	79.100
24	mn	Mangaan	mg/l	502	501	1	100	0.498	0.620	1	28	2	ca	Calcium	mg/l	262	261	1	100	49.662	59.000	1	2	cl	Chloride	mg/l	91	91	0	100	38.659	58.000
25	ca	Calcium	mg/l	262	261	1	100	49.662	59.000	1	29	2	nh4	Ammonium	mg/l	406	404	2	100	0.220	0.670	1	2	co3	Carbonaat	mg/l	6	6	0	100	28.217	35.200
26	nh4	Ammonium	mg/l	406	404	2	100	0.220	0.670	1	30	2	nh4	Ammonium	mg/l	275	273	2	99	0.171	0.250	1	2	sio2	Silicium (SiO2, AAS)	mg SiO2	219	219	0	100	18.497	209.000
27	nh4	Ammonium	mg/l	275	273	2	99	0.171	0.250	1	31	2	po4o	Ortho fosfaat	mg P/l	178	176	2	99	2.110	138.500	1	2	sio2	Silicium (SiO2, AAS)	mg SiO2	1255	1255	0	100	10.253	140.800
28	po4o	Ortho fosfaat	mg P/l	178	176	2	99	2.110	138.500	1	32	2	po4o	Ortho fosfaat	mg P/l	192	187	5	97	0.654	45.190	1	2	co3	Carbonaat	mg/l	2	2	0	100	1.150	1.300
29	po4o	Ortho fosfaat	mg P/l	192	187	5	97	0.654	45.190	1	33	2	hco3	Waterstofcarbonaat	mg/l	300	300	0	100	130.449	153.000	1	2	si	Silicium	mg/l	45	45	0	100	0.068	11.000
30	hco3	Waterstofcarbonaat	mg/l	300	300	0	100	130.449	153.000	1	34	2	so4	Sulfaat	mg/l	229	229	0	100	59.322	75.000	1	2	mg	Magnesium	mg/l	539	539	0	100	6.761	49.600
31	so4	Sulfaat	mg/l	229	229	0	100	59.322	75.000	1	35	2	cl	Chloride	mg/l	37	37	0	100	37.243	42.000	1	2	k	Kalium	mg/l	474	474	0	100	4.054	22.000
32	cl	Chloride	mg/l	37	37	0	100	37.243	42.000	1	36	2	cl	Chloride	mg/l	222	222	0	100	36.004	42.000	1	2	hco3	Waterstofcarbonaat (in mmol/l)	mg/l	374	374	0	100	2.194	3.380
33	cl	Chloride	mg/l	222	222	0	100	36.004	42.000	1	37	2	na	Natrium	mg/l	228	228	0	100	18.746	23.500	1	2	po4o	Ortho fosfaat	mg P/l	302	302	0	100	0.808	37.600
34	na	Natrium	mg/l	228	228	0	100	18.746	23.500	1	38	2	sio2	Silicium (SiO2, AAS)	mg SiO2	23	23	0	100	17.165	19.000	1	2	po4o	Ortho fosfaat	mg P/l	117	117	0	100	0.709	8.390
35	sio2	Silicium (SiO2, AAS)	mg SiO2	23	23	0	100	17.165	19.000	1	39	2	si	Silicium	mg/l	505	504	1	100	7.942	8.870	1	2	nh4	Ammonium	mg/l	7	7	0	100	0.670	1.900
40	mg	Magnesium	mg/l	258	258	0	100	6.425	7.560	1	41	2	k	Kalium	mg/l	256	256	0	100	6.425	7.560	1	2	mn	Mangaan	mg/l	556	556	0	100	0.514	16.500
41	k	Kalium	mg/l	256	256	0	100	6.425	7.560	1	42	2	hco3	Waterstofcarbonaat (in mmol/l)	mg/l	216	216	0	100	3.865	5.100	1	2	po4o	Ortho fosfaat	mg P/l	324	324	0	100	0.260	12.270
42	hco3	Waterstofcarbonaat (in mmol/l)	mg/l	216	216	0	100	3.865	5.100	1	43	2	po4o	Ortho fosfaat	mg P/l	170	170	0	100	2.172	2.510	1	2	po4o	Ortho fosfaat	mg P/l	117	117	0	100	0.228	2.740
43	f	Fluoride	mg/l	33	23	10	70	0.095	0.120	1	44	2	na	Natrium	mg/l	33	23	10	70	0.095	0.120	1	2	po4o	Ortho fosfaat	mg P/l	117	117	0	100	0.228	2.740
44	no2	Nitriet	mg N/l	171	92	79	54	0.007	0.013	1	45	2	cl	Chloride	mg/l	85	85	0	100	0.068	0.500	1	2	fe	Liizer	mg/l	557	557	0	100	13.655	26.500
45	no3	Nitraat	mg N/l	171	89	82	52	0.179	0.340	1	46	2	no2	Nitriet	mg N/l	453	452	1	100	36.274	102.000	1	2	cl	Chloride	mg/l	91	91	0	100	38.659	58.000
46	no2	Nitriet	mg N/l	171	89	82	52	0.179	0.340	1	47	2	nh4	Ammonium	mg/l	374	371	3	99	0.182	0.590	1	2	po4o	Ortho fosfaat	mg P/l	87	86	1	99	0.200	0.340
47	no3	Nitraat	mg/l	300	149	151	50	0.025	0.086	1	48	2	nh4	Ammonium	mg/l	554	542	12	98	0.233	1.600	1	2	nh4	Ammonium	mg/l	938	602	336	64	0.421	6.800
48	cu	Koperoplossend vermoge	ug/l Cu	115	115	0	100	4411.304	4800.000	1	49	2	f	Fluoride	mg/l	49	37	12	76	0.105	0.220	1	2	po4o	Ortho fosfaat	mg P/l	397	212	185	53	0.192	1.600
49	cu	Koperoplossend vermoge	ug/l Cu	115	115	0	100	3789.565	4200.000	1	50	3	ba	Barium	ug/l	30	24	6	80	26.217	31.000	1	2	no2	Nitriet	mg N/l	474	171	303	36	0.033	0.660
50	ba	Barium	ug/l	30	24	6	80	26.217	31.000	1	51	3	zn	Zink	ug/l	118	43	75	36	32.558	920.000	1	2	no3	Nitraat	mg N/l						

1	Sort on A (low to high), H and I (high to low)						Total number of samples = 864		
2	Par.	Parameter	Unit	Raw Count	Raw Count	Raw Count <	Mean	Max	
3						% >MDL			
78	5	c37b	Bact. v/d coligroep 300 ml n/300ml	287	6	281	2	1.167	3.000
79	5	coli37	Bacterien van de coligroep kve/100n	289	5	284	2	0.600	1.000
80	5	ecoli	E.coli kve/100n	294	5	289	2	0.200	1.000
81	5	c37a	Bact. v/d coligroep 100 ml kve/100n	295	3	292	1	1.000	1.000
82									
83									
84	0	volume	Volume van het concentraat ml	4	4	0	100	526.250	561.000
85	0	opgz-t	Totaal opgeloste zouten (ber)mg/l	86	86	0	100	331.377	364.000
86	0	tmp-ph	* Zuurgraad gemeten bij (ten)graden C	73	73	0	100	18.285	22.800
87	0	tmp-egv	* EGV gemeten bij (autom. c)graden C	70	70	0	100	18.270	22.800
88	0	tmp-phv	* pH veldmeting gemeten bij graden C	1	1	0	100	10.400	10.400
89	0	tijdh	Tijdelijke hardheid mmol/l	2	2	0	100	1.180	1.220
90	0	ingezet	Aantal kolonies ter bevestiging n	1	1	0	100	1.000	1.000
91	0	beveco	Aantal bevestigde kolonies E n	1	1	0	100	1.000	1.000
92	0	faagc	Concentrerend bacteriofagen 1=ja/0=n	3	3	0	100	1.000	1.000
93	0	bg37	Bevestiging bacterien coli 37 1=ja/0=n	4	4	0	100	0.500	1.000
94	0	aoxber	Adsorbeerbare organohalogenen/umol/l	101	101	0	100	0.292	0.779
95	0	np-lct	Som N/P bestrijdingsmiddel/ug/l	6	6	0	100	0.283	0.480
96	0	cfx-lct	Som chloorfenoxycarbonzuren/ug/l	3	3	0	100	0.063	0.100
97	0	egv-pd	EGV-verschil (lab/veld - anal) mS/m	2	2	0	100	0.000	0.000
98	0	co3	Carbonaat	55	55	0	100	0.000	0.000
99	0	bevc37	Aantal bevestigde kolonies c n	1	1	0	100	0.000	0.000
100	0	mase-	#NAME?	4	4	0	100	0.000	0.000
101	0	mase+	#NAME?	4	4	0	100	0.000	0.000
102	0	tripet	Som tri- en tetracloroetheer ug/l	5	5	0	100	0.000	0.000
103	0	12dcee	1,2-dichlooretheen (cis + tra)ug/l	5	5	0	100	0.000	0.000
104	0	mepak10	PAK, som van 10 (WLB) ug/l	2	2	0	100	0.000	0.000
105	0	pcbt	Som PCB ug/l	5	5	0	100	0.000	0.000
106	0	hepclep	Heptachloorepoxide (cis + tr)ug/l	5	5	0	100	0.000	0.000
107	0	25dcfen	2,5-dichloofenol ug/l	2	2	0	100	0.000	0.000
108	0	aldi	Aldicarbcomponenten	2	2	0	100	0.000	0.000
109	0	msddt	Som van gemeten DD-comp ug/l	116	115	1	99	1.512	4.330
110	0	ecolia	Verdachte kolonies E.coli kve/100m	29	28	1	97	0.000	0.000
111	0	aox	Adsorbeerbare organohalogenen/ug/l	101	97	4	96	10.616	28.000
112	0	msddt	Som diversen GC/MS ug/l	112	101	11	90	0.406	0.800
113	0	ecost	E.coli standaard kve/100m	4	3	1	75	0.000	0.000
114	0	pestt	Som gemeten pesticiden ug/l	98	61	37	62	1.505	4.330
115	0	wvoc-t	Som zeer vluchtige organohalogenen/ug/l	17	9	8	53	0.107	0.180
116	0	indol	Bevestiging E.coli % positief	216	97	119	45	0.000	0.000
117	0	123tcpa	(1,2,3-trichloorpropaan ug/l)	10	4	6	40	0.000	0.000
118	0	onzd	Onderzoek	3	1	2	33	1.000	1.000
119	0	np0604	(r)phoraat ng/l	8	2	6	25	0.000	0.000
120	0	disulfot	(n)disulfoton ng/l	8	2	6	25	0.000	0.000
121	0	26dcfen	2,6-dichloofenol ug/l	9	2	7	22	0.000	0.000
122	0	dcivos	(n) dichloorvos ng/l	16	2	14	13	0.000	0.000
123	0	mevinfos	mevinphos ng/l	16	2	14	13	0.000	0.000
124	0	etprofos	(ethoprophos ng/l)	16	2	14	13	0.000	0.000
125	0	demsmet	demeton-s-methyl ng/l	16	2	14	13	0.000	0.000
126	0	sulfotep	(sulfotep ng/l)	16	2	14	13	0.000	0.000
127	0	atrazine	(atrazine ng/l)	16	2	14	13	0.000	0.000
128	0	dimethoa	dimethoat ng/l	16	2	14	13	0.000	0.000
129	0	terbutaz	(terbutylazine ng/l)	16	2	14	13	0.000	0.000
130	0	diazinon	(diazinon ng/l)	16	2	14	13	0.000	0.000
131	0	pirimica	(pirimicarb ng/l)	16	2	14	13	0.000	0.000
132	0	desmetry	desmetryn ng/l	16	2	14	13	0.000	0.000
133	0	metribuc	metribucyn ng/l	16	2	14	13	0.000	0.000
134	0	parmeth	parathion-methyl ng/l	16	2	14	13	0.000	0.000
135	0	fenclofos	(fenchlophos ng/l)	16	2	14	13	0.000	0.000
136	0	paroxyth	(paraoxon-ethyl ng/l)	16	2	14	13	0.000	0.000
137	0	terbutry	(terbutryn ng/l)	16	2	14	13	0.000	0.000
138	0	tdimefon	(triadimefon ng/l)	16	2	14	13	0.000	0.000
139	0	partetyl	(parathion-ethyl ng/l)	16	2	14	13	0.000	0.000
140	0	brfosmet	bromophos-methyl ng/l	16	2	14	13	0.000	0.000
141	0	penconaz	penconazool ng/l	16	2	14	13	0.000	0.000
142	0	tdimenol	(triadimenol ng/l)	16	2	14	13	0.000	0.000
143	0	brfoseth	(bromophos-ethyl ng/l)	16	2	14	13	0.000	0.000
144	0	methidat	(methidathion ng/l)	16	2	14	13	0.000	0.000
145	0	ethion	(n)ethion ng/l	16	2	14	13	0.000	0.000
146	0	propinco	propinconazool ng/l	16	2	14	13	0.000	0.000
147	0	azimfet	(azimfos-methyl ng/l)	16	2	14	13	0.000	0.000
148	0	pyrazof	pyrazophos ng/l	16	2	14	13	0.000	0.000
149	0	tame	TAME (geen Q) ug/l	27	2	25	7	0.000	0.000
150	0	disopet	disopropylether (geen Q) ug/l	27	2	25	7	0.000	0.000
151	0	vbcpsms	Opstanden ICP-MS j/n	74	2	72	3	1.000	1.000

Sort on L (low to high), S and T (high to low)		Total number of samples = 4133			Mean	Max
Par.	Parameter	Unit	PPs Count	PPs Count <	% >MDL	
4	11dcee	1,1-Dichlooretheen ug/l	239	33	206	14
4	tolueen	tolueen ug/l	206	24	182	12
4	fenol	fenol ug/l	66	6	60	9
4	13dcpa	1,3-dichloorpropaan ug/l	1961	178	1783	9
4	11dcpa	1,1-dichloorpropaan ug/l	1931	149	1782	8
4	c-hexeer	c-hexeer cyclohexeen ug/l	145	8	137	6
4	3c1prope3	3-Chloor-1-propeen ug/l	239	13	226	5
4	aldrin	(n)Aldrin ng/l	73	3	70	4
4	11dcpa	1,1-dichloorpropaan ug/l	1893	77	1816	4
4	n-hexaan	n-hexaan ng/l	60	2	58	3
4	benzeen	benzeen ug/l	213	7	206	3
4	vinylchl	Chlooretheen (vinylchlorid)ug/l	239	6	233	3
4	aniline	aniline ug/l	54	1	53	2
4	pcb180	(PCB 180 ng/l)	62	1	61	2
4	clidazon	clidazon ug/l	72	1	71	1
4	pp-ddt	(np,p, DDT ng/l)	73	1	72	1
4	dieldrin	(Dieldrin ng/l)	73	1	72	1
4	thf	tetrahydrofuraan ug/l	239	3	236	1
4	11c1pe	trans 1-Chloor-1-propeen ug/l	239	3	236	1
4	c-hexaan	c-hexaan cyclohexaan ug/l	194	2	192	1
4	m-p-xyle	m-p-xyle ug/l	213	2	211	1
4	clethaan	Chlooretheen ug/l	239	2	237	1
4	c1c1pe	cis 1-Chloor-1-propeen ug/l	239	2	237	1
4	124tben	1,2,4-trichloorbenzeen ug/l	194	1	193	1
4	122tcpa	1,2,2-trichloorpropaan ug/l	224	1	223	0.4
4	dcm	Dichloormethaan ug/l	239	1	238	0.4
5	kg122	Koloniegetal bij 22 C kve/ml	26	18	8	69
5	c37a	Bact. v/d coligroep 100 ml kve/100n	40	2	38	5
5	coli37	Bacterien van de coligroep kve/100n	21	1	20	5
0	volume	Volume liter	1	1	0	100
0	oxidase	Oxidase-reactie tlv coli 37 C % positief	1	1	0	100
0	tmp-ph	* Zuurgraad gemeten bij (ten)graden C	184	184	0	100
0	tmp-egv	* EGV gemeten bij (autom. c)graden C	184	184	0	100
0	aox	Adsorbeerbare organohalogenen/ug/l	4	4	0	100
0	aocl	A.O.Cl. ug/l	24	24	0	100
0	aoxber	Adsorbeerbare organohalogenen/umol/l	4	4	0	100
0	ecolia	Verdachte kolonies E.coli kve/100m	15	15	0	100
0	indol	Bevestiging E.coli % positief	1	1	0	100
0	aantal	Aantal n	1	1	0	100
0	bg37	Bevestiging bacterien coli 37 1=ja/0=n	1	1	0	100
0	12dcee	1,2-dichlooretheen (cis + tra)ug/l	156	156	0	100
0	mepak10	PAK, som van 10 (WLB) ug/l	33	33	0	100
0	pcbt	Som PCB ug/l	58	58	0	100
0	hepclep	Heptachloorepoxide (cis + tr)ug/l	58	58	0	100
0	25+6dctf	2,5+2,6-dichloofenol ug/l	8	8	0	100
0	235+6tcf	2,3,5+2,3,6-trichloofenol ug/l	8	8	0	100
0	etridaz	etridiazool (geen Q) ug/l	1	1	0	100
0	msddt	Som van gemeten DD-comp ug/l	534	485	49	91
0	np-lct	Som N/P bestrijdingsmiddel ug/l	23	17	6	74
0	cfx-lct	Som chloorfenoxycarbonzuren ug/l	44	29	15	66
0	msddt	Som diversen GC/MS ug/l	333	215	118	65
0	tripet	Som tri- en tetracloroetheer ug/l	114	61	53	54
0	pestt	Som gemeten pesticiden ug/l	340	178	162	52
0	np0604	(r)phoraat ng/l	15	5	10	33
0	disulfot	(n)disulfoton ng/l	15	5	10	33
0	wvoc-t	Som zeer vluchtige organohalogenen/ug/l	236	70	166	30
0	nfen-lct	Som nitrofenolen, LC/MS ug/l	22	6	16	27
0	eoel	E.O.Cl. ug/l	4	1	3	25
0	methoxyc	methoxychlor ug/l	31	7	24	23
0	pclani	(n) pentachlooraniline ng/l	31	7	24	23
0	isodrin	isodrin ug/l	62	8	54	13
0	nitro-wt	Som Nitrofenolen ug/l	53	6	47	11
0	msbxtex	Som BTEX ug/l	52	4	48	8
0	dcivos	(n) dichloorvos ng/l	66	5	61	8
0	mevinfos	mevinphos ng/l	66	5	61	8

1 2 3	Sort on A (low to high), H and I (high to low)							Sort on L (low to high), S and T (high to low)							Sort on W (low to high), AD and AE (high to low)															
	Par.	Parameter	Unit	Total number of samples = 864			Mean	Max	Par.	Parameter	Unit	Total number of samples = 4133			Mean	Max	Par.	Parameter	Unit	Total number of samples = 2200			Mean	Max						
				Raw Count	Raw Count	Raw %>MDL						PPs Count	PPs Count	PPs %>MDL						WPs Count	WPs Count	WPs %>MDL								
151	0	vbiqpcms	Opstarten ICP-MS	j/n	74	2	72	3	1.000	1.000	0	pirimica	(pirimicarb	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	124tber	1,2,4-trichloroerbenzeen	ug/l	386	9	377	2	0.005	0.020
152	0	22dcpa	2,2-dichloropropan	ug/l	217	2	215	1	0.000	0.000	0	desmetry	desmetryn	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	i-probe	iso-propylbenzeen	ug/l	386	9	377	2	0.003	0.020
153	0	11dcpe	1,1-dichloropropeen	ug/l	217	2	215	1	0.000	0.000	0	metribuc	metribucin	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	4iptolue	4-isopropyltolueen	ug/l	386	9	377	2	0.002	0.020
154	0	13dcpe	cis 1,3-dichloropropeen	ug/l	217	2	215	1	0.000	0.000	0	partmeth	parathion-methyl	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	11dcps	1,1-dichloropropan	ug/l	1137	25	1112	2	0.072	0.200
155	0	113dcpe	trans 1,3-dichloropropeen	ug/l	217	2	215	1	0.000	0.000	0	fenclifos	(fenchlorphos	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	b-hch	(nlb-HCH	ng/l	47	1	46	2	10.000	10.000
156	0	23dcpe	2,3-dichloropropeen	ug/l	217	2	215	1	0.000	0.000	0	parothy	paraaxon-ethyl	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	n-butern	n-butylbenzeen	ug/l	386	8	378	2	0.005	0.024
157	0	c_bact	Conclusie(s) bacteriologie		314	1	313	0	1.000	1.000	0	terbutry	(terbutryn	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	13dcben	1,3-dichloroerbenzeen	ug/l	386	8	378	2	0.003	0.026
158	0	cd	Cadmium	ug/l	42	0	42	0	#DIV/0!	0.000	0	tdimefon	(triadimefon	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	12dcben	1,2-dichloroerbenzeen	ug/l	386	8	378	2	0.002	0.016
159	0	fa-ontsl	Broomontsluiting		4	0	4	0	#DIV/0!	0.000	0	partethy	(parathion-ethyl	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	14dcben	1,4-dichloroerbenzeen	ug/l	386	8	378	2	0.002	0.015
160	0	hg	Kwik	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000	0	brfosmet	bromophos-methyl	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	chloroeb	chloroerbenzeen	ug/l	386	8	378	2	0.002	0.008
161	0	cn	Cyanide	ug/l	30	0	30	0	#DIV/0!	0.000	0	penconaz	penconazool	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	2ctoluee	2-chloorolueen	ug/l	386	8	378	2	0.001	0.005
162	0	sulfide	Sulfide opgel.	mg S/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000	0	tdimenol	(triadimenol	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	carbendi	carbendazim	ug/l	97	2	95	2	0.025	0.040
163	0	c44a	Thermotolerante coli 44C 10 kve/100m		3	0	3	0	#DIV/0!	0.000	0	brfsoeth	(bromophos-ethyl	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	simazine	simazine	ug/l	248	5	243	2.0	0.142	0.200
164	0	c44b	Thermotolerante coli 44C 30 n/300ml		3	0	3	0	#DIV/0!	0.000	0	methidat	methidathion	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	111tca	1,1,1-trichloorethaan	ug/l	598	12	586	2.0	0.276	1.300
165	0	fscs	Faecaale streptococcen	kve/100m	5	0	5	0	#DIV/0!	0.000	0	ethion	(nE ethion	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	bbfluant	benzo(b)fluorantheen	ug/l	51	1	50	2.0	0.030	0.030
166	0	srcl	Sulfiet reducerende clostridii kve/100m		2	0	2	0	#DIV/0!	0.000	0	propinco	propiconazool	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	br2clich	(dibromochloor)methaan	ug/l	54	1	53	1.9	0.100	0.100
167	0	volume	Volume	liter	4	0	4	0	#DIV/0!	0.000	0	ozinmet	azinmet-methyl	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	brclch2	(broomchloormethaan	ug/l	59	1	58	1.7	0.100	0.100
168	0	legi-dna	Legionella pneumophila	cDNA/l	1	0	1	0	#DIV/0!	0.000	0	pyrazolo	pyrazophos	ng/l	66	5	61	8	0.000	0.000	4	12dbea	1,2-dibroomethaan	ug/l	360	6	354	1.7	0.243	0.370
169	0	faag	Bacteriofagen	pve/l	17	0	17	0	#DIV/0!	0.000	0	msart	Som Aromaten/ailfaten	ug/l	58	4	54	7	0.028	0.040	4	diisopet	diisopropylether (geen Q)	ug/l	155	2	153	1	0.055	0.060
170	0	faagf	F-specifieke RNA-bacteriofa	pve/l	7	0	7	0	#DIV/0!	0.000	0	dimethoa	dimethoat	ng/l	74	5	69	7	0.000	0.000	4	atridpro	atrazine-desisopropyl	ug/l	248	3	245	1	0.073	0.100
171	0	aantal	Aantal	n	4	0	4	0	#DIV/0!	0.000	0	1cpentaa	1-chloorpentaan	ug/l	160	7	153	4	0.000	0.000	4	3ctprop	3-Chloor-1-propeen	ug/l	366	4	362	1	0.123	0.220
172	0	collagf	Somatische collagfen	pve/l	8	0	8	0	#DIV/0!	0.000	0	22dcpa	2,2-dichloropropan	ug/l	1858	76	1782	4	0.000	0.000	4	monuron	Monuron	ug/l	287	3	284	1	0.010	0.010
173	0	volumeb	Volume in bewerking	ml	4	0	4	0	#DIV/0!	0.000	0	c13dcpe	cis 1,3-dichloropropeen	ug/l	1858	76	1782	4	0.000	0.000	4	brcl2ch	broomdichloormethaan	ug/l	598	6	592	1	0.213	0.620
174	0	faagfl	F-specifieke RNA-bacteriofa	pve/l	4	0	4	0	#DIV/0!	0.000	0	113dcpe	trans 1,3-dichloropropeen	ug/l	1858	76	1782	4	0.000	0.000	4	deet	deet	ug/l	103	1	102	1	0.080	0.080
175	0	fenl	Fenol-index	ug/l	8	0	8	0	#DIV/0!	0.000	0	23dcpe	2,3-dichloropropeen	ug/l	1858	76	1782	4	0.000	0.000	4	pencycu	pencycuron	ug/l	112	1	111	1	0.010	0.010
176	0	vbeocl	Vb:E.OCl water	j/n	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000	0	msfent	Som Fenolen	ug/l	58	2	56	3	0.050	0.050	4	c-hexee	cyclohexeen	ug/l	366	3	363	1	0.080	0.110
177	0	eocl	E.O.Cl.	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000	0	msamine	Total aromatic amines	ug/l	53	1	52	2	0.200	0.200	4	11c1pe	trans 1-Chloor-1-propeen	ug/l	366	3	363	1	0.073	0.130
178	0	f7-extr	Extractie cholinesterase remmend ver		2	0	2	0	#DIV/0!	0.000	0	etbe	ETBE	ug/l	151	2	149	1	0.000	0.000	4	122tca	1,2,2-trichloropropan	ug/l	499	4	495	1	0.110	0.160
179	0	chol7	nCholinesterase remmend ve ug p-oxl		2	0	2	0	#DIV/0!	0.000	0	f13-dest	Destrukctie Albuminoid-N	ug/l	85	0	85	0	#DIV/0!	0.000	4	13dcps	1,3-dichloropropan	ug/l	1137	9	1128	1	0.030	0.050
180	0	vbvoc	Voorbewerking GCMS vlucht/j/n		39	0	39	0	#DIV/0!	0.000	0	f11-dest	Destrukctie Kjeldahl-N	ug/l	7	0	7	0	#DIV/0!	0.000	4	dcdma	dichlorodifluormethaan	ug/l	253	2	251	1	0.105	0.110
181	0	etbe	ETBE	ug/l	39	0	39	0	#DIV/0!	0.000	0	f12-dest	Destrukctie Totaal Fosfaat	ug/l	117	0	117	0	#DIV/0!	0.000	4	chlorof	chloroerbenzeen (chloroform ug)	ug/l	598	4	594	1	0.073	0.090
182	0	n-hexaan	n-hexaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0.000	0	vbiqpcms	Opstarten ICP-MS	j/n	36	0	36	0	#DIV/0!	0.000	4	thiabez	thiabendazool	ug/l	170	1	169	1	0.220	0.220
183	0	n-heptaa	n-heptaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0.000	0	sb	(nDES Antimon	ug/l	34	0	34	0	#DIV/0!	0.000	4	profam	profam	ug/l	217	1	216	0	0.070	0.070
184	0	n-octaan	n-octaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0.000	0	fa-ontsl	Broomontsluiting		5	0	5	0	#DIV/0!	0.000	4	3+4-mter	3+4-methylfenol	ug/l	217	1	216	0	0.020	0.020
185	0	n-nonaan	n-nonaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0.000	0	hg	Kwik	ug/l	85	0	85	0	#DIV/0!	0.000	4	diinoter	Dinoterb	ug/l	218	1	217	0	0.010	0.010
186	0	n-decaan	n-decaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0.000	0	hg	(nDES Kwik	ug/l	27	0	27	0	#DIV/0!	0.000	4	mcpa	MCPA	ug/l	236	1	235	0	0.090	0.090
187	0	n-undeca	n-undecaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0.000	0	cn	Cyanide	ug/l	111	0	111	0	#DIV/0!	0.000	4	terbutaz	terbutylazine	ug/l	248	1	247	0	0.100	0.100
188	0	n-dodeca	n-dodecaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0.000	0	sulfide	Sulfide opgel.	mg S/l	1	0	1	0	#DIV/0!	0.000	4	23dcpe	2,3-dichloropropeen	ug/l	1137	4	1133	0	0.088	0.130
189	0	n-tridec	n-tridecaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0.000	0	ecoliv	E.coli in groot volume	kve/l	1	0	1	0	#DIV/0!	0.000	4	metoxur	Metoxuron	ug/l	287	1	286	0	0.030	0.030
190	0	n-tetrad	n-tetradecaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0.000	0	ecoli	E.coli mbv CC	kve/100m	21	0	21	0	#DIV/0!	0.000	4	monolin	Monolinuron	ug/l	293	1	292	0	0.010	0.010
191	0	n-pentad	n-pentadecaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0.000	0	c44a	Thermotolerante coli 44C 10 kve/100m		19	0	19	0	#DIV/0!	0.000	4	tetra	tetrachloormethaan (tetra	ug/l	598	2	596	0	0.295	0.510
192	0	n-hexade	n-hexadecaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0.000	0	feni	Fenol-index	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	0.000	4	ct1c1pe	cis 1-Chloor-1-propeen	ug/l	366	1	365	0	0.060	0.060
193	0	benzeen	benzeen	ug/l	27	0	27	0	#DIV/0!	0																				

Sort on A (low to high), H and I (high to low)		Total number of samples = 864						
Par.	Parameter	Unit	Raw Count	Raw Count	Raw % >MDL	Mean	Max	
224	0 12dcbenz 1,2-dichloorbenzen	ug/l	27	0	27	0	#DIV/0!	
225	0 13dcbenz 1,3-dichloorbenzen	ug/l	27	0	27	0	#DIV/0!	
226	0 14dcbenz 1,4-dichloorbenzen	ug/l	27	0	27	0	#DIV/0!	
227	0 123cben 1,2,3-trichloorbenzen	ug/l	27	0	27	0	#DIV/0!	
228	0 124cben 1,2,4-trichloorbenzen	ug/l	27	0	27	0	#DIV/0!	
229	0 135cben 1,3,5-trichloorbenzen	ug/l	27	0	27	0	#DIV/0!	
230	0 2ctoluee 2-chloorlooleen	ug/l	27	0	27	0	#DIV/0!	
231	0 4ctoluee 4-chloorlooleen	ug/l	27	0	27	0	#DIV/0!	
232	0 thf tetrahydrofuraan	ug/l	56	0	56	0	#DIV/0!	
233	0 ththioph tetrahydrothiofeen	ug/l	56	0	56	0	#DIV/0!	
234	0 1cpentaa 1-chloorpentaan	ug/l	23	0	23	0	#DIV/0!	
235	0 methcyhe methyloxylohexaan	ug/l	27	0	27	0	#DIV/0!	
236	0 c-hexeen cyclohexeen	ug/l	23	0	23	0	#DIV/0!	
237	0 msart Som Aromaten/allifaten	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	
238	0 122cpa 1,2,2-trichloorpropan	ug/l	53	0	53	0	#DIV/0!	
239	0 mtc Methylsithiocyanaat	ug/l	213	0	213	0	#DIV/0!	
240	0 o2-extr Extractie VOCL (water)	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	
241	0 chlorofo trichloormethaan (chloroform)	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	
242	0 tetra (nDE)tetraclorokoelst (tetra)	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	
243	0 brcl2h2 (r)broomchloormethaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	
244	0 brcl2ch (r)broomdichloormethaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	
245	0 brcl3c (nI)broomtrichloormethaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	
246	0 br2clch (r)dbroomchloormethaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	
247	0 bromofor tribroommethaan (bromofom)	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	
248	0 12dcea (r)1,2-dichlooreethaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	
249	0 112tcea (1,1,2-trichlooreethaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	
250	0 1122tcea 1,1,2,2-tetrachlooreethaan	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	
251	0 tri trichlooreethen (tri)	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	
252	0 per (nDE)tetraclorokoelst (per)	ug/l	10	0	10	0	#DIV/0!	
253	0 13dcpa (r)1,3-dichloorpropan	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	
254	0 chlorofo trichloormethaan (chloroform)	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
255	0 tetra tetraclorokoelst (tetra)	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
256	0 brcl2ch2 broomchloormethaan	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
257	0 brcl2ch3 broomdichloormethaan	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
258	0 brcl3c broomtrichloormethaan	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
259	0 br2clch dibroomchloormethaan	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
260	0 bromofor tribroommethaan (bromofom)	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
261	0 12dcea 1,2-dichlooreethaan	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
262	0 111tcea 1,1,1-trichlooreethaan	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
263	0 112tcea 1,1,2-trichlooreethaan	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
264	0 1122tcea 1,1,2,2-tetrachlooreethaan	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
265	0 tri trichlooreethen (tri)	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
266	0 per tetraclorokoelst (per)	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
267	0 hexclth hexachlooreethaan	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
268	0 hexclbut hexachloorbutediëen	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
269	0 trixch4 Som trihalogenmethanen	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	
270	0 voc-t Som vluchtige organohalogen	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
271	0 ch3br Broommethaan	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	
272	0 ch3cl Chloormethaan	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
273	0 dcm Dichloormethaan	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
274	0 vinylchl Chlooreethen (vinylchloride)	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
275	0 11dcee 1,1-Dichlooreethen	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
276	0 c12dcee cis-1,2-Dichlooreethen	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
277	0 t12dcee trans-1,2-Dichlooreethen	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
278	0 c1ethaan Chlooreethaan	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
279	0 3c1prope 3-Chloor-1-propaan	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
280	0 2c1prope 2-Chloor-1-propaan	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
281	0 c1c1pe cis-1-Chloor-1-propaan	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
282	0 t1c1pe trans-1-Chloor-1-propaan	ug/l	17	0	17	0	#DIV/0!	
283	0 butmetet Butylmethyl ether	ug/l	41	0	41	0	#DIV/0!	
284	0 freon113 freon-113	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	
285	0 1112tcea 1,1,1,2-tetrachlooreethaan	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	
286	0 mbe MTBE	ug/l	41	0	41	0	#DIV/0!	
287	0 12dbee 1,2-dibroomethaan	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	
288	0 112tcp 1,1,2-trichloorpropan	ug/l	43	0	43	0	#DIV/0!	
289	0 o1-extr Extractie voor pcb's en ocb's(water)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	
290	0 a-hch (nE)a-HCH	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	
291	0 b-hch (nE)b-HCH	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	
292	0 d-hch (nE)d-HCH	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	
293	0 g-hch (nE)g-HCH (lindaan)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	
294	0 hcb (nDE)HCB	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	
295	0 pcnb (nDI)PCNB	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	
296	0 dcibenil (r)Dichlobenil	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	
297	0 aldrin (nD)Aldrin	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	
298	0 deldrin (nD)Dieldrin	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	

Sort on L (low to high), S and T (high to low)		Total number of samples = 4133						
Par.	Parameter	Unit	PPS Count	PPS Count	PPS % >MDL	Mean	Max	
0 1234mbe 1,2,3,4-tetramethylbenzen	ug/l	170	0	170	0	#DIV/0!	0.000	
0 1235mbe 1,2,3,5-tetramethylbenzen	ug/l	170	0	170	0	#DIV/0!	0.000	
0 1236mbe 1,2,4,5-tetramethylbenzen	ug/l	170	0	170	0	#DIV/0!	0.000	
0 2etoluee 2-ethyltooleen	ug/l	194	0	194	0	#DIV/0!	0.000	
0 3etoluee 3-ethyltooleen	ug/l	194	0	194	0	#DIV/0!	0.000	
0 4etoluee 4-ethyltooleen	ug/l	194	0	194	0	#DIV/0!	0.000	
0 12debenz 1,2-diethylbenzen	ug/l	194	0	194	0	#DIV/0!	0.000	
0 13debenz 1,3-diethylbenzen	ug/l	170	0	170	0	#DIV/0!	0.000	
0 14debenz 1,4-diethylbenzen	ug/l	170	0	170	0	#DIV/0!	0.000	
0 13dipben 1,3-diisopropylbenzen	ug/l	194	0	194	0	#DIV/0!	0.000	
0 135dipbe 1,3,5-triisopropylbenzen	ug/l	194	0	194	0	#DIV/0!	0.000	
0 styreen styreen	ug/l	198	0	198	0	#DIV/0!	0.000	
0 bifenyil biphenyl	ug/l	171	0	171	0	#DIV/0!	0.000	
0 biph.eth biphenylether	ug/l	171	0	171	0	#DIV/0!	0.000	
0 chloroeb chlorobenzen	ug/l	198	0	198	0	#DIV/0!	0.000	
0 123dcben 1,2-dichloorbenzen	ug/l	194	0	194	0	#DIV/0!	0.000	
0 134dcben 1,3-dichloorbenzen	ug/l	194	0	194	0	#DIV/0!	0.000	
0 144dcben 1,4-dichloorbenzen	ug/l	194	0	194	0	#DIV/0!	0.000	
0 123ctben 1,2,3-trichloorbenzen	ug/l	170	0	170	0	#DIV/0!	0.000	
0 135ctben 1,3,5-trichloorbenzen	ug/l	170	0	170	0	#DIV/0!	0.000	
0 2ctoluee 2-chloorlooleen	ug/l	194	0	194	0	#DIV/0!	0.000	
0 4ctoluee 4-chloorlooleen	ug/l	194	0	194	0	#DIV/0!	0.000	
0 13dipben 1,3-diisopropylbenzen	ug/l	194	0	194	0	#DIV/0!	0.000	
0 mtc Methylsithiocyanaat	ug/l	1649	0	1649	0	#DIV/0!	0.000	
0 o2-extr Extractie VOCL (water)	ug/l	843	0	843	0	#DIV/0!	0.000	
0 chlorofo trichloormethaan (chloroform)	ug/l	89	0	89	0	#DIV/0!	0.000	
0 tetra (nDE)tetraclorokoelst (tetra)	ug/l	89	0	89	0	#DIV/0!	0.000	
0 brcl2h2 (r)broomchloormethaan	ug/l	89	0	89	0	#DIV/0!	0.000	
0 brcl2ch (r)broomdichloormethaan	ug/l	89	0	89	0	#DIV/0!	0.000	
0 brcl3c (nI)broomtrichloormethaan	ug/l	89	0	89	0	#DIV/0!	0.000	
0 br2clch (r)dbroomchloormethaan	ug/l	89	0	89	0	#DIV/0!	0.000	
0 bromofor tribroommethaan (bromofom)	ug/l	79	0	79	0	#DIV/0!	0.000	
0 12dcea (r)1,2-dichlooreethaan	ug/l	89	0	89	0	#DIV/0!	0.000	
0 111tcea (1,1,1-trichlooreethaan	ug/l	89	0	89	0	#DIV/0!	0.000	
0 112tcea (1,1,2-trichlooreethaan	ug/l	79	0	79	0	#DIV/0!	0.000	
0 1122tcea 1,1,2,2-tetrachlooreethaan	ug/l	79	0	79	0	#DIV/0!	0.000	
0 tri trichlooreethen (tri)	ug/l	89	0	89	0	#DIV/0!	0.000	
0 per (nDE)tetraclorokoelst (per)	ug/l	89	0	89	0	#DIV/0!	0.000	
0 13dcpa (r)1,3-dichloorpropan	ug/l	26	0	26	0	#DIV/0!	0.000	
0 chlorofo trichloormethaan (chloroform)	ug/l	169	0	169	0	#DIV/0!	0.000	
0 tetra tetraclorokoelst (tetra)	ug/l	169	0	169	0	#DIV/0!	0.000	
0 brcl2h2 (r)broomchloormethaan	ug/l	169	0	169	0	#DIV/0!	0.000	
0 brcl2ch (r)broomdichloormethaan	ug/l	169	0	169	0	#DIV/0!	0.000	
0 brcl3c (nI)broomtrichloormethaan	ug/l	169	0	169	0	#DIV/0!	0.000	
0 br2clch (r)dbroomchloormethaan	ug/l	169	0	169	0	#DIV/0!	0.000	
0 bromofor tribroommethaan (bromofom)	ug/l	169	0	169	0	#DIV/0!	0.000	
0 12dcea 1,2-dichlooreethaan	ug/l	169	0	169	0	#DIV/0!	0.000	
0 111tcea (1,1,1-trichlooreethaan	ug/l	169	0	169	0	#DIV/0!	0.000	
0 112tcea (1,1,2-trichlooreethaan	ug/l	169	0	169	0	#DIV/0!	0.000	
0 1122tcea 1,1,2,2-tetrachlooreethaan	ug/l	169	0	169	0	#DIV/0!	0.000	
0 tri trichlooreethen (tri)	ug/l	169	0	169	0	#DIV/0!	0.000	
0 per tetraclorokoelst (per)	ug/l	169	0	169	0	#DIV/0!	0.000	
0 hexclth hexachlooreethaan	ug/l	169	0	169	0	#DIV/0!	0.000	
0 hexclbut hexachloorbutediëen	ug/l	169	0	169	0	#DIV/0!	0.000	
0 trixch4 Som trihalogenmethanen	ug/l	114	0	114	0	#DIV/0!	0.000	
0 voc-t Som vluchtige organohalogen	ug/l	169	0	169	0	#DIV/0!	0.000	
0 ch3br Broommethaan	ug/l	32	0	32	0	#DIV/0!	0.000	
0 ch3cl Chloormethaan	ug/l	239	0	239	0	#DIV/0!	0.000	
0 c12dcee cis-1,2-Dichlooreethen	ug/l	239	0	239	0	#DIV/0!	0.000	
0 t12dcee trans-1,2-Dichlooreethen	ug/l	239	0	239	0	#DIV/0!	0.000	
0 2c1prope 2-Chloor-1-propaan	ug/l	239	0	239	0	#DIV/0!	0.000	
0 butmetet Butylmethyl ether	ug/l	176	0	176	0	#DIV/0!	0.000	
0 mbe MTBE	ug/l	176	0	176	0	#DIV/0!	0.000	
0 112tcp 1,1,2-trichloorpropan	ug/l	195	0	195	0	#DIV/0!	0.000	
0 freon113 freon-113	ug/l	88	0	88	0	#DIV/0!	0.000	
0 1112tcea 1,1,1,2-tetrachlooreethaan	ug/l	64	0	64	0	#DIV/0!	0.000	
0 12dbee 1,2-dibroomethaan	ug/l	64	0	64	0	#DIV/0!	0.000	
0 o1-extr Extractie voor pcb's en ocb's(water)	ng/l	73	0	73	0	#DIV/0!	0.000	
0 a-hch (nE)a-HCH	ng/l	73	0	73	0	#DIV/0!	0.000	
0 b-hch (nE)b-HCH	ng/l	73	0	73	0	#DIV/0!	0.000	
0 d-hch (nE)d-HCH	ng/l	73	0	73	0	#DIV/0!	0.000	
0 g-hch (nE)g-HCH (lindaan)	ng/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0.000	
0 hcb (nDE)HCB	ng/l	52	0	52	0	#DIV/0!	0.000	
0 pcnb (nDI)PCNB	ng/l	73	0	73	0	#DIV/0!	0.000	
0 dcibenil (r)Dichlobenil	ng/l	73	0	73	0	#DIV/0!	0.000	
0 aldrin (nD)Aldrin	ng/l	73	0	73	0	#DIV/0!	0.000	
0 deldrin (nD)Dieldrin	ng/l	73	0	73	0	#DIV/0!	0.000	

Sort on W (low to high), AD and AE (high to low)		Total number of samples = 2200						
Par.	Parameter	Unit	WPS Count	WPS Count	WPS % >MDL	Mean	Max	
0 n-nonaan n-nonaan	ug/l	20	8	12	40	0.000	0.000	
0 n-dodeca n-dodecaan	ug/l	20	8	12	40	0.000	0.000	
0 msart Som Aromaten/allifaten	ug/l	235	89	146	38	0.474	11.000	
0 tripert Som tri- en tetracloroethen	ug/l	496	184	312	37	0.579	17.000	
0 nitro-wt Som Nitrofenolen	ug/l	201	56	145	28	0.036	0.120	
0 msdtd Som van gemeten DD-componen	ug/l	1039	267	772	26	5.858	252.940	
0 msbtex Som BTEX	ug/l	233	57	176	24	0.599	11.000	
0 vvoc-t Som zeer vluchtige organohalogen	ug/l	364	79	285	22	2.681	38.940	

1 2 3	Sort on A (low to high), H and I (high to low)						Total number of samples = 864			Mean	Max
	Par.	Parameter	Unit	Raw	Raw	Raw	Mean	Max			
				Count A	Count	Count <					
299	0	endrin (nEndrin)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
300	0	heptacl (r-Heptachloor)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
301	0	heptachloroepoxide	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
302	0	a-endosu a-Endosulfan	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
303	0	b-endosu b-Endosulfan	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
304	0	op-dde (n.o.p. DDE)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
305	0	pp-dde (n.p.p. DDE)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
306	0	op-ddd (n.o.p. DDD)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
307	0	pp-ddd (n.p.p. DDD)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
308	0	op-ddt (n.f.o.p. DDT)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
309	0	pp-ddt (n.f.p.p. DDT)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
310	0	pcibenz (i-Pentachloorbenzeen)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
311	0	tecnazee Tecnazeeen	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
312	0	propachl (Propachloor)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
313	0	vinchloz (r-Vinchlozolin)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
314	0	alachlor (Alachloor)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
315	0	iodin (n-Iodin)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
316	0	metazacl Metazachloor	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
317	0	cpmeth cis-Permethrin	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
318	0	tpermeth trans-Permethrin	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
319	0	dichloro (dichloran)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
320	0	metolac (metolachloor)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
321	0	isobenza isobenzan	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
322	0	mirex (nDmirex)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
323	0	methoxyc methoxychlor	ng/l	14	0	14	0	#DIV/0!	0.000		
324	0	pcclanil (n-pentachlooraniline)	ng/l	14	0	14	0	#DIV/0!	0.000		
325	0	pcb28 (nPCB 28)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
326	0	pcb52 (nPCB 52)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
327	0	pcb101 (r-PCB 101)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
328	0	pcb118 (r-PCB 118)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
329	0	pcb138 (r-PCB 138)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
330	0	pcb153 (r-PCB 153)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
331	0	pcb180 (r-PCB 180)	ng/l	18	0	18	0	#DIV/0!	0.000		
332	0	ocb4 (nD Totaal OCB's)	ng/l	8	0	8	0	#DIV/0!	0.000		
333	0	pcb1 (nD Totaal PCB's)	ng/l	8	0	8	0	#DIV/0!	0.000		
334	0	vbbm GCMS voorbewerking	j/n	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
335	0	24+5dcfe 2,4+2,5-dichloorfenol	ug/l	7	0	7	0	#DIV/0!	0.000		
336	0	msfent Som Fenolen	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0.000		
337	0	a-hch a-HCH	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
338	0	b-hch b-HCH	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
339	0	d-hch d-HCH	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
340	0	g-hch g-HCH (lindaan)	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
341	0	hcb HCB	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
342	0	pcnb PCNB	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
343	0	dcibenil dichlobenil	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
344	0	aldrin aldrin	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
345	0	dieldrin dieldrin	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
346	0	endrin endrin	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
347	0	heptacl heptachloor	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
348	0	chepclep c-heptachlooropoxide	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
349	0	thepclep t-heptachlooropoxide	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
350	0	a-endosu a-endosulfan	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
351	0	b-endosu b-endosulfan	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
352	0	op-dde op-DDE	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
353	0	pp-dde pp-DDE	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
354	0	op-ddd op-DDD	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
355	0	pp-ddd pp-DDD	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
356	0	op-ddt op-DDT	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
357	0	pp-ddt pp-DDT	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
358	0	pcibenz pentachloorbenzeen	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
359	0	tecnazee tecnazeeen	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
360	0	propachl propachloor	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
361	0	alachlor alachloor	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
362	0	metazacl metazachloor	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
363	0	cpmeth c-permethrin	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
364	0	tpermeth t-permethrin	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
365	0	isobenza isobenzan	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
366	0	mirex mirex	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
367	0	methoxyc methoxychlor	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
368	0	pcb28 PCB-28	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
369	0	pcb52 PCB-52	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
370	0	pcb101 PCB-101	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
371	0	pcb118 PCB-118	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
372	0	pcb138 PCB-138	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		
373	0	pcb153 PCB-153	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000		

1 2 3	Sort on L (low to high), S and T (high to low)						Total number of samples = 4133			Mean	Max
	Par.	Parameter	Unit	PPs	PPs	PPs	Mean	Max			
				Count A	Count	Count <					
0	endrin (nEndrin)	ng/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0.000			
0	heptacl (r-Heptachloor)	ng/l	73	0	73	0	#DIV/0!	0.000			
0	heptachloroepoxide	ng/l	73	0	73	0	#DIV/0!	0.000			
0	a-endosu a-Endosulfan	ng/l	73	0	73	0	#DIV/0!	0.000			
0	b-endosu b-Endosulfan	ng/l	73	0	73	0	#DIV/0!	0.000			
0	op-dde (n.o.p. DDE)	ng/l	73	0	73	0	#DIV/0!	0.000			
0	pp-dde (n.p.p. DDE)	ng/l	73	0	73	0	#DIV/0!	0.000			
0	op-ddd (n.o.p. DDD)	ng/l	73	0	73	0	#DIV/0!	0.000			
0	pp-ddd (n.p.p. DDD)	ng/l	73	0	73	0	#DIV/0!	0.000			
0	op-ddt (n.f.o.p. DDT)	ng/l	73	0	73	0	#DIV/0!	0.000			
0	pcibenz (i-Pentachloorbenzeen)	ng/l	41	0	41	0	#DIV/0!	0.000			
0	tecnazee Tecnazeeen	ng/l	41	0	41	0	#DIV/0!	0.000			
0	propachl (Propachloor)	ng/l	41	0	41	0	#DIV/0!	0.000			
0	vinchloz (r-Vinchlozolin)	ng/l	41	0	41	0	#DIV/0!	0.000			
0	alachlor (Alachloor)	ng/l	41	0	41	0	#DIV/0!	0.000			
0	iodin (n-Iodin)	ng/l	41	0	41	0	#DIV/0!	0.000			
0	metazacl Metazachloor	ng/l	41	0	41	0	#DIV/0!	0.000			
0	cpmeth cis-Permethrin	ng/l	41	0	41	0	#DIV/0!	0.000			
0	tpermeth trans-Permethrin	ng/l	41	0	41	0	#DIV/0!	0.000			
0	dichloro (dichloran)	ng/l	41	0	41	0	#DIV/0!	0.000			
0	metolac (metolachloor)	ng/l	41	0	41	0	#DIV/0!	0.000			
0	isobenza isobenzan	ng/l	41	0	41	0	#DIV/0!	0.000			
0	mirex (nDmirex)	ng/l	41	0	41	0	#DIV/0!	0.000			
0	pcb28 (nPCB 28)	ng/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0.000			
0	pcb52 (nPCB 52)	ng/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0.000			
0	pcb101 (r-PCB 101)	ng/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0.000			
0	pcb118 (r-PCB 118)	ng/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0.000			
0	pcb138 (r-PCB 138)	ng/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0.000			
0	pcb153 (r-PCB 153)	ng/l	61	0	61	0	#DIV/0!	0.000			
0	ocb4 (nD Totaal OCB's)	ng/l	14	0	14	0	#DIV/0!	0.000			
0	pcb1 (nD Totaal PCB's)	ng/l	14	0	14	0	#DIV/0!	0.000			
0	vbbm GCMS voorbewerking	j/n	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	34clfenol 3+4-chloorfenol	ug/l	24	0	24	0	#DIV/0!	0.000			
0	234xtcf 2,3,4,5+2,3,4,6-tetraclorofenol	ug/l	24	0	24	0	#DIV/0!	0.000			
0	24+5dcfe 2,4+2,5-dichloorfenol	ug/l	58	0	58	0	#DIV/0!	0.000			
0	26dcifen 2,6-dichloorfenol	ug/l	58	0	58	0	#DIV/0!	0.000			
0	235ctife 2,3,5-trichloorfenol	ug/l	58	0	58	0	#DIV/0!	0.000			
0	236ctife 2,3,6-trichloorfenol	ug/l	58	0	58	0	#DIV/0!	0.000			
0	345ctife 3,4,5-trichloorfenol	ug/l	58	0	58	0	#DIV/0!	0.000			
0	4cl2mfen 4-chloor-2-methylfenol	ug/l	58	0	58	0	#DIV/0!	0.000			
0	3+435edf 3+4-ethyl+3,5-dimethylfenol	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000			
0	tofalnt Som Alkylfenolen	ug/l	21	0	21	0	#DIV/0!	0.000			
0	a-hch a-HCH	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	b-hch b-HCH	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	d-hch d-HCH	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	g-hch g-HCH (lindaan)	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	hcb HCB	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	pcnb PCNB	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	dcibenil dichlobenil	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	aldrin aldrin	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	dieldrin dieldrin	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	endrin endrin	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	heptacl heptachloor	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	chepclep c-heptachlooropoxide	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	thepclep t-heptachlooropoxide	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	a-endosu a-endosulfan	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	b-endosu b-endosulfan	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	op-dde op-DDE	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	pp-dde pp-DDE	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	op-ddd op-DDD	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	b-endosu b-endosulfan	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	op-dde op-DDE	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	pp-dde pp-DDE	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	op-ddd op-DDD	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	op-ddt op-DDT	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	pp-ddt pp-DDT	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000			
0	pcibenz pentachloorbenzeen										

1		Sort on A (low to high), H and I (high to low)		Total number of samples = 864						
2	3	Par.	Parameter	Unit	Raw Count	Raw Count	Raw Count <	% >MDL	Mean	Max
374	0	pcb180	PCB-180	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
375	0	mscbt	Som Chloorbestrijdingsmiddelen	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0,000
376	0	o4-vb	S.F.E. N-P bestrijdingsmiddelen	ug/l	16	0	16	0	#DIV/0!	0,000
377	0	np0604	(r phoraat	n.b.	2	0	2	0	#DIV/0!	0,000
378	0	dsulfot	(n disulfoton	n.b.	2	0	2	0	#DIV/0!	0,000
379	0	etrimpho	etrimphos	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
380	0	parometh	paraoxon-methyl	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
381	0	phosphar	phosphamidon	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
382	0	fenitrot	(n fenitrothion	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
383	0	malathio	(malathion	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
384	0	ccflvos	(cis-chloorfenvinphos	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
385	0	hexazino	hexazinone	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
386	0	propazin	propazine	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
387	0	trietazi	(n trietazine	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
388	0	fonofos	(r fonofos	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
389	0	prometry	prometryn	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
390	0	bromacil	(bromacil	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
391	0	cyanazin	cyanazine	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
392	0	tcflvos	(trans-chloorfenvinphos	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
393	0	tcvlrno	(n tetraclorvinphos	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
394	0	phoxim	(r phoxim	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
395	0	metamitr	metamitron	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
396	0	oxadixyl	(oxadixyl	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
397	0	clpropha	(chloorpropham	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
398	0	simazine	simazine	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
399	0	benethe	(benazoln-ethyl ester	ng/l	10	0	10	0	#DIV/0!	0,000
400	0	npbm-t	(n Totaal N-P bestrijdingsmiddelen	ng/l	8	0	8	0	#DIV/0!	0,000
401	0	aminocar	aminocarb	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
402	0	barban	barban	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
403	0	carbaryl	carbaryl	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
404	0	carbufur	carbulfuron	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
405	0	pirimica	pirimicarb	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
406	0	sweep	sweep	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
407	0	mscart	Som Carbamaten	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0,000
408	0	fenol	fenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
409	0	2-mfenol	2-methylfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
410	0	3+4-mfenol	3+4-methylfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
411	0	23dmfenc	2,3-dimethylfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
412	0	24+5dmfenc	2,4+2,5-dimethylfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
413	0	26dmfenc	2,6-dimethylfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
414	0	34dmfenc	3,4-dimethylfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
415	0	35dmfenc	3,5-dimethylfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
416	0	2clfenol	2-chloorfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
417	0	3clfenol	3-chloorfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
418	0	4clfenol	4-chloorfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
419	0	23dcifen	2,3-dichloorfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
420	0	24dcifen	2,4-dichloorfenol	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0,000
421	0	34dcifen	3,4-dichloorfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
422	0	35dcifen	3,5-dichloorfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
423	0	234tcife	2,3,4-trichloorfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
424	0	235tcife	2,3,5-trichloorfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
425	0	236tcife	2,3,6-trichloorfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
426	0	245tcife	2,4,5-trichloorfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
427	0	246tcife	2,4,6-trichloorfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
428	0	345tcife	3,4,5-trichloorfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
429	0	2345tcif	2,3,4,5-tetrachloorfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
430	0	23456tcif	2,3,4,5,6-tetrachloorfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
431	0	2356tcif	2,3,5,6-tetrachloorfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
432	0	pcflfenol	pentachloorfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
433	0	4cl2mfen	4-chloor-2-methylfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
434	0	4cl3mfen	4-chloor-3-methylfenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
435	0	2nfenol	2-nitrofenol	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
436	0	propoxur	propoxur	ug/l	4	0	4	0	#DIV/0!	0,000
437	0	vbhplc	Voorbewerking HPLC	j/n	2	0	2	0	#DIV/0!	0,000
438	0	vbflur-w	Vb.fenylureumherbiciden wa	j/n	3	0	3	0	#DIV/0!	0,000
439	0	chllooro	chllooroluron	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0,000
440	0	diuron	diuron	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0,000
441	0	isoprot	isoproturon	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0,000
442	0	linuron	linuron	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
443	0	mbthiazu	metabenzthiazuron	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0,000
444	0	metoxuro	metoxuron	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0,000
445	0	monolinu	monolinuron	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
446	0	monuron	monuron	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0,000
447	0	metobrom	metobromuron	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0,000
448	0	clbromur	chlloorbromuron	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0,000

Sort on L (low to high), S and T (high to low)		Total number of samples = 4133							
Par.	Parameter	Unit	PPS Count	PPS Count	PPS Count <	% >MDL	Mean	Max	
0	pcb52	PCB-52	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0,000
0	pcb101	PCB-101	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0,000
0	pcb118	PCB-118	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0,000
0	pcb138	PCB-138	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0,000
0	pcb153	PCB-153	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0,000
0	pcb180	PCB-180	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0,000
0	chlordan	cis-chloroorda	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0,000
0	tchordan	trans-chloroorda	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0,000
0	ehch	e-HCH	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0,000
0	mscct	Som Chloorbestrijdingsmiddelen	ug/l	58	0	58	0	#DIV/0!	0,000
0	o4-vb	S.F.E. N-P bestrijdingsmiddelen	ug/l	85	0	85	0	#DIV/0!	0,000
0	np0604	(r phoraat	n.b.	25	0	25	0	#DIV/0!	0,000
0	dsulfot	(n disulfoton	n.b.	25	0	25	0	#DIV/0!	0,000
0	etrimpho	etrimphos	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	parometh	paraoxon-methyl	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	phosphar	phosphamidon	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	fenitrot	(n fenitrothion	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	malathio	(malathion	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	ccflvos	(cis-chloorfenvinphos	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	hexazino	hexazinone	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	propazin	propazine	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	trietazi	(n trietazine	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	fonofos	(r fonofos	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	prometry	prometryn	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	bromacil	(bromacil	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	cyanazin	cyanazine	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	tcflvos	(trans-chloorfenvinphos	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	tcvlrno	(n tetraclorvinphos	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	phoxim	(r phoxim	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	metamitr	metamitron	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	oxadixyl	(oxadixyl	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	clpropha	(chloorpropham	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	simazine	simazine	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	benethe	(benazoln-ethyl ester	ng/l	51	0	51	0	#DIV/0!	0,000
0	npbm-t	(n Totaal N-P bestrijdingsmiddelen	ng/l	29	0	29	0	#DIV/0!	0,000
0	aminocar	aminocarb	ug/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0,000
0	barban	barban	ug/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0,000
0	clpropha	chlloorpropham	ug/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0,000
0	pirimica	pirimicarb	ug/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0,000
0	profam	profam	ug/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0,000
0	sweep	sweep	ug/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0,000
0	3hdrcfur	3-hydroxycarbofuran	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0,000
0	methcarb	methiocarb	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0,000
0	prosilfob	prosilfocarb	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0,000
0	mcart	Som Carbamaten	ug/l	54	0	54	0	#DIV/0!	0,000
0	2-mfenol	2-methylfenol	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0,000
0	3+4-mfenol	3+4-methylfenol	ug/l	66	0				

Sort on A (low to high), H and I (high to low)		Total number of samples = 864					Mean	Max	
Par.	Parameter	Unit	Raw Count	Raw Count	Raw % >MDL				
449	0 fur-wt	Som Fenytreuremherbiciden	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0.000
450	0 dclivos	dichloorfos	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
451	0 tmevifos	trimevifos	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
452	0 etprofos	ethopropofos	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
453	0 sulfotep	sulfotep	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
454	0 atrazine	atrazine	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
455	0 phoraat	phoraat	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
456	0 terbutaz	terbutylazine	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
457	0 diazinon	diazinon	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
458	0 desmetry	desmetryn	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
459	0 disulof	disulfotep	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
460	0 metribuc	metribucin	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
461	0 partmeth	parathion-methyl	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
462	0 fenclfos	fenchlorfos	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
463	0 parothey	paraoxon-ethyl	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
464	0 terbuty	terbutyltin	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
465	0 tdimefon	tridimefon	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
466	0 parthey	parathion-ethyl	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
467	0 brfosmet	bromofos-methyl	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
468	0 brfoseth	bromofos-ethyl	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
469	0 methidat	methidation	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
470	0 ethion	ethion	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
471	0 azinmet	azinphos-methyl	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
472	0 pyrazof	pyrazophos	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
473	0 etrimpho	etrimphos	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
474	0 fenitrot	fenitrothion	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
475	0 malathio	malathion	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
476	0 cclivos	c-chloorfenvinphos	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
477	0 propazin	propazine	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
478	0 triatzi	triazine	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
479	0 fonofos	fonofos	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
480	0 promety	prometryn	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
481	0 cyanazin	cyanazine	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
482	0 tclivos	t-chloorfenvinphos	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
483	0 tclvifos	tetrachloorvinphos	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
484	0 simazine	simazine	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
485	0 benethe	benazolin-ethyl-ester	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
486	0 ametryn	ametryn	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
487	0 atrdthey	atrazine-desisopropyl	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
488	0 atrdipro	atrazine-desisopropyl	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
489	0 tclnat	trichloronat	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
490	0 msnpt	Som Stikstof-Fosforbestrijdij	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0.000
491	0 pak-t	Som PAK	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
492	0 bam	2,6-dichloorbenzamide	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
493	0 azinphet	azinphos-ethyl	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
494	0 chloryp	chloryrifos-ethyl	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
495	0 demsmt	demeton-S-methyl	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
496	0 fenfion	fenfion	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
497	0 iprodion	iprodione	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
498	0 isodrin	isodrin	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
499	0 methacr	methacrifos	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
500	0 parometh	paraoxon-methyl	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
501	0 pirimphm	pirimiphos-methyl	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
502	0 tolclofm	tolclofos-methyl	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
503	0 triazoph	triazophos	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
504	0 msdvt	Som GCMS LV diversen	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0.000
505	0 chlthalo	chlorthalonalin	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
506	0 dcltamet	deltametrin	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
507	0 folpet	folpet	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
508	0 promoton	prometon	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
509	0 2etfenol	2-ethylfenol	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
510	0 34defeno	3+4-ethylfenol	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
511	0 chchdaan	cis-chloordaen	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
512	0 tchldaan	trans-chloordaen	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
513	0 1234tcb	1,2,3,4-tetrachloorbenzeen	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
514	0 12x5tcb	1,2,3,5+1,2,4,5-tetrachloorbe	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
515	0 12db3cpr	1,2-dibroom-3-chloorpropan	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
516	0 epichydr	epichloorhydrine	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
517	0 12dbma	dbroommethaan	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
518	0 1234tcb	1,2,3,4-tetrachloorbenzeen	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
519	0 dclfma	dichloordifluormethaan	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
520	0 tcfma	trichloorfluormethaan	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
521	0 1b3cprop	1-broom-3-chloorpropan	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
522	0 aniline	aniline	ug/l	16	0	16	0	#DIV/0!	0.000
523	0 o-p-tolui	o-p-toluidine	ug/l	16	0	16	0	#DIV/0!	0.000

Sort on L (low to high), S and T (high to low)		Total number of samples = 4133					Mean	Max
Par.	Parameter	Unit	PPs Count	PPs Count	PPs % >MDL			
0 etprofos	ethopropofos	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 sulfotep	sulfotep	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 atrazine	atrazine	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 phoraat	phoraat	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 terbutaz	terbutylazine	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 diazinon	diazinon	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 desmetry	desmetryn	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 disulof	disulfotep	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 metribuc	metribucin	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 partmeth	parathion-methyl	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 fenclfos	fenchlorfos	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 parothey	paraoxon-ethyl	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 terbuty	terbutyltin	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 tdimefon	tridimefon	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 parthey	parathion-ethyl	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 brfosmet	bromofos-methyl	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 brfoseth	bromofos-ethyl	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 methidat	methidation	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 ethion	ethion	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 azinmet	azinphos-methyl	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 pyrazof	pyrazophos	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 etrimpho	etrimphos	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 fenitrot	fenitrothion	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 malathio	malathion	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 cclivos	c-chloorfenvinphos	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 tclvifos	t-chloorfenvinphos	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 tclvifos	t-chloorfenvinphos	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 tclvifos	t-chloorfenvinphos	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 tolnifto	tetachloorvinphos	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 tclvifos	t-chloorfenvinphos	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 simazine	simazine	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 benethe	benazolin-ethyl-ester	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 ametryn	ametryn	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 atrdthey	atrazine-desisopropyl	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 tclnat	trichloronat	ug/l	66	0	66	0	#DIV/0!	0.000
0 chloryp	chloryrifos-methyl	ug/l	24	0	24	0	#DIV/0!	0.000
0 hexazino	hexazinon	ug/l	24	0	24	0	#DIV/0!	0.000
0 penconaz	pencconazol	ug/l	24	0	24	0	#DIV/0!	0.000
0 tflurali	trifluralin	ug/l	24	0	24	0	#DIV/0!	0.000
0 msnpt	Som Stikstof-Fosforbestrijdij	ug/l	58	0	58	0	#DIV/0!	0.000
0 pak-t	Som PAK	ug/l	33	0	33	0	#DIV/0!	0.000
0 iprodion	iprodione	ug/l	38	0	38	0	#DIV/0!	0.000
0 bam	2,6-dichloorbenzamide	ug/l	54	0	54	0	#DIV/0!	0.000
0 azinphet	azinphos-ethyl	ug/l	54	0	54	0	#DIV/0!	0.000
0 chloryp	chloryrifos-ethyl	ug/l	54	0	54	0	#DIV/0!	0.000
0 vinchloz	vinchlozolin	ug/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0.000
0 demsmt	demeton-S-methyl	ug/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0.000
0 fenfion	fenfion	ug/l	54	0	54	0	#DIV/0!	0.000
0 methacr	methacrifos	ug/l	54	0	54	0	#DIV/0!	0.000
0 parometh	paraoxon-methyl	ug/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0.000
0 pirimphm	pirimiphos-methyl	ug/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0.000
0 tolclofm	tolclofos-methyl	ug/l	54	0	54	0	#DIV/0!	0.000
0 triazoph	triazophos	ug/l	54	0	54	0	#DIV/0!	0.000
0 msdvt	Som GCMS LV diversen	ug/l	54	0	54	0	#DIV/0!	0.000
0 chlthalo	chlorthalonalin	ug/l	30	0	30	0	#DIV/0!	0.000
0 cchldaan	cis-chloordaen	ug/l	25	0	25	0	#DIV/0!	0.000
0 tchldaan	trans-chloordaen	ug/l	25	0	25	0	#DIV/0!	0.000
0 2etfenol	2-ethylfenol	ug/l	49	0	49	0	#DIV/0!	0.000
0 34defeno	3+4-ethylfenol	ug/l	27	0	27	0	#DIV/0!	0.000
0 dcltamet	deltametrin	ug/l	49	0	49	0	#DIV/0!	0.000
0 promoton	prometon	ug/l	47	0	47	0	#DIV/0!	0.000
0 dclfma	dichloordifluormethaan	ug/l	88	0	88	0	#DIV/0!	0.000
0 tcfma	trichloorfluormethaan	ug/l	88	0	88	0	#DIV/0!	0.000
0 12db3cpr	1,2-dibroom-3-chloorpropan	ug/l	64	0	64	0	#DIV/0!	0.000
0 1b3cprop	1-broom-3-chloorpropan	ug/l	64	0	64	0	#DIV/0!	0.000
0 12dbma	dbroommethaan	ug/l	64	0	64	0	#DIV/0!	0.000
0 epichydr	epichloorhydrine	ug/l	64	0	64	0	#DIV/0!	0.000
0 1234tcb	1,2,3,4-tetrachloorbenzeen	ug/l	49	0	49	0	#DIV/0!	0.000
0 12x5tcb	1,2,3,5+1,2,4,5-tetrachloorbe	ug/l	49	0	49	0	#DIV/0!	0.000
0 brbenzee	broombenzeen	ug/l	49	0	49	0	#DIV/0!	0.000
0 o-p-tolui	o-p-toluidine	ug/l	30	0	30	0	#DIV/0!	0.000
0 m-toluidi	m-toluidine	ug/l	30	0	30	0	#DIV/0!	0.000
0 25+35dm	2,5+3,5-dimethylaniline	ug/l	30	0	30	0	#DIV/0!	0.000

Sort on W (low to high), AD and AE (high to low)		Total number of samples = 2200					Mean	Max
Par.	Parameter	Unit	WPs Count	WPs Count	WPs % >MDL			
0 demsmt	demeton-S-methyl	ug/l	252	0	252	0	#DIV/0!	0.

Sort on A (low to high), H and I (high to low)		Total number of samples = 864						
Par.	Parameter	Unit	Raw Count	Raw Count <	Raw % >MDL	Mean	Max	
524	0 mtokuid	m-toluidine	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
525	0 23dmani	2,3-dimethylaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
526	0 24dmani	2,4-dimethylaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
527	0 25+35dm	2,5+3,5-dimethylaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
528	0 26dmani	2,6-dimethylaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
529	0 34dmani	3,4-dimethylaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
530	0 246mani	2,4,6-trimethylaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
531	0 nmanilin	N-methylaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
532	0 ndmmani	N,N-dimethylaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
533	0 neanilin	N-ethylaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
534	0 ndealan	N,N-diethylaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
535	0 dbamine	dibenzylamine	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
536	0 tbamine	tribenzylamine	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
537	0 2canilin	2-chloroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
538	0 3canilin	3-chloroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
539	0 4canilin	4-chloroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
540	0 23dcanil	2,3-dichloroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
541	0 24+25dca	2,4+2,5-dichloroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
542	0 26dcanil	2,6-dichloroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
543	0 34dcanil	3,4-dichloroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
544	0 35dcanil	3,5-dichloroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
545	0 234tcani	2,3,4-trichloroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
546	0 245tcani	2,4,5-trichloroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
547	0 246tcani	2,4,6-trichloroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
548	0 345tcani	3,4,5-trichloroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
549	0 2345tcani	2,3,4,5-tetrachloroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
550	0 2356tcani	2,3,5,6-tetrachloroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
551	0 3c4mani	3-chloro-4-methylaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
552	0 4+5c2ma	4+5-chloro-2-methylaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
553	0 33dcbenz	3,3-dichlorobenzidine	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
554	0 onanidic	o-anisidine	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
555	0 pcanilin	pentachloroaniline	ug/l	23	0	23	0 #DIV/0!	0,000
556	0 2nanilin	2-nitroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
557	0 4m3nanil	4-methyl-3-nitroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
558	0 dichlora	2,6-dichloro-4-nitroaniline	ug/l	23	0	23	0 #DIV/0!	0,000
559	0 4baranil	4-bromoaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
560	0 3nanilin	3-nitroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
561	0 4ipanilil	4-isopropyl-aniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
562	0 2psanil	2-phenylsulfon-aniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
563	0 ndmbari	N,N-dimethylbenzylamine	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
564	0 apeamine	a-phenethylamine	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
565	0 bpeamine	b-phenethylamine	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
566	0 2dcanil	2,6-diethylaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
567	0 3c4moan	3-chloro-4-methoxyaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
568	0 4mo2nan	4-methoxy-2-nitroaniline	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
569	0 benzylam	benzylamine	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
570	0 msamine	Total aromatic amines	ug/l	16	0	16	0 #DIV/0!	0,000
571	0 vbckx-w	Vb.chloroerfencycarbazonen	j/n	3	0	3	0 #DIV/0!	0,000
572	0 3600	Chloroerfencycarbazonen	ug/l	2	0	2	0 #DIV/0!	0,000
573	0 dicamba	dicamba	ug/l	6	0	6	0 #DIV/0!	0,000
574	0 4cpa	4-CPA	ug/l	6	0	6	0 #DIV/0!	0,000
575	0 24d	2,4-D	ug/l	8	0	8	0 #DIV/0!	0,000
576	0 mcpcp	M.C.P.A.	ug/l	8	0	8	0 #DIV/0!	0,000
577	0 24dp	2,4-DP (dichlorprop)	ug/l	6	0	6	0 #DIV/0!	0,000
578	0 24st	2,4,5-T	ug/l	6	0	6	0 #DIV/0!	0,000
579	0 24db	2,4-DB	ug/l	6	0	6	0 #DIV/0!	0,000
580	0 mcpcb	MCPB	ug/l	6	0	6	0 #DIV/0!	0,000
581	0 24stp	2,4,5-TP	ug/l	6	0	6	0 #DIV/0!	0,000
582	0 fluoxyp	fluoroxypyr	ug/l	3	0	3	0 #DIV/0!	0,000
583	0 cfk-wt	Som Chloroerfencycarbazonen	ug/l	3	0	3	0 #DIV/0!	0,000
584	0 bifenox	bifenox	ug/l	6	0	6	0 #DIV/0!	0,000
585	0 clidazon	chlorigazon	ug/l	8	0	8	0 #DIV/0!	0,000
586	0 thiabezl	thiabenzazol	ug/l	6	0	6	0 #DIV/0!	0,000
587	0 dimethoa	dimethoat	ug/l	15	0	15	0 #DIV/0!	0,000
588	0 chldesfm	chlorigazon-methyl-desfenyl	ug/l	6	0	6	0 #DIV/0!	0,000
589	0 metalhd	metalddehyde	ug/l	8	0	8	0 #DIV/0!	0,000
590	0 vbnitro	Vb.nitrofenolen water	j/n	3	0	3	0 #DIV/0!	0,000
591	0 24dnfen	2,4-dinitrofenol	ug/l	5	0	5	0 #DIV/0!	0,000
592	0 25dnfen	2,5-dinitrofenol	ug/l	5	0	5	0 #DIV/0!	0,000
593	0 23dnfen	2,6-dinitrofenol	ug/l	5	0	5	0 #DIV/0!	0,000
594	0 34dnfen	3,4-dinitrofenol	ug/l	5	0	5	0 #DIV/0!	0,000
595	0 dnoc	D.N.O.C.	ug/l	5	0	5	0 #DIV/0!	0,000
596	0 dnocseb	dinocseb	ug/l	5	0	5	0 #DIV/0!	0,000
597	0 dnoterb	dinoterb	ug/l	5	0	5	0 #DIV/0!	0,000
598	0 3nfenol	3-nitrofenol	ug/l	5	0	5	0 #DIV/0!	0,000

Sort on L (low to high), S and T (high to low)		Total number of samples = 4133					
Par.	Parameter	Unit	PPS Count A	PPS Count	PPS % >MDL	Mean	Max
0 26dmani	2,6-dimethylaniline	ug/l	30	0	30	0 #DIV/0!	0,000
0 3canilin	3-chloroaniline	ug/l	30	0	30	0 #DIV/0!	0,000
0 4canilin	4-chloroaniline	ug/l	30	0	30	0 #DIV/0!	0,000
0 24dmani	2,4-dimethylaniline	ug/l	32	0	32	0 #DIV/0!	0,000
0 2x+35dm	2,5+2,6+3,5-dimethylaniline	ug/l	2	0	2	0 #DIV/0!	0,000
0 0+m+ptol	0+m+p-toluidine	ug/l	24	0	24	0 #DIV/0!	0,000
0 23dmani	2,3-dimethylaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 2+3xdma	2,4+2,5+2,6,3,5-dimethylaniline	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 34dmani	3,4-dimethylaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 246mani	2,4,6-trimethylaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 nmanilin	N-methylaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 ndmmani	N,N-dimethylaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 neanilin	N-ethylaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 nndeanil	N,N-diethylaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 dbamine	dibenzylamine	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 tbamine	tribenzylamine	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 23dcanil	2,3-dichloroaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 24+25dca	2,4+2,5-dichloroaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 26dcanil	2,6-dichloroaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 34dcanil	3,4-dichloroaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 35dcanil	3,5-dichloroaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 234tcani	2,3,4-trichloroaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 245tcani	2,4,5-trichloroaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 246tcani	2,4,6-trichloroaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 345tcani	3,4,5-trichloroaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 2345tcani	2,3,4,5-tetrachloroaniline	ug/l	52	0	52	0 #DIV/0!	0,000
0 2356tcani	2,3,5,6-tetrachloroaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 3c4mani	3-chloro-4-methylaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 4+5c2ma	4+5-chloro-2-methylaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 33dcbenz	3,3-dichlorobenzidine	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 44+5c2ma	4+5-chloro-2-methylaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 33dcbenz	3,3-dichlorobenzidine	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 onanidic	o-anisidine	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 2nanilin	2-nitroaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 4m3nanil	4-methyl-3-nitroaniline	ug/l	24	0	24	0 #DIV/0!	0,000
0 pcanilin	pentachloroaniline	ug/l	67	0	67	0 #DIV/0!	0,000
0 4m3nanil	4-methyl-3-nitroaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 dichlora	2,6-dichloro-4-nitroaniline	ug/l	67	0	67	0 #DIV/0!	0,000
0 26deanil	2,6-diethylaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 4ipanilil	4-isopropyl-aniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 benzylam	benzylamine	ug/l	32	0	32	0 #DIV/0!	0,000
0 ndmbari	N,N-dimethylbenzylamine	ug/l	32	0	32	0 #DIV/0!	0,000
0 3c4moan	3-chloro-4-methoxyaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 4baranil	4-bromoaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 3nanilin	3-nitroaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 4mo2nan	4-methoxy-2-nitroaniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 2psanil	2-phenylsulfon-aniline	ug/l	54	0	54	0 #DIV/0!	0,000
0 apeamine	a-phenethylamine	ug/l	32	0	32	0 #DIV/0!	0,000
0 bpeamine	b-phenethylamine	ug/l	32	0	32	0 #DIV/0!	0,000
0 vbftalat	Voorbewerking ftalaten	j/n	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 dnpenit	di-n-pentylftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 diethfta	di-ethylftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 dinhept	di-n-heptylftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 dinprop	di-n-propylftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 dimetta	di-methylftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 dinprop	di-iso-propylftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 dinbutft	di-n-butylftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 dinhexft	di-n-hexylftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 diundfta	di-undecylftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 didecta	di-decylftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 didodfta	di-dodecylftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 b2ehtftal	bis(2-ethylhexyl)ftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 diproft	di-iso-propylftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 metethft	bis(2-methoxyethyl)ftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 dinocftt	di-n-octylftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 diibutft	di-iso-butylftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 butethft	bis(2-butoxyethyl)ftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 benbutft	benzylbutylftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 dixchftt	di-cyclohexylftalaa	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 diethhap	di(2-ethylhexyl)adipaat (geen Qf)	ug/l	1	0	1	0 #DIV/0!	0,000
0 ftalatwt	Som ftalaten (weekmakers)	ug/l	22	0	22	0 #DIV/0!	0,000
0 vbckx-w	Vb.chloroerfencycarbazonen	j/n	4	0	4	0 #DIV/0!	0,000
0 3600	Chloroerfencycarbazonen	ug/l	4	0	4	0 #DIV/0!	0,000
0 dicamba	dicamba	ug/l	71	0	71	0 #DIV/0!	0,000

Sort on W (low to high), AD and AE (high to low)		Total number of samples = 2200					
Par.	Parameter	Unit	WPS Count A	WPS Count	WPS % >MDL		

Sort on A (low to high), H and I (high to low)							Total number of samples = 864			
Par.	Parameter	Unit	Raw Count	Raw Count	Raw Count <	Mean	Max			
599	0	4ntefol	4-nitrofenol	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0.000
600	0	nitro-wt	Som Nitrofenolen	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0.000
601	0	vbpak-w	Vb-PAK	i/n	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
602	0	acensafte	acensaftefen	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	0.000
603	0	acensafte	acensaftefen	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	0.000
604	0	fluoreen	fluoreen	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	0.000
605	0	fenanthr	fenanthreen	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	0.000
606	0	anthrace	anthraceen	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	0.000
607	0	fluorant	fluorantheen	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	0.000
608	0	pyreen	pyreen	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	0.000
609	0	baanthra	benz(a)anthraceen	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	0.000
610	0	chryseen	chryseen	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	0.000
611	0	bbluoaen	benzo(b)fluorantheen	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	0.000
612	0	bklfluoaen	benzo(k)fluorantheen	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	0.000
613	0	b-a-pyre	benzo(a)pyreen	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	0.000
614	0	dibeshan	dibenz(a,h)anthraceen	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	0.000
615	0	bghipery	benzo(g,h,i)perylene	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	0.000
616	0	i123cd-p	indeno(1,2,3,c,d)pyreen	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	0.000
617	0	naftalee	naftaleen	ug/l	27	0	27	0	#DIV/0!	0.000
618	0	3300,54t	Som PAK	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
619	0	vblmic-w	Vb:bestrijdingsm.screen wat/i/n	3	0	3	0	0	#DIV/0!	0.000
620	0	fenpropm	Fenpropimorf	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
621	0	profam	Profam	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
622	0	clprofha	Chloorprofam	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
623	0	vinchloz	Vinchloroline	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
624	0	metolaci	metolachloor	ug/l	9	0	9	0	#DIV/0!	0.000
625	0	bromacil	Bromacil	ug/l	15	0	15	0	#DIV/0!	0.000
626	0	ethofmst	Ethofumesaat	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0.000
627	0	fenfam	Fenmedifam	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0.000
628	0	lenacil	Lenacil	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0.000
629	0	methalax	Methalaxyl	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0.000
630	0	bmic-wt	Som Bestrijdingsmiddelen (sug/l)	5	0	5	0	0	#DIV/0!	0.000
631	0	ampa	aminomethylfosfonzuur	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0.000
632	0	glufosin	glufosinaat	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0.000
633	0	glyfosaa	glyfosaat	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0.000
634	0	fosfonwt	Som Fosfonzuure Herbiciden	ug/l	5	0	5	0	#DIV/0!	0.000
635	0	glyme1ct	Som polyglymen (geen Q), LC/MS (ge	8	0	8	0	0	#DIV/0!	0.000
636	0	diglyme	diglyme	ug/l	12	0	12	0	#DIV/0!	0.000
637	0	triglyme	triglyme	ug/l	12	0	12	0	#DIV/0!	0.000
638	0	tetragly	tetraglyme	ug/l	12	0	12	0	#DIV/0!	0.000
639	0	vblscsr	Voorbewerking LC/MS scree/i/n	10	0	10	0	0	#DIV/0!	0.000
640	0		Reden	762	0	762	0	0	#DIV/0!	0.000

Sort on L (low to high), S and T (high to low)							Total number of samples = 4133		
Par.	Parameter	Unit	PPs Count	PPs Count	PPs Count <	Mean	Max		
0	4cpa	4-CPA	ug/l	71	0	71	0	#DIV/0!	0.000
0	24d	2,4-D	ug/l	75	0	75	0	#DIV/0!	0.000
0	mcpab	2,4-D-P A	ug/l	75	0	75	0	#DIV/0!	0.000
0	24dip	2,4-DP (dichloroprop)	ug/l	71	0	71	0	#DIV/0!	0.000
0	24st	2,4,5-T	ug/l	71	0	71	0	#DIV/0!	0.000
0	24db	2,4-DB	ug/l	71	0	71	0	#DIV/0!	0.000
0	mcpb	MCPB	ug/l	71	0	71	0	#DIV/0!	0.000
0	24stp	2,4,5-TP	ug/l	71	0	71	0	#DIV/0!	0.000
0	cfx-wt	Som Chlorofenoxycarbonz	ug/l	31	0	31	0	#DIV/0!	0.000
0	bcarpso	Butocarbosulfoxide	ug/l	8	0	8	0	#DIV/0!	0.000
0	acarbso	Aldicarbosulfoxide	ug/l	8	0	8	0	#DIV/0!	0.000
0	bcarboso	Butocarbosulfon	ug/l	8	0	8	0	#DIV/0!	0.000
0	acarbso	Aldicarbosulfon	ug/l	8	0	8	0	#DIV/0!	0.000
0	efcarbso	Ethiofencarbosulfoxide	ug/l	8	0	8	0	#DIV/0!	0.000
0	thfusuo	Thiofenoxy sulfide	ug/l	8	0	8	0	#DIV/0!	0.000
0	3hcabc	3-hydroxycarbofuran	ug/l	8	0	8	0	#DIV/0!	0.000
0	thfusuf	Thiofenoxy sulfon	ug/l	8	0	8	0	#DIV/0!	0.000
0	mtiocsu	Methiocarbosulfon	ug/l	8	0	8	0	#DIV/0!	0.000
0	bcarbso	Butocarbosulfon	ug/l	8	0	8	0	#DIV/0!	0.000
0	propoxur	Propoxur	ug/l	37	0	37	0	#DIV/0!	0.000
0	carbofur	Carbofuran	ug/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0.000
0	carbaryl	Carbaryl	ug/l	62	0	62	0	#DIV/0!	0.000
0	ethcarb	Ethiocarb	ug/l	8	0	8	0	#DIV/0!	0.000
0	methioca	Methiocarb	ug/l	8	0	8	0	#DIV/0!	0.000
0	chlorto	Chloortoluron	ug/l	65	0	65	0	#DIV/0!	0.000
0	isoprot	Isoproturon	ug/l	65	0	65	0	#DIV/0!	0.000
0	mthiazu	Methabenzthiazuron	ug/l	65	0	65	0	#DIV/0!	0.000
0	diuron	Diuron	ug/l	65	0	65	0	#DIV/0!	0.000
0	metoxuro	Metoxuron	ug/l	65	0	65	0	#DIV/0!	0.000
0	monuron	Monuron	ug/l	74	0	74	0	#DIV/0!	0.000
0	linuron	Linuron	ug/l	74	0	74	0	#DIV/0!	0.000
0	metobrom	Metobromuron	ug/l	74	0	74	0	#DIV/0!	0.000
0	clbromur	Chloorbromuron	ug/l	65	0	65	0	#DIV/0!	0.000
0	fenuron	fenuron	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	chlouro	chlooroxuron	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	fluomet	fluometuron	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	fuor-ict	Som fenylureum herbiciden, l	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	23difen	2,3-dinitrofenol	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	pencycur	pencycuron	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	molinaat	molinaat	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	penrmtin	pendimethalin	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	pyrpyfen	pyrproxyfen	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	imidclpd	imidacloprid	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	aldicarb	Aldicarb	ug/l	30	0	30	0	#DIV/0!	0.000
0	dimethen	dimethenamid	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	carbetam	carbetamid	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	carbenda	carbendazim	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	thiacldp	thiacloprid	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	benithz	1,2-benzisothiazool-3-on	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	boscalid	boscalid	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	bromoxyl	bromoxynil	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	dimemorf	dimethomorf	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	dithian	dithianon	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	fluaaznam	fluaaznam	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	flupicld	flupiclolede	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	flutolanil	flutolanil	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	irgarol	irgarol	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	propochm	iodpropopnylcarbamaat	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	cyhaltr	lambda-cyhalothrin	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	mesulfm	mesosulfuron-methyl	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	methomy	Methomyl	ug/l	30	0	30	0	#DIV/0!	0.000
0	oxamyl	Oxamyl	ug/l	30	0	30	0	#DIV/0!	0.000
0	quizifop	quizalofop-p-ethyl	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	triallaat	triallaat	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	pol-ict	Som polaire bestrijdingsmid	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	chldesfm	chloridazon-methyl-desfenyl	ug/l	2	0	2	0	#DIV/0!	0.000
0	bromacil	bromacil	ug/l	89	0	89	0	#DIV/0!	0.000
0	dimethoa	dimethoaaat	ug/l	77	0	77	0	#DIV/0!	0.000
0	24dbani	2,4,6-tribroomanisol	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	24dbfen	2,4,6-tribroomfenol	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	24dbani	2,4-dibroomanisol	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	24dbfen	2,4-dibroomfenol	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	26dbfen	2,6-dibroomfenol	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000
0	3branis	3-broomanisol	ug/l	22	0	22	0	#DIV/0!	0.000

Sort on W (low to high), AD and AE (high to low)							Total number of samples = 2200		
Par.	Parameter	Unit	WPs Count	WPs Count	WPs Count <	Mean	Max		
0	propmco	propamocarb	ug/l	1	0	1	0	#DIV/0!	0.000
0	bcarbso	Butocarbosulfon	ug/l	15	0	15	0	#DIV/0!	0.000
0	aldicarb	Aldicarb	ug/l	111	0	111	0	#DIV/0!	0.000
0	carbetam	carbetamid	ug/l	97	0	97	0	#DIV/0!	0.000
0	carbofur	Carbofuran	ug/l	218	0	218	0	#DIV/0!	0.000
0	propochm	iodpropopnylcarbamaat	ug/l	97	0	97	0	#DIV/0!	0.000
0	oxamyl	Oxamyl	ug/l	111	0	111	0	#DIV/0!	0.000
0	car-ict	Som carbamaten, LC/MS	ug/l	1	0	1	0	#DIV/0!	0.000
0	diglyme	diglyme	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	0.000
0	metaldhd	metalddehyde	ug/l	6	0	6	0	#DIV/0!	0.000
0	24dbani	2,4,6-tribroomanisol	ug/l	96	0	96	0	#DIV/0!	0.000
0	24dbfen	2,4,6-tribroomfenol	ug/l	96	0	96	0	#DIV/0!	0.000
0	24dbani	2,4-dibroomanisol	ug/l	96	0	96	0	#DIV/0!	0.000
0	24dbfen	2,4-dibroomfenol	ug/l	96	0	96	0	#DIV/0!	0.000
0	26dbfen	2,6-dibroomfenol	ug/l	96	0	96	0	#DIV/0!	0.000
0	3branis	3-broomanisol	ug/l	96	0	96	0	#DIV/0!	0.000
0	3brfenol	3-broomfenol	ug/l	96	0	96	0	#DIV/0!	0.000
0	lmbmfent	Som bromfenolen	ug/l	96	0	96	0	#DIV/0!	0.000
0	azoxstrb	azoxystrobin	ug/l	103	0	103	0	#DIV/0!	0.000
0	bifenox	bifenox	ug/l	170	0	170	0	#DIV/0!	0.000
0	carbentf	carbentention	ug/l	103	0	103	0	#DIV/0!	0.000
0	chlorneb	chlorneb	ug/l	103	0	103	0	#DIV/0!	0.000
0	esventil	esventaleraat	ug/l	103	0	103	0	#DIV/0!	0.000
0	epoxyccon	epoxycconazol	ug/l	104	0	104	0	#DIV/0!	0.000
0	fenamfos	fenamfos	ug/l	103	0	103	0	#DIV/0!	0.000
0	fnpropm	fenpropimorf	ug/l	103	0	103	0	#DIV/0!	0.000
0	fluaazpb	fluaazfop-butyl	ug/l	103	0				

Bijlage 4: Poster 'The geohydrochemical screening procedure'

The geohydrochemical approach in optimizing groundwater quality monitoring

Pieter J. Stuyfzand

The general issues of groundwater quality monitoring

- prediction of future groundwater quality as a source of drinking water, in order to anticipate in (a) the abatement of ongoing deteriorating processes and/or (b) the implementation of additional purification techniques.
- environmental protection: water quality is the most economic, sensitive and relevant pollution sensor.
- independent validation and calibration of hydrological flow models, through the application of groundwater dating and the chemical visualisation of flow paths.

The power of geohydrochemistry: minimizing the costs and maximizing the benefits: Fig. 1

- screening for more extensive = expensive analyses: Table 1.
- tailoring the analytical program and frequency of sampling by application of a hydrochemical facies analysis: Fig. 2.
- further reduction of the monitoring program by quantification of the reactive solid phases in the aquifer matrix: Fig. 3.
- understanding the process of groundwater quality deterioration, and thereby selecting the right abatement strategy: Fig. 4.

In financial terms, early investments in geohydrochemical research (including additional well installation, water and soil sampling and analysis) are earned back by a net lowering of the whole exploitation costs of groundwater quality monitoring (Fig. 5).

Relevant Kiwa publications
 Biegelair, P.K. 1992. Towards a groundwater quality monitoring system for drinking water supply. Kiwa Mededeling 117, 179 p (in dutch).
 Stuyfzand, P.J. 1994. Advanced mapping of groundwater quality as an aid in design of monitoring programs and selecting areas for superprotection. Proc. Intern. Conf. "Living with Water", Amsterdam 26-29 Sept. 1994, 773-774.



FIG. 1. The 'waste of money' feeling, also pertaining to most systems of groundwater quality monitoring. Prevent a database from loading with too many expensive analytical data below either an acceptable or, worse, a too high detection limit.

Well condition	do not analyze for TE [#] and OM [@] in recently drilled wells, wait at least 3 months (bailer drilled) or 12 months (uncased drilling methods).
Origin (detection by Cl⁻, δ¹⁸O, E^J)	analyze specific OM [@] and TE [#] only in specific waters (Ne-dikegulac in Rhine bank filtrate; Ag, Hg, Mo, Pb, Se, Sn, U in leachate of mine tailings)
pH	if pH<6, do not analyze for Al, Be, Lanthanides, Sc, Ti.
Redox class (by O₂, NO₃⁻, SO₄²⁻, CH₄, E^J)	if sulphate reducing or methanogenic, do not analyze for: Ag, Cd, Co, Cu, Hg, Ni, Pb, Se, Zn, AOX/VOX, chloro-alkanes and chloro-alkenes.
Age (detection by ³H, ¹⁴C, Cl, CFCs, E^J)	if pre-industrial (>150 y), do not analyze for OM [@] ; if pre-tritium (>40 y), do not analyze for recently developed OM [@] like CFCs.
AOX and VOX	if below detection, do not analyze for OM [@] without specific reasons.
The most mobile persistent xenobiotics	if not present do not analyze for the less mobiles or less persistent.
The most mobile heavy metals	ditto. If for instance Ni insignificant (E ^J), do not analyze for Pb, Cu, Zn, Cd.
Current minimum detection limit (MDL)	if too high do not analyze. For instance a MDL of 1 µg/l for Ag, Be, Cr, Hg, Pb, Sb, Se, and Sn is too high in 95% of groundwater samples.
Geochemical twins	analyze for the difficult-to-analyze ion only if the easy-to-analyze ion is significant (E ^J): As-Sb, Ca-Sr, Cl-Br, Hf-Zr, K-Rb, Na-Li, PO ₄ -As, SiO ₂ -Ge, Zn-Cd.
Geochemical antagonists	ditto, however if insignificant (E ^J): Ca-F, Fe(II)-O ₂ , NO ₃ ⁻ -Fe(II), O ₂ -CH ₄ , OH-Al.

: TE^s = Trace Elements; @ : OM^s = Organic Microcontaminants; * : E^J = by Expert Judgement

TABLE 1. Geochemical screening program for groundwater analysis, in sequential order. Skip useless analyses before you pay for them, but add those indispensable analyses which cannot be acquired any more when the delayed evaluation starts.

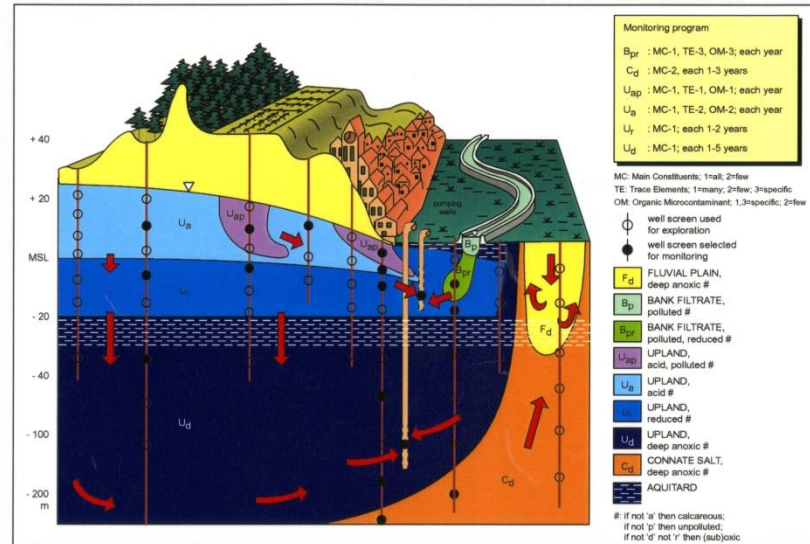


FIG. 2. Hydrochemical mapping by HYFA as a solid basis for structuring the monitoring program. First hydrochemical maps need to be constructed using exploratory multi-level monitoring wells. They display the areal extent of groundwater bodies (differing in origin) and hydrochemical facies within (zones differing in degree of pollution, redox, calcite saturation etc.).

Subsequently the best monitoring sites, specific analytical programs and sampling frequencies can be adapted to expectations, by combining these maps with groundwater flow maps and application of Table 1. During monitoring, changes in origin (for instance from Upland water to Bank filtrate) or facies (for instance from 'reduced' to 'acid') in a well need to be followed by adaptations of its monitoring program.

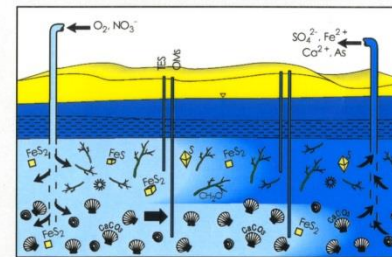


FIG. 3. Geochemical inspection of the aquifer matrix can help to further tune the monitoring program. In this example, oxygenated water is injected through a deep well in an anoxic aquifer with geochemical stratification. The upper zone requires intensive monitoring of trace elements (TEs) and a low frequency monitoring of organic microcontaminants (OMs), the lower zone requires the opposite.

This study was conducted within the framework of the joint research program of the VEWIN, the Netherlands Waterworks Association.

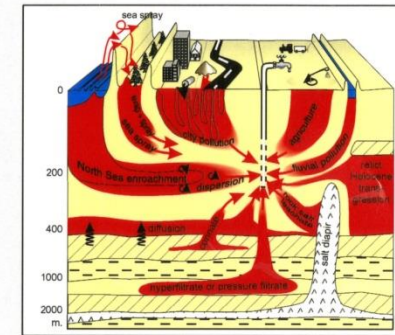


FIG. 4. The abatement of a rising chlorinity of raw groundwater requires the salinizing process to be identified. And without knowing this process the ultimate chlorinity cannot be predicted.

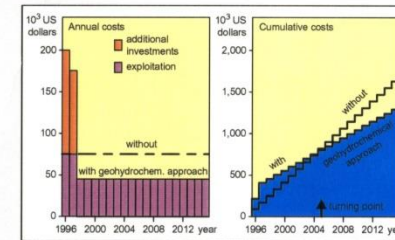


Fig. 5. Early financial investments in geohydrochemical research are easily earned back after ca. 10 years of exploitation of the monitoring network, mainly through: (1) a lower number of sampling points due to a well-defined representativity of each point; (2) restriction of the extensive analytical program including organic microcontaminants and trace elements to selected sampling points with a raised chance to catch them; and (3) a reduction of the sampling frequency for sluggishly reacting wells. Besides financial profit there are other gains: the hydrochemical data acquired are more useful, the geochemical data are indispensable in predicting future groundwater quality, and the expert report on the spatial distribution of watertypes is needed to evaluate the size of high quality groundwater reserves and the importance of the various threats. The case shown, pertains to a 5 Mm³/y well field for drinking water supply, composed of 10 shallow and 15 deep pumping wells. The additional investments (ca. 225,000 US dollars in 2 years) cover expenses connected with the installation of additional observation wells, geochemical analyses of aquifer samples, hydrochemical analyses and an expert report on HYFA including a design of the monitoring network and program.