

bron :

Publicatieblad van de Europese Gemeenschappen

PB L 290 van 29/11/98

RICHTLIJN 98/73/EG VAN DE COMMISSIE

van 18 september 1998

tot vierentwintigste aanpassing aan de vooruitgang van de techniek van Richtlijn 67/548/EEG van de Raad betreffende de aanpassing van de wettelijke en bestuursrechtelijke bepalingen inzake de indeling, de verpakking en het kenmerken van gevaarlijke stoffen

Aanhangsel 5

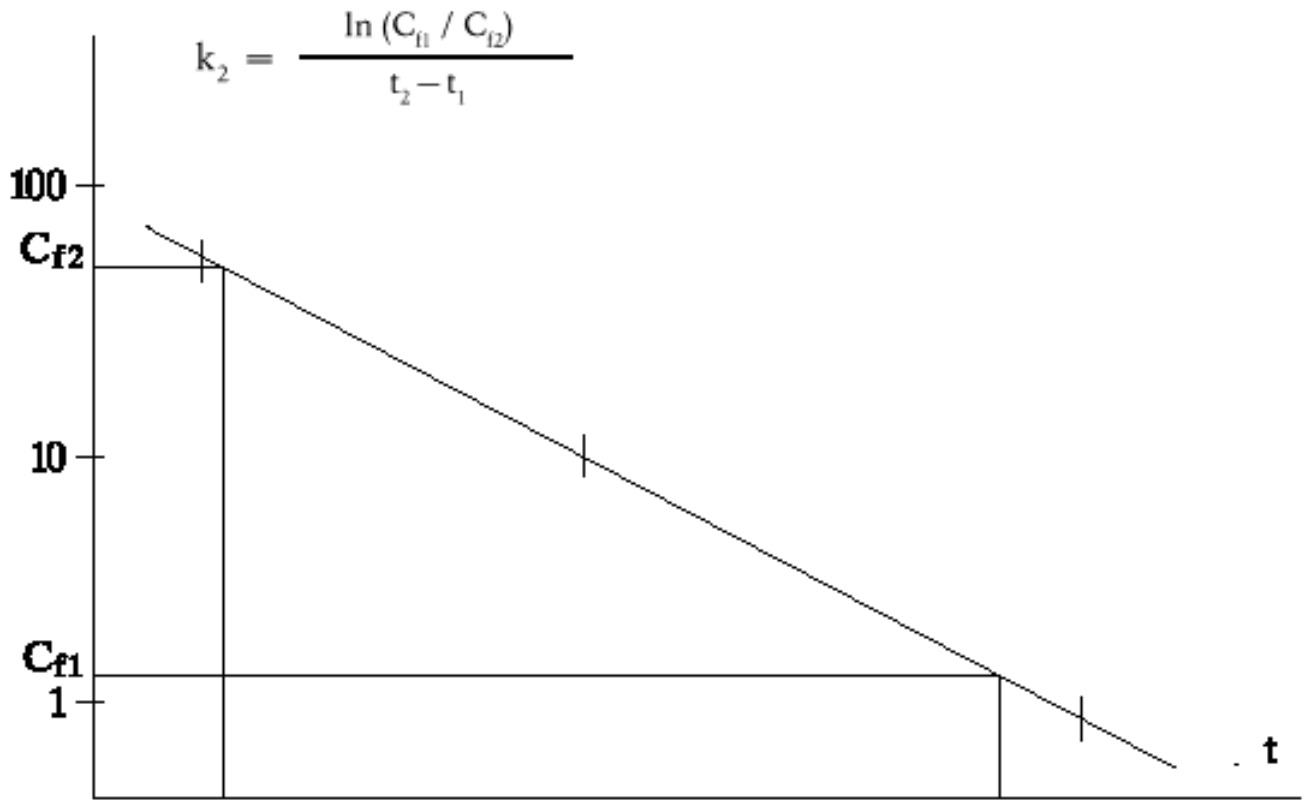
Keuze van een model

(Voor de EER relevante tekst)

Er is van uitgegaan dat de meeste bioconcentratieprocessen op een "acceptabele" manier worden beschreven door een simpel twee-compartiment/twee-parametermodel, wat zich vertaalt in een lineair verband wanneer de concentratie van de stof in de vissen tijdens de depuratiefase op semi-logaritmisch papier tegen de tijd wordt uitgezet. Wanneer de trend in de desbetreffende gegevens niet door een rechte kan worden beschreven, dient een complexer model te worden gebruikt. Zie daarvoor bijvoorbeeld de publicatie van Spacie en Hamelink (referentie 1 in aanhangsel 3).

Grafische methode voor de bepaling van de depuratie-(eliminatie-)snelheidsconstante k_2

Zet de concentratie van de teststof in ieder vismonster op semi-logaritmisch papier uit tegen het bemonsteringstijdstip. De richtingscoëfficiënt van de trendlijn is k_2 .



Houd er rekening mee dat afwijkingen van een lineair verband tussen $\log C_f$ en t een aanwijzing kunnen vormen voor een complex depuratiepatroon dat niet door een eersteordekinetiek kan worden beschreven. Om depuratiepatronen door te rekenen die niet door een eersteordekinetiek worden gekenmerkt, kunnen eveneens grafische methoden worden gebruikt.

Grafische methode voor de bepaling van de opnamesnelheidsconstante k_1

Als k_2 bekend is, kan k_1 als volgt worden berekend:

$$k_1 = \frac{C_f k_2}{C_w \times (1 - e^{-k_2 t})}$$

(vergelijking 1)

De waarde van C_f wordt afgelezen op de helft van de hoogte van de geëffende opnamecurve die wordt verkregen wanneer de concentratie van de stof in de vissen (op logaritmische schaal) wordt uitgezet tegen die tijd (op lineaire schaal).

Voor de berekening van de bioconcentratiefactor en de snelheidsconstanten k_1 en k_2 verdient het de voorkeur gebruik te maken van gecomputeriseerde niet-lineaire parameterschattingstechnieken. Deze programma's berekenen een waarde voor k_1 en k_2 op basis van de aan de tijd gerelateerde concentratiegegevens en het model:

$$C_f = C_w \cdot \frac{k_1}{k_2} \times (1 - e^{-k_2 t}) \quad 0 < t < t_c$$

(vergelijking 2)

$$C_f = C_w \cdot \frac{k_1}{k_2} \times (1 - e^{-k_2 t}) \quad 0 < t < t_c$$

(vergelijking 3)

waarin t_c = het moment waarop de opnamefase wordt afgebroken.

Met deze techniek wordt ook een schatting van de standaardafwijking van k_1 en k_2 verkregen. Aangezien k_2 in de meeste gevallen met een vrij grote precisie uit de depuratiecurve kan worden geschat, en aangezien er tussen de parameters k_1 en k_2 een sterke correlatie bestaat als zij gelijktijdig worden geschat, kan het wenselijk zijn eerst, en uitsluitend aan de hand van de depuratiegegevens, k_2 te berekenen en vervolgens k_1 uit de opnamegegevens te schatten door middel van niet-lineaire regressie.

Voor vragen en/of opmerkingen over EMIS kunt u mailen naar emis@vito.be

Copyright © [VITO](http://www.vito.be) 04/12/1998

Ontwerp [EMIS](http://www.emis.vito.be).