

OSLO Omgeving: codelijsten

Welkom! We starten om 13:05

Woensdag 22 juni 2022

Thematische werkgroep 1 - Microsoft Teams Digitaal Vlaanderen



Agenda



Welkom & doel van vandaag

13:05 - 13:15



Overzicht: wat hebben we gedaan in het inleidend webinar?

13:15 - 13:25



Brainstormoefening 1: verkregen input + mapping

13:25 - 14:05



Brainstormoefening 2: technische standaard

14:10 - 14:50



Tijdslijn

14:50 - 14:52



Volgende stappen + vragen

14:52 - 15:00

Praktische zaken

De microfoon van deelnemers staat altijd op **mute**





Steek je **hand** op indien je iets wil zeggen.
Interactie wordt aangemoedigd!



Vragen en suggesties kunnen ook steeds gecommuniceerd worden via de **chat** functie.





ja/nee vragen kan je beantwoorden via de chat:

$$Ja = +1$$

Neen =
$$-1$$

Opname?





Welkom & doel van vandaag



Doel van vandaag



Opstellen van codelijsten, in samenspraak met de milieuwetgeving, omtrent de vijf vooropgestelde thema's.



Samenvatting van het inleidend webinar



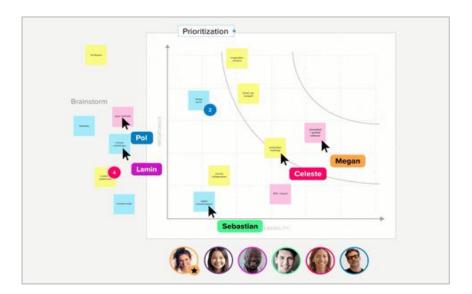
Voorstelling van en discussie over de verkregen input & brainstorm oefening over mapping



Interactieve oefening voor de creatie van een technische standaard

Wie is wie?







Samenvatting van het inleidend webinar



Context



Vervolgtraject van OSLO Waterkwaliteit

- 1. Identificatie van relevante concepten voor de uitwisseling rond lucht-, water- en bodemkwaliteit binnen de milieuwetgeving.
- 2. Invulling van de codelijsten op Vlaams niveau



Doel van het project



Het ontwikkelen van een gestandaardiseerde codelijst op Vlaams niveau inzake:

- Chemische stoffen
- Bioindicatoren
- Observatieprocedures
- Matrices
- Type emissie



Opdrachten na inleidend webinar



Wat verwachtten we van jullie?

- 1. Informatie rond de eerder genoemde thema's (o.a. invullen van de vragenlijst)
- **2. Participatie** in de volgende werkgroepen om tot gestandaardiseerde codelijsten te komen.
- 3. **Discussies** rond benamingen zullen plaatsvinden via de Github van OSLO Omgeving: codelijsten

(https://github.com/Informatievlaanderen/OSLOthema-omgeving)

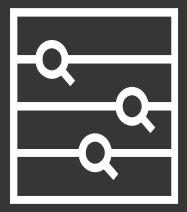


Verkregen input + mapping



Overzicht

- Chemische stoffen
- 2. Bioindicatoren
- 3. Observatieprocedures
- 4. Matrices
- 5. Type emissie





Algemene methodologie

Verzamelen en Analyseren en Vergelijking van capteren van analyseren van Analyseren van alle de beschikbare de verkregen onderlinge beschikbare wettelijke input van verschillen concepten bronnen participanten



1.

Verzameling van de lijsten

2.

Welke stoffen komen meermaals voor? 3.

Eerste schifting van de meermaals voorkomende stoffen



Analyseren van de onderlinge verschillen per stof (op vlak van CAS-nummers, stof- en conceptniveau)



Voorbeeld:

| benzeen | 71-43-2 | 71-43-2 | 71-43-2 | 71-43-2 |
|---------|---------|---------|---------|---------|
|---------|---------|---------|---------|---------|

Concept ChemischeStof/benzeen

https://test.data.vlaanderen.be/id/concept/ChemischeStof/benzeen

| Gegevens | |
|----------------------|--|
| label | benzeen |
| definitie | |
| bijkomende info | |
| notatie | HOVQNZJYSORNB-UHFFFAOYSA-N |
| heeft specialisatie | |
| is specialisatie van | |
| is topconcept van | > ChemischeStof |
| n schema | > ChemischeStof |
| dataset | https://data.vlaanderen.be/id/dataset/codelist |



Voorbeeld 1: Octylfenol

→ drie verschillende CAS-nummers

CAS: 140-66-9 "4-tert-Octylphenol"

Dep.
Omgeving

CAS: 1806-26-4 "4-Octylphenol"



VLAREM II

CAS: 67554-50-1 "Phenol, 2-octyl"



VMM

Voorbeeld 2:

Drie verschillende stoffen met één CAS-nummer

| 12002- 48-1 | 1,2,3- trichloorbenzeen |
|----------------|----------------------------|
| | 1,2,4- trichloorbenzeen |
| | 1,3,5- trichloorbenzeen |

Voorbeeld 3:

Meerdere CAS-nummers voor één stof

| 25154- 52-3 | | |
|----------------|------------|--|
| 104-40- 5 | nonylfenol | |
| 84852- 15-3 | | |



Voorbeeld 1: Octylfenol

→ drie verschillende CAS-nummers

CAS: 140-66-9 "4-tert-Octylphenol"

Dep.
Omgeving

CAS: 1806-26-4 "4-Octylphenol"



VLAREM II

CAS: 67554-50-1 "Phenol, 2-octyl"



VMM

<u>Conclusie:</u> Bij afwijkende CAS-nummers ⇒ gebruik van pubchem als basis i.p.v. VLAREM II.

- ⇒ Zo bekomen wij de meest correcte resultaten.
- ⇒ Deze aanpassingen zullen gemaakt worden door het OSLO-team en in samenspraak met de VMM.



Onderscheid:

- Lijst met zuivere stoffen (= stoffen die een CAS-nummer of InChlKey bevatten)
- **Lijst met milieuconcepten** die geen CAS-nummer hebben, maar wel belangrijk zijn in de chemie (bv. totaal fosfor, temperatuur, ...).
- Lijst met allerlei stofgroepering.
 - Bv. Pesticiden, zware metalen, suikers, alkanen, ...
- **Lijst met mengsels** (= <u>kan</u> een CAS-nummer bevatten, maar zijn geen zuivere stof op zich).
 - Bv. somparameters



Organische stoffen

| Alcohols | Aldehydes | Amides |
|-----------------------------|--------------------------|----------------------------|
| Amidines | Amines | Anhydrides |
| Aza Compounds | Azides | Azo Compounds |
| Boron Compounds | Carboxylic Acids | Catenanes |
| Cyanates | Ethers | Free Radicals |
| Hydrazines | Hydrocarbons | Imides |
| Imines | Isocyanates | Ketones |
| Lactones | Nitrates | Nitriles |
| Nitrites | Nitro Compounds | Nitroso Compounds |
| Onium Compounds | Organometallic Compounds | Organophosphorus Compounds |
| Organoselenium Compounds | Organosilicon Compounds | Peroxides |
| Phenols | Quinones | Semicarbazides |
| Sulfur Compounds | Triazenes | Urea |

Inorganische stoffen

| Acids | Alkalies | Aluminum Compounds |
|-----------------------------|------------------------|---------------------|
| Arsenicals | Barium Compounds | Boron Compounds |
| Bromine Compounds | Cadmium Compounds | Calcium Compounds |
| Carbon Compounds, Inorganic | Chlorine Compounds | Chromium Compounds |
| Electrolytes | Elements | Fluorine Compounds |
| Free Radicals | Gases | Gold Compounds |
| Hydrogen | Hydroxides | Iodine Compounds |
| Iron Compounds | Isotopes | Lithium Compounds |
| Magnesium Compounds | Manganese Compounds | Mercury Compounds |
| Metals | Minerals | Nitrogen Compounds |
| Organometallic Compounds | Osmium Compounds | Oxygen Compounds |
| Phosphorus Compounds | Platinum Compounds | Potassium Compounds |
| Ruthenium Compounds | Selenium Compounds | Silicon Compounds |
| Silver Compounds | Sodium Compounds | Sulfur Compounds |
| Technetium Compounds | Thorium Compounds | Tin Compounds |
| Tungsten Compounds | Uranium Compounds | Vanadium Compounds |
| Zinc Compounds | Coordination Complexes | Salts |



Onze vraag:

- Onderscheid maken in jullie lijsten tussen zuivere stoffen, milieuconcepten en mengsels:
 - **Zuivere stof:** heeft een CAS-nummer of InChlKey (gelieve deze beiden zoveel mogelijk aan te vullen).
 - **Milieuconcept:** heeft geen CAS-nummer, maar is wel belangrijk om op te nemen.
 - Bv. Temperatuur, Korrelgrootte $< 2 \mu m$, ...
 - leder milieuconcept zal een duidelijke definitie moeten krijgen.
 - Mengsel: kan een CAS-nummer bevatten, maar is geen zuivere stof op zich (bv. <u>Xylenen</u>).





Een korte pauze...





Welkom terug!





2. Bioindicatoren



Afkomstig van VLAREM II

Huidige lijst:

| URI | label |
|--|-------------------------|
| https://datavlaanderen.be/id/concept/Bioindicatoren/EKC-macrofyten | EKC-macrofyten |
| https://datavlaanderen.be/id/concept/Bioindicatoren | Bioindicatoren |
| https://datavlaanderen.be/id/concept/Bioindicatoren/EKC-visfauna | EKC-visfauna |
| https://datavlaanderen.be/id/concept/Bioindicatoren/EKC-fytobenthos | EKC-fytobenthos |
| https://datavlaanderen.be/id/concept/Bioindicatoren/EKC-fytoplankton | EKC-fytoplankton |
| https://data.vlaanderen.be/id/concept/Bioindicatoren/EKC-macro-invertebraten | EKC-macro-invertebraten |

Ontbrekende bioindicatoren?Additionele informatie opnemen?Zo ja, welke? Internationale identificator?

kiemgetal bij 22°C en 36°C coliformen Escherichia coli (E. coli) intestinale enterococci (enterokokken) Salmonella spp. Legionella pneumophila Legionella spp. Pseudomonas aeruginosa Clostridium perfringens coagulase positieve staphylococci (stafylokokken) somatische colifagen

Ecotoxiciteitstest met invertebraten: acute toxiciteit voor de watervlo (Daphnia magna) of het pekelkreeftje (Artemia franciscana)

Ecotoxiciteitstest met vissen: acute toxiciteit voor zebravisembryo (Danio rerio)

Ecotoxiciteitstest met vissen: acute toxiciteit voor forel (Oncorhynchus mykiss)

Ecotoxiciteitstest met algen: groeiinhibitietest met de zoetwateralg (Pseudokirchneriella subcapitata) of de mariene alg (Phaeodactylum tricornutum)

Ecotoxiciteitstest met bacterie: acute toxiciteit voor de luminescente bacterie (Aliivibrio fischeri)

BBI berekening op basis van op het veld verzamelde macro-invertebraten

MMIF berekening op basis van op het veld verzamelde macro-invertebraten

Zahn-Wellens test op afvalwaters: bioelimineerbaarheid van DOC en toxiciteit na 7 tot 28 dagen behandeling











3. Observatieprocedures

- Gebaseerd op de beschikbare wettelijke bronnen:
 - Het compendium voor de monsterneming, meting en analyse van:
 - Water (WAC)
 - Lucht (LUC)
 - Bodembescherming (BOC)
- Toevoeging:
 - Het compendium voor de monsterneming en analyses van afvalstoffen en bodem (CMA)

Zijn jullie hiermee akkoord?

Moet er nog iets worden opgenomen in deze lijst?





4. Matrices

Verkregen input:

- Afvalwater
- Oppervlaktewater
- Grondwater
- Drinkwater
- Bodem
- Lucht









5. Type Emissie

- Diffuus
- Geleid
- Fugitief
- Abnormale emissies
- Andere niet-geleide emissie
- Doorzet emissie
- Lekverliezen
- Fakkelemissie
- Niet-geleide emissie
- Wat ontbreekt?
 Welke informatie moet ook worden opnemen?



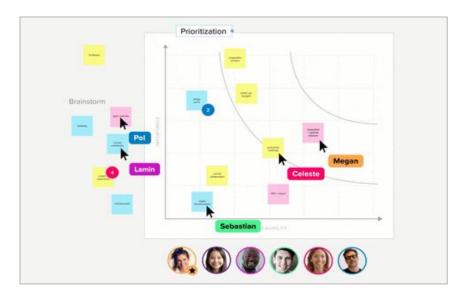




We keren nu even terug naar:









Technische standaard



Samenspraak over de URI's

Voorbeeld URI:

https://data.vlaanderen.be/id/concept/ChemischeStof/x

- Welke informatie plakken we aan deze URI (op de x)?
 - InCHI-Key
 - CAS-nummer
 - Nederlandstalige term
 - Engelstalige term
 - o Andere?
- Welke taal gebruiken we?
- Gebruiken we de stofnaam?



Gedeelde informatie bij chemische stoffen

Welke informatie willen we meegeven bij een data-uitwisseling:

- Stofnaam?
- Afkortingen?
- Synoniemen?
- Chemische beschrijving
- Nederlandstalige/Engelstalige/Anders talige term?
- Internationale identificator
 - CAS-Nummer
 - InCHI-Key
 - SMILES
 - Andere?
- Verwijzing naar een bron
 - PubChem
 - VLAREM
 - Andere?



```
@prefix rdfs:
                     <http://www.w3.org/2000/01/rdf-schema#> .
     @prefix skos:
                     <http://www.w3.org/2004/02/skos/core#> .
     @prefix dbp:
                      <http://dbpedia.org/property/> .
     @prefix dbo:
                     <http://dbpedia.org/ontology/> .
     @prefix cs:
                    <https://data.vlaanderen.be/ns/chemische stof#> .
     <https://data.vlaanderen.be/id/concept/chemische stof/LELOWRISYMNNSU-UHFFFAOYSA-N>
                                   dbo:ChemicalSubstance , dbo:ChemicalCompound , skos:Concept ;
              skos:inScheme <a href="https://data.vlaanderen.be/id/conceptscheme/chemische">https://data.vlaanderen.be/id/conceptscheme/chemische</a> stof>;
                                   <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/768> ;
              rdfs:seeAlso
11
12
              dbo:inchi
                                   "InChI=1S/CHN/c1-2/h1H";
              dbo:iupacName
                                   "formonitrile"@en ;
13
              dbo:smiles
                                   "C#N" ;
14
              skos:altLabel
                                   "HCN" :
15
              skos:exactMatch
                                   <http://dd.eionet.europa.eu/vocabulary/wise/ObservedProperty/CAS 74-90-8>;
16
              skos:notation
                                   "LELOWRISYMNNSU-UHFFFAOYSA-N" :
                                   "Waterstofcyanide"@nl , "Hydrogen cyanide"@en ;
              skos:prefLabel
18
              dbo:casNumber
                                   "74-90-8" :
19
20
              dbp:inchikey
                                   "LELOWRISYMNNSU-UHFFFAOYSA-N";
21
              dbo:pubchem
                                   "768";
22
              dbo:ecNumber
                                   "200-821-6";
              cs:vmmParameterId
23
                                  "1158"^^xsd:int .
```

Milieuconcepten/mengsels van stoffen

Twee opties:

- 1. Op voorhand definiëren
- 2. Zien als som van de concentraties

Beide opties zijn mogelijk.

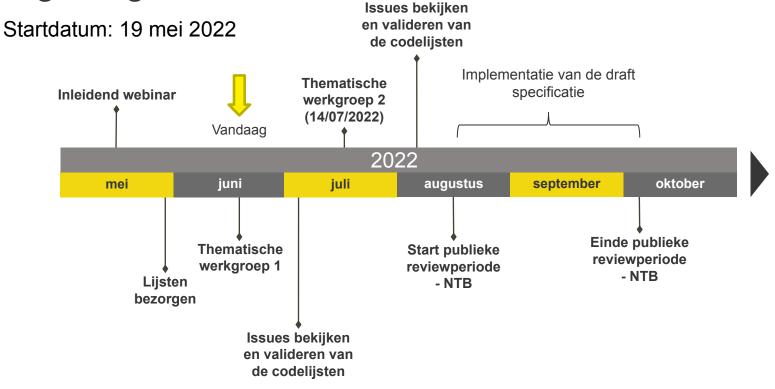


Tijdslijn



Tijdslijn





Volgende stappen



Volgende stappen



Wat verwachten wij van jullie?

- Onderscheid maken in jullie eerder doorgestuurde lijsten tussen zuivere stoffen, fysicochemische eigenschappen, mengsels en somparameters en deze terugbezorgen aan ons.
 - **Zuivere stof** = stoffen met een CAS-nummer of InChlKey.
 - Fysicochemische eigenschap = geen stof op zich, maar een belangrijk begrip dat gebruikt wordt in de chemie (bv. "temperatuur" of "korrelgrootte $< 2 \mu m$).
 - **Mengsels** = kunnen een CAS-nummer bevatten, maar zijn geen zuivere stoffen. Het zijn combinaties van verschillende stoffen (bv. Xyleen, trimethylbenzenen etc.).
 - **Somparameters** = een groepering van stoffen (zoals bv. PAK-16).
- Optioneel: gegeven codelijsten aanvullen met de juiste identificationkeys (CAS-nummers, InChlKeys & SMILES).
- Ons contacteren indien bepaalde zaken nog ontbreken in de mapping.

<u>Tegen wanneer?</u>

7 juli 2022

Via welke weg?

⇒ <u>laurens.vercauteren@vlaanderen.be</u>



Volgende stappen



Wat kunnen jullie van ons verwachten?

- Verslag van deze eerste thematische werkgroep.
- Verzamelen en analyseren van alle verkregen input.
- Verdere verfijning van de mapping.



Vragen?





Feedback & samenwerking



Feedback kan per e-mail worden gegeven aan de volgende personen:

oslo@vlaanderen.be



Feedback/input kan gegeven worden via GitHub:

https://github.com/Informatievlaanderen/OSLOthema-omgeving/issues

Via het aanmaken van **issues**

Bedankt!

