

Opdrachtgever:

DG Rijkswaterstaat

ADEPTS - Gebruiksaanwijzing

Versie 1.00

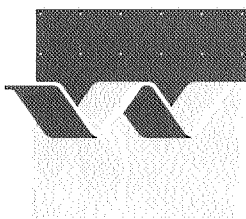
mei 2000

ADEPTS - Gebruiksaanwijzing

Versie 1.00

A. Hendriks

mei 2000



wl | delft hydraulics

Copyright © 1999, 2000 Ministerie van Verkeer en Waterstaat, Directoraat-Generaal Rijkswaterstaat, Rijksinstituut voor Kust en Zee (RIKZ) en Rijksinstituut voor Integraal Zoetwaterbeheer en Afvalwaterbehandeling (RIZA).

HelpBreeze™ is een handelsmerk van Solutionsoft

Dit document is geproduceerd met de HelpBreeze Document Wizard.

Introductie

Introductie

ADEPTS, een acroniem voor “**A** Database for **E**nvironmental **P**roperties of **T**oxic **S**ubstances”, is een applicatie en database voor toegang tot informatie over Physico-Chemische en Ecotoxicologische parameters voor een aantal stoffen in een aantal compartimenten of omgevingssystemen. De physico-chemische parameters die in ADEPTS opgeslagen zijn, zijn in het bijzonder relevant voor aquatische afbraakprocessen van chemicaliën, inclusief sorptie, vervluchtiging, degradatie en bioaccumulatie. De filosofie achter de database is dat een waarde voor een gegeven milieu-parameter op zichzelf geen betekenis heeft, tenzij de condities waaronder de parameter is gemeten zorgvuldig zijn vastgelegd. Daarom wordt elke parameter waarde vergezeld van een aantal 'omgevingsbepalende velden' (zoals bijvoorbeeld pH, temperatuur, saliniteit en redox condities) om de toepasbaarheid aan te geven. Terwijl men gegevens uit de database haalt, kan men beperkingen opgeven voor deze velden. Hoe men deze beperkingen opgeeft, wordt uitgelegd in “Beperk de hoeveelheid weergegeven gegevens”. Bovendien wordt de herkomst van de gegevens aangegeven, zodat de gebruiker kan beslissen al dan niet 'review' gegevens te gebruiken naast gegevens gegenereerd met behulp van QSAR's. Een ander uniek punt van de database is de kwaliteitsbeoordeling van de gegevens, die wordt weergegeven met een deelscore voor analytische, methodologische en statische kwaliteit of een score index.

ADEPTS is een integratie van de bestaande applicaties AQUAPOL en AQUATOX en is ontwikkeld door BKH Adviesbureau en WL | Delft Hydraulics voor de *Rijkswaterstaat* (RIZA en RIKZ).

Veel gegevens zijn voorzien van een score voor de betrouwbaarheid. Gegevens afkomstig uit AQUAPOL hebben aparte deelscores voor analytische, methodische, statistische en compleetheidsaspecten, die toegekend zijn volgens een strak protocol, de uit AQUATOX afkomstige gegevens zijn tijdens de conversie grotendeels voorzien van een score-index op de schaal van 1 tot 4, met de volgende betekenis:

1	uitstekend
2	betrouwbaar
3	onbetrouwbaar
4	niet beoordeeld

Inlichtingen over de protocollen voor de toekenning van de scores zijn verkrijgbaar bij A. de Vries, RIKZ.

Selecties en Profielen

Een Selectie is een complete beschrijving van een (deel van) de gegevens in de database. Ze bevat informatie over welke stoffen, parameters en

omgevingssystemen weer te geven, en ook informatie over elke kolom, zoals beperkingen, de breedte van de kolom, enz. In dit helpbestand zal elke keer als het woord selectie wordt gebruikt om deze beschrijving aan te duiden, dit woord worden geschreven met een hoofdletter S. Een selectie in een andere betekenis, zoals een selectie uit een lijst van mogelijkheden, wordt geschreven met een kleine letter s.

Er bestaat een belangrijk onderscheid tussen *Selecties* en *Profielen*: een Profiel is een Selectie die niet weergegeven kan worden omdat één of meer van de items die nodig zijn om een Selectie weer te geven ontbreken. Een voorbeeld is een Selectie zonder gegevens over stoffen: omdat alle gegevens in de database betrekking hebben op experimenten of normen **voor een stof**, kan er niets weergegeven worden zonder een stof te specificeren. De incomplete Selectie kan echter wel belangrijke informatie bevatten over experimenten die u wilt weergeven, zoals de beperkingen voor kolommen en hun breedtes. Profielen (incomplete Selecties) kunnen daarom wel opgeslagen worden, zodat de informatie beschikbaar is voor later gebruik. Het is ook mogelijk een complete Selectie op te slaan als Profiel. In dat geval wordt minimaal één van de drie hoofdonderdelen (stoffen, parameters en omgevingssystemen) weggelaten uit het bestand. Welke worden weggelaten wordt bepaald door het menu *Opties/Voorkeuren/Onbepaald in profiel* in het *hoofdvenster* (zie pagina 30).

De stoffen die in het *Hoofdvenster* (zie pagina 30) worden weergegeven worden **niet** beïnvloed door de beperkingen zoals die in het *Beperkingenvenster* (zie pagina 28) zijn ingesteld. Als bijvoorbeeld de Selectie of het Profiel een beperking heeft op het Molecuulgewicht van "< 100.0", zal de stoffenlijst in het Hoofdvenster nog steeds alle stoffen laten zien die deel uitmaken van de Selectie, ook al hebben ze een molecuulmassa groter dan 100.0 g/mol.

Installatie

Om ADEPTS te installeren heeft u nodig:

- De CD-ROM met het installatie programma,
- Een Personal Computer met Windows™ 95 B, Windows 98 of Windows NT4 met (minimaal) Service Pack 3,
- Een CD-ROM speler,
- Ten minste 20 MegaByte vrije ruimte op een lokale harde schijf of op een netwerkschijf.

Een Pentium processor van 300 MHz of beter wordt aanbevolen, evenals een schermresolutie van tenminste 1024 * 768 punten.

Installatie van ADEPTS verloopt als volgt:

- Sluit alle overige applicaties.
- Stop de installatie CD in de CD-ROM speler (in dit voorbeeld gaan we uit van F:)
- Start het programma SetupA.exe in de hoofdmap van de CD-ROM (dubbelklik op dit bestand in de Windows Verkenner of kies *Uitvoeren* uit het *start menu* en type achter *Openen* in "F:\SetupA.exe" en druk op de OK knop.)
- Volg de aanwijzingen op het scherm. Het is mogelijk dat u enige waarschuwingen te zien krijgt die verband houden met (andere) versies van taalondersteunende bibliotheken. Als deze waarschuwingen aangeven dat u door kunt gaan is er geen probleem. Wordt doorgaan afgeraden, breek dan de installatie af en neem eerst contact op met de *ADEPTS helpdesk* (zie pagina 57).

Na afloop van de installatie is er in het *Programma's* menu van het *start menu* een groep *ADEPTS* aangemaakt met snelkoppelingen naar het uitvoerbare bestand en naar de helpbestanden in het Nederlands en het Engels. Het programma kan vervolgens gestart worden door in deze groep het uitvoerbare bestand te kiezen. De installatie zal ook associaties aanmaken voor Selectie bestanden (*.dsl) en Profiel bestanden (*.dpr), zodat het programma ook gestart wordt als in de Windows Verkenner *dubbelgeklikt* wordt op een Selectie bestand (*.dsl) of een Profiel bestand (*.dpr).

Hoe te ...

Stoffen selecteren

Stoffen selecteren

Er bestaan verschillende manieren om aan te geven welke stoffen in een Selectie opgenomen moeten worden. Welke manier het efficiëntste is, hangt af van de informatie die beschikbaar is over de stof die men wil opnemen in de Selectie (of uitsluiten van de Selectie). Al deze manieren starten door in het *hoofdvenster* (zie *pagina 30*) op de knop "Stoffen" te drukken.

Indien de naam van de stof, zoals die voorkomt in ADEPTS, bekend is, kan de stof *direct uit de lijst* (zie *pagina 11*) geselecteerd worden. Als de naam niet in de lijst gevonden kan worden, is het ook mogelijk *op synoniem te zoeken* (zie *pagina 14*). Selecteren *op naam* (zie *pagina 12*) is trager, maar vindt primaire namen en synoniemen tegelijkertijd.

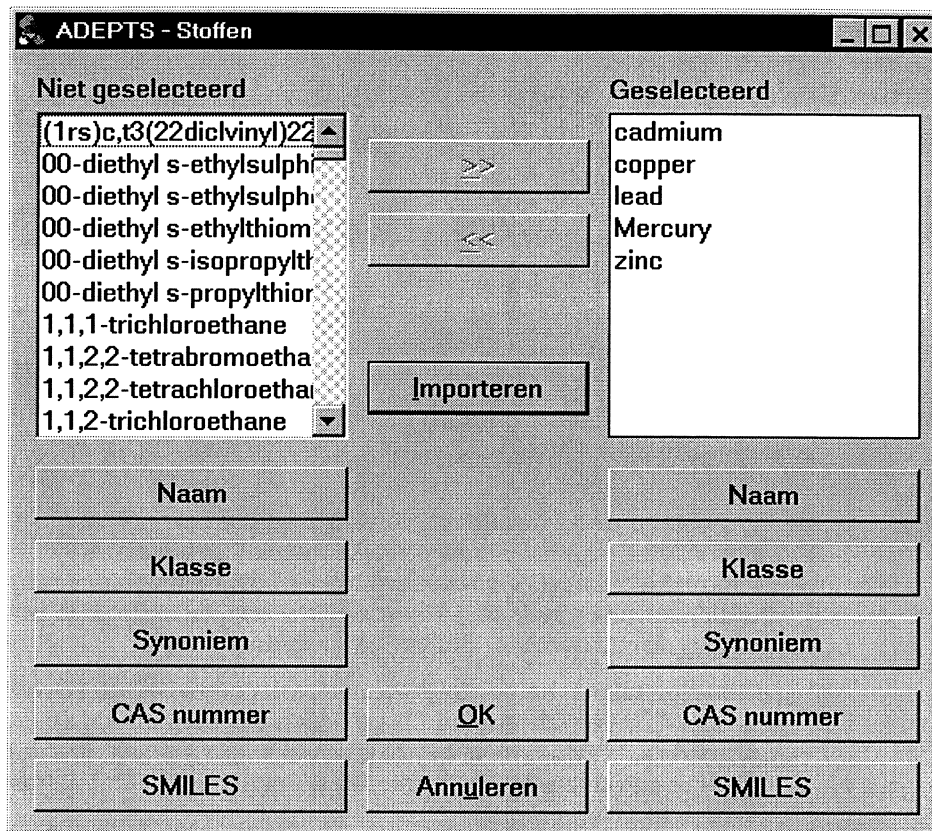
Als u een selectie wilt maken op grond van de klasse waar stoffen toe behoren, kunt u *stoffen selecteren via de klasse* (zie *pagina 13*).

Indien het CAS nummer bekend is kunt u *stoffen selecteren via het CAS nummer* (zie *pagina 15*) of door een lijst met CAS nummers te *importeren uit een ASCII bestand* (zie *pagina 17*).

En als laatste is het mogelijk stoffen te selecteren door een functionele chemische groep in de lineaire notatie (SMILES notatie) te zoeken via *selectie via SMILES notatie* (zie *pagina 16*).

Stoffen selecteren uit de lijst

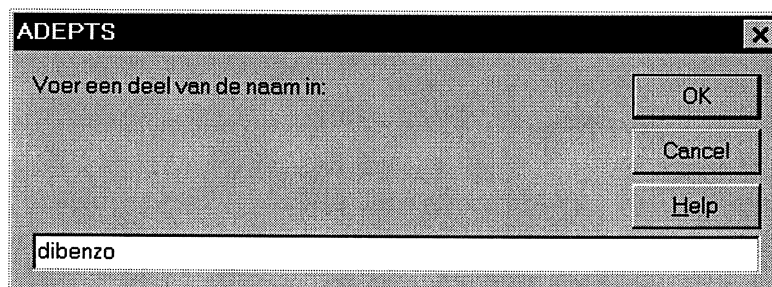
De selectie van stoffen direct uit de lijst is de snelste manier om stoffen te op te nemen of uit te sluiten als de primaire naam waaronder de stof is opgenomen in de database bekend is. In het stoffen venster worden twee lijsten weergegeven: de linkerlijst bevat de primaire namen van alle stoffen die **niet** onderdeel uitmaken van de Selectie (of het Profiel), de lijst aan de rechterkant bevat de namen van alle stoffen die **wel** zijn opgenomen in de Selectie.



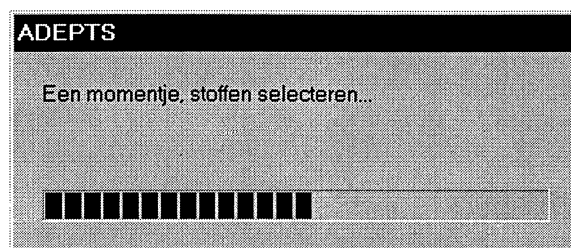
In elk van deze twee lijsten kunt u één of meer namen selecteren. Om één naam te selecteren wijst u met de muiscursor naar de naam en klikt u met de linker muisknop. Om een aaneengesloten reeks namen te selecteren, klikt u eerst op de eerste naam van de reeks met de linker muisknop en klikt u vervolgens, terwijl u de 'shift' toets indrukt, met de linker muisknop op de laatste naam van de reeks. Om een niet aaneengesloten reeks namen te selecteren klikt u met de linker muisknop op elk van de namen terwijl u de 'Ctrl' toets ingedrukt houdt. Nadat u één of meer namen heeft geselecteerd verschijnen deze in een afwijkende kleur. Deze 'oplichtende' namen kunnen dan van de linker naar de rechter lijst (als u namen aan de Selectie wilt toevoegen) of van de rechter lijst naar de linker lijst (als u namen uit de Selectie wilt verwijderen) worden verplaatst door de van toepassing zijnde knop tussen de twee lijsten in te drukken. De veranderingen die u aanbrengt worden doorgevoerd zodra u de knop "OK" indrukt. Deze knop sluit bovendien het venster.

Stoffen selecteren via de naam

Het selecteren van stoffen via de naam is trager dan *selectie uit de lijst* (zie pagina 11), maar kan effectief zijn als u niet zeker weet of de naam die u zoekt een primaire naam of een synoniem is, of als u op een deel van de naam wilt zoeken. Als u stoffen wilt selecteren om opgenomen te worden in de Selectie, druk dan op de knop "Naam" onder de linker lijst, wilt u stoffen selecteren om uit de Selectie verwijderd te worden, druk dan op de knop "Naam" onder de rechter lijst. Het volgende venster verschijnt:



Typ de naam, of een deel van de naam, in het tekstgedeelte in en druk op de "OK" knop. Een voortgangsdialoog verschijnt:



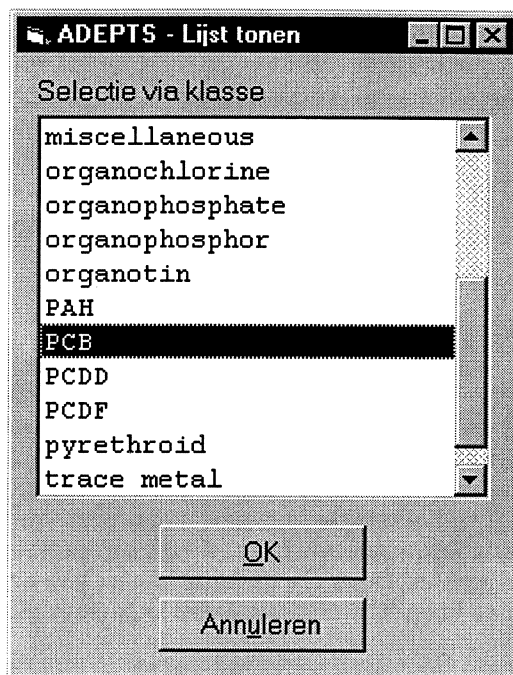
Na enige momenten zal dit venster verdwijnen en zal de applicatie alle stoffen geselecteerd (opgelicht) hebben die de ingevoerde tekst bevatten in of de primaire naam of één van de synoniemen. De vergelijking is niet gevoelig voor hoofdletters of kleine letters en al geselecteerde (opgelichte) namen blijven geselecteerd. De 'oplichtende' namen kunnen dan van de linker naar de rechter lijst (als u namen aan de Selectie wilt toevoegen) of van de rechter lijst naar de linker lijst (als u namen uit de Selectie wilt verwijderen) worden verplaatst door de van toepassing zijnde knop tussen de twee lijsten in te drukken. De veranderingen die u aanbrengt worden doorgevoerd zodra u de knop "OK" indrukt. Deze knop sluit bovendien het venster.

Stoffen selecteren via de klasse

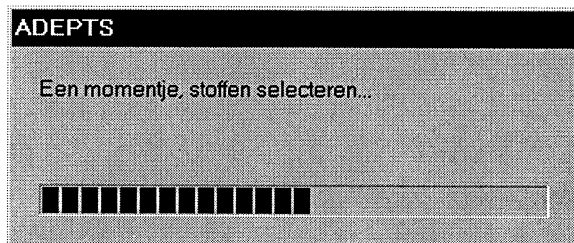
Het selecteren van stoffen via de klasse is trager dan *selectie uit de lijst* (zie pagina 11), maar kan effectief zijn als u **alle** stoffen in een (chemische) klasse wilt opnemen of uitsluiten. Als u stoffen wilt selecteren om opgenomen te worden in de Selectie, druk dan op de knop "Klasse" onder de linker lijst, wilt u stoffen selecteren om uit de Selectie verwijderd te worden, druk dan op de knop "Klasse" onder de rechter lijst. Het volgende venster verschijnt:



De applicatie laat dit venster zien terwijl een lijst van alle klassen wordt aangemaakt waarvan ten minste één stof in de lijst aanwezig is. Nadat deze taak is voltooid verschijnt het volgende venster:



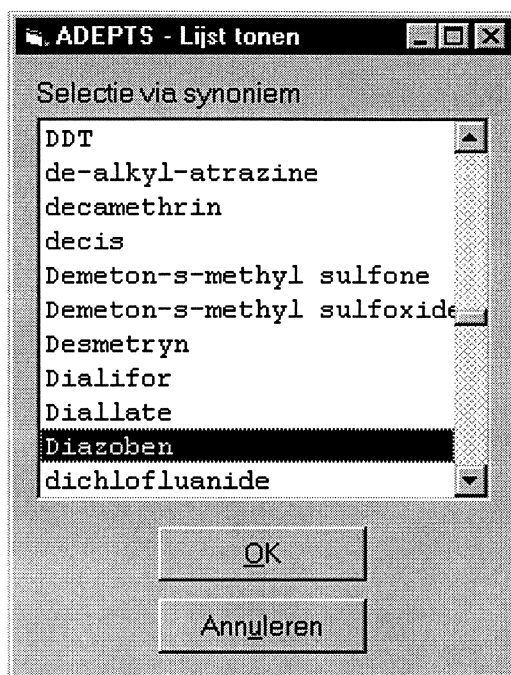
Om één klasse te selecteren wijst u met de muiscursor naar de naam en klikt u met de linker muisknop. Om een aaneengesloten reeks namen te selecteren, klikt u eerst op de eerste naam van de reeks met de linker muisknop en klikt u vervolgens, terwijl u de 'shift' toets indrukt, met de linker muisknop op de laatste naam van de reeks. Om een niet aaneengesloten reeks namen te selecteren klikt u met de linker muisknop op elk van de namen terwijl u de 'Ctrl' toets ingedrukt houdt. Nadat u één of meer namen heeft geselecteerd verschijnen deze in een afwijkende kleur. Druk vervolgens op de "OK" knop om alle stoffen die in deze klassen horen te selecteren. Een nieuw voortgangsdialoog verschijnt:



Na enige momenten zal dit venster verdwijnen en zal de applicatie alle stoffen geselecteerd (opgelicht) hebben die in de geselecteerde klasse(n) thuishoren. De 'oplichtende' namen kunnen dan van de linker naar de rechter lijst (als u namen aan de Selectie wilt toevoegen) of van de rechter lijst naar de linker lijst (als u namen uit de Selectie wilt verwijderen) worden verplaatst door de van toepassing zijnde knop tussen de twee lijsten in te drukken. De veranderingen die u aanbrengt worden doorgevoerd zodra u de knop "OK" indrukt. Deze knop sluit bovendien het venster.

Stoffen selecteren via synoniem

Het selecteren van stoffen via synoniem is trager dan *selectie uit de lijst* (zie pagina 11), maar minder gevoelig voor typfouten dan *selectie via de naam* (zie pagina 12). Als u stoffen wilt selecteren om opgenomen te worden in de Selectie, druk dan op de knop "Synoniem" onder de linker lijst, wilt u stoffen selecteren om uit de Selectie verwijderd te worden, druk dan op de knop "Synoniem" onder de rechter lijst. Terwijl het programma een lijst van synoniemen aanmaakt verschijnt een voortgangsdialoog op het scherm, even later gevolgd door het volgende venster:



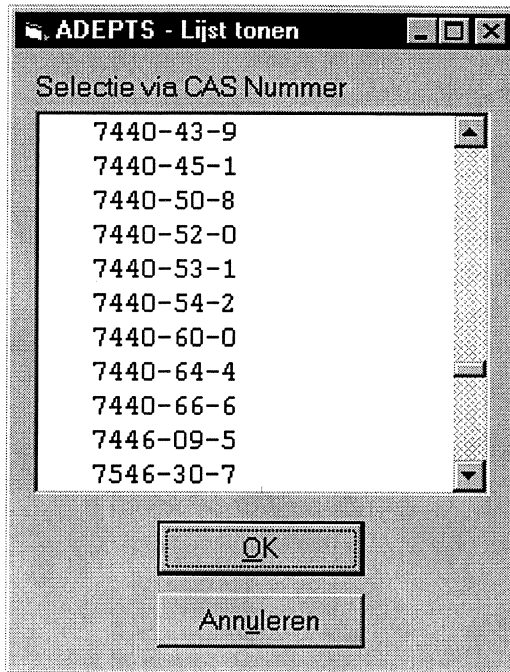
Om één synoniem te selecteren wijst u met de muiscursor naar de naam en klikt u met de linker muisknop. Om een aaneengesloten reeks namen te selecteren, klikt u eerst op het eerste synoniem van de reeks met de linker muisknop en klikt u vervolgens, terwijl u de 'shift' toets indrukt, met de linker muisknop op de laatste naam van de reeks. Om een niet aaneengesloten reeks namen te selecteren klikt u met de linker muisknop op elk van de namen terwijl u de 'Ctrl' toets ingedrukt houdt. Nadat u één of meer namen heeft geselecteerd verschijnen deze in een afwijkende kleur. Druk vervolgens op de "OK" knop om alle stoffen die in deze synoniemen hebben te selecteren. Een nieuw voortgangsdialoog verschijnt:



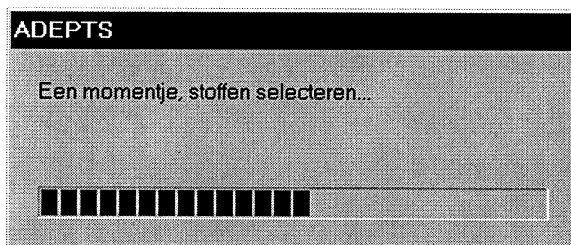
Na enige momenten zal dit venster verdwijnen en zal de applicatie alle stoffen geselecteerd (opgelicht) hebben die de gekozen synoniemen hebben. De 'oplichtende' namen kunnen dan van de linker naar de rechter lijst (als u namen aan de Selectie wilt toevoegen) of van de rechter lijst naar de linker lijst (als u namen uit de Selectie wilt verwijderen) worden verplaatst door de van toepassing zijnde knop tussen de twee lijsten in te drukken. De veranderingen die u aanbrengt worden doorgevoerd zodra u de knop "OK" indrukt. Deze knop sluit bovendien het venster.

Stoffen selecteren via CAS nummer

Het selecteren via CAS nummer is trager dan *selectie uit de lijst* (zie pagina 11), maar is niet afhankelijk van namen die per taal kunnen verschillen. Als u stoffen wilt selecteren om opgenomen te worden in de Selectie, druk dan op de knop "CAS nummer" onder de linker lijst, wilt u stoffen selecteren om uit de Selectie verwijderd te worden, druk dan op de knop "CAS nummer" onder de rechter lijst. Terwijl het programma een lijst van CAS nummers aanmaakt verschijnt een voortgangsdialoog op het scherm, even later gevolgd door het volgende venster:



De CAS nummers worden getoond in oplopende volgorde. Om één CAS nummer te selecteren wijst u met de muiscursor naar het nummer en klikt u met de linker muisknop. Om een aaneengesloten reeks CAS nummers te selecteren, klikt u eerst op het eerste CAS nummer van de reeks met de linker muisknop en klikt u vervolgens, terwijl u de 'shift' toets indrukt, met de linker muisknop op de laatste van de reeks. Om een niet aaneengesloten reeks CAS nummers te selecteren klikt u met de linker muisknop op elk van de nummers terwijl u de 'Ctrl' toets ingedrukt houdt. Nadat u één of meer CAS nummers heeft geselecteerd verschijnen deze in een afwijkende kleur. Druk vervolgens op de "OK" knop om alle stoffen die deze nummers hebben te selecteren. Een nieuw voortgangsdialoog verschijnt:



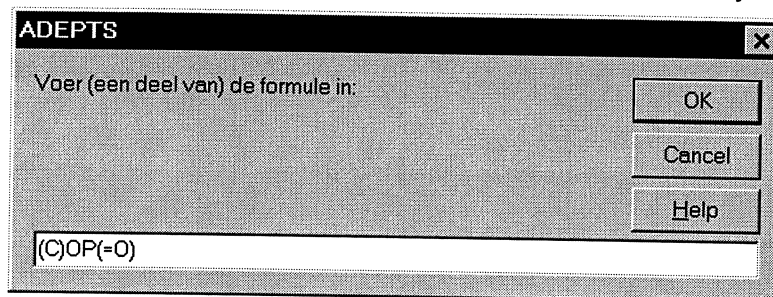
Na enige momenten zal dit venster verdwijnen en zal de applicatie alle stoffen geselecteerd (opgelicht) hebben die de gekozen CAS nummers hebben. De 'oplichtende' namen kunnen dan van de linker naar de rechter lijst (als u namen aan de Selectie wilt toevoegen) of van de rechter lijst naar de linker lijst (als u namen uit de Selectie wilt verwijderen) worden verplaatst door de van toepassing zijnde knop tussen de twee lijsten in te drukken. De veranderingen die u aanbrengt worden doorgevoerd zodra u de knop "OK" indrukt. Deze knop sluit bovendien het venster.

CAS nummers die u wilt **toevoegen** aan de Selectie kunnen ook uit een ASCII bestand (tekst bestand) worden ingelezen. Deze procedure wordt uitgelegd in "Importeren CAS nummers (zie pagina 17)".

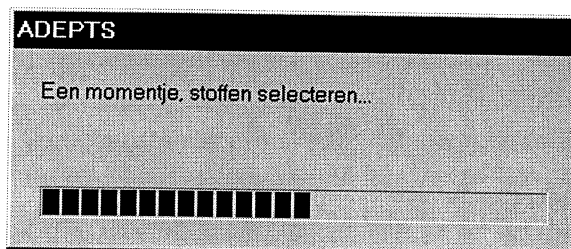
Stoffen selecteren via SMILES

Het selecteren van stoffen via functionele groep in de SMILES notatie is trager dan *selectie uit de lijst* (zie pagina 11), maar kan efficiënt zijn als u stoffen met een bepaalde groep wilt selecteren, en deze groep wordt voor alle stoffen in de SMILES

notatie op dezelfde wijze weergegeven. Als u stoffen wilt selecteren om opgenomen te worden in de Selectie, druk dan op de knop "SMILES" onder de linker lijst, wilt u stoffen selecteren om uit de Selectie verwijderd te worden, druk dan op de knop "SMILES" onder de rechter lijst. Het volgende venster verschijnt:



Typ de groep, of een deel van een groep, in en druk op de "OK" knop. Een voortgangsdialoog verschijnt:



Na enige momenten zal dit venster verdwijnen en zal de applicatie alle stoffen geselecteerd (opgelicht) hebben waarbij de gekozen tekst (in dit voorbeeld "(C)OP(=O)") in de SMILES notatie voorkomt. De vergelijking is gevoelig voor hoofdletters en kleine letters. De 'oplichtende' namen kunnen dan van de linker naar de rechter lijst (als u namen aan de Selectie wilt toevoegen) of van de rechter lijst naar de linker lijst (als u namen uit de Selectie wilt verwijderen) worden verplaatst door de van toepassing zijnde knop tussen de twee lijsten in te drukken. De veranderingen die u aanbrengt worden doorgevoerd zodra u de knop "OK" indrukt. Deze knop sluit bovendien het venster.

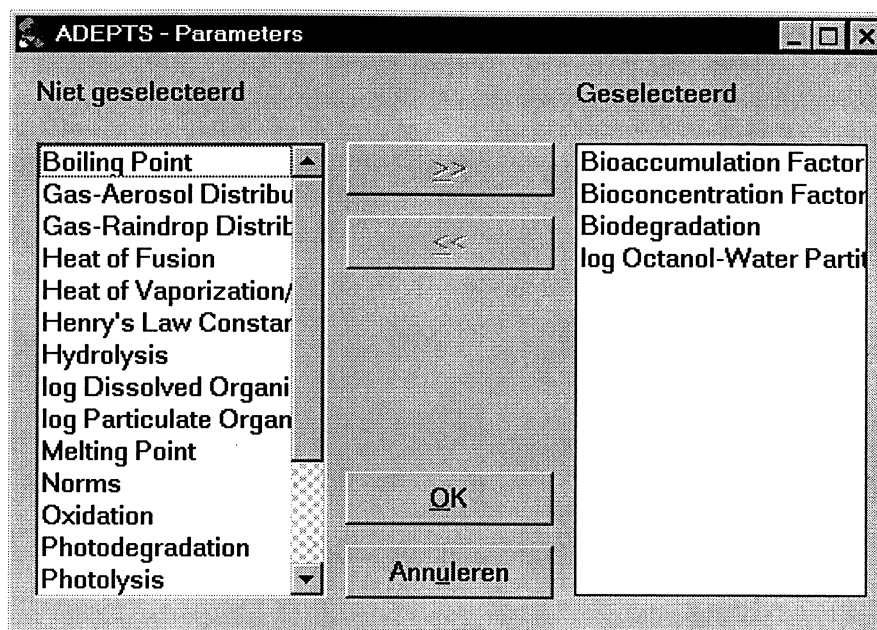
Importeren CAS nummers

Om stoffen te selecteren gebaseerd op een tekstbestand met CAS nummers, moet u de knop "Importeren" tussen de twee lijsten in het *Stof selectie venster* (zie pagina 43) indrukken. Een dialoog vraagt u dan om de naam van een ASCII bestand (zie "Openen ASCII import bestand dialoog" (zie pagina 36)). Dit bestand moet regels bevatten met uitsluitend CAS nummers, één CAS nummer per regel. Regels die niet op een CAS nummer lijken worden genegeerd, voor alle andere regels probeert het programma of het opgegeven nummer hoort bij één van de stoffen in de linkerlijst. Indien dit het geval is, zal het deze stof selecteren. Een log bestand met de naam "Import.log" wordt aangemaakt in de 'user' map (UserFolder, zie "De ADEPTS ini bestanden" (zie pagina 47)).

Parameters selecteren

Parameters selecteren

Keuze van Parameters vindt plaats met de knop "Parameters" in het *Hoofd venster* (zie pagina 30). Door deze in te drukken verschijnt het volgende venster:



In het parameters venster worden twee lijsten weergegeven: de linkerlijst bevat de namen van alle parameters die **niet** onderdeel uitmaken van de Selectie (of het Profiel), de lijst aan de rechterkant bevat de namen van alle parameters die **wel** zijn opgenomen in de Selectie. In elk van deze twee lijsten kunt u één of meer namen selecteren. Om één naam te selecteren wijst u met de muiscursor naar de naam en klikt u met de linker muisknop. Om een aaneengesloten reeks namen te selecteren, klikt u eerst op de eerste naam van de reeks met de linker muisknop en klikt u vervolgens, terwijl u de 'shift' toets indrukt, met de linker muisknop op de laatste naam van de reeks. Om een niet aaneengesloten reeks namen te selecteren klikt u met de linker muisknop op elk van de namen terwijl u de 'Ctrl' toets ingedrukt houdt. Nadat u één of meer namen heeft geselecteerd verschijnen deze in een afwijkende kleur. Deze 'oplichtende' namen kunnen dan van de linker naar de rechter lijst (als u parameters aan de Selectie wilt toevoegen) of van de rechter lijst naar de linker lijst (als u parameters uit de Selectie wilt verwijderen) worden verplaatst door de van toepassing zijnde knop tussen de twee lijsten in te drukken. De veranderingen die u aanbrengt worden doorgevoerd zodra u de knop "OK" indrukt. Deze knop sluit bovendien het venster.

Compartmenten selecteren

Compartmenten selecteren

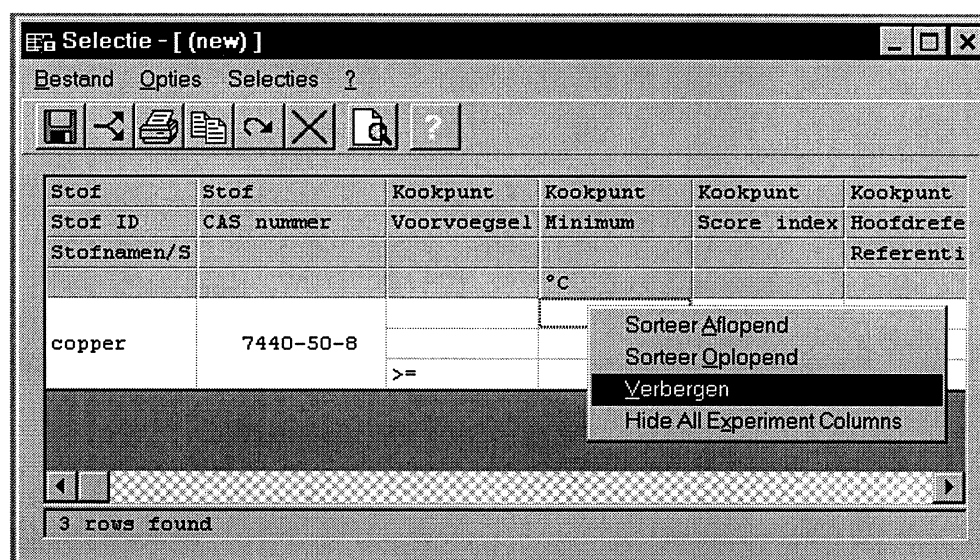
Compartmenten, ook Omgevingssystemen genoemd, worden gekozen en verwijderd door de aankruisvakken in de rechter omlijsting van het *hoofdvenster* (zie pagina 30) aan te klikken. Veranderingen zijn onmiddellijk effectief, in tegenstelling tot de keuze van stoffen en parameters, waar u bij het verlaten van het keuzevenster kunt "bekrachtigen" of "annuleren". Pas op: niet alle parameters komen voor in alle compartimenten: in release 1.00 van ADEPTS is bijvoorbeeld oxydatie alleen gedefinieerd voor de drie watersystemen en lucht, terwijl kookpunt uitsluitend voorkomt in het compartiment "niet van toepassing".

De Selectie tonen

De hoeveelheid getoonde data beperken

Nadat u in het *hoofdvenster* (zie pagina 30) stoffen, parameters en compartimenten geselecteerd heeft, zal een druk op de knop "Weergeven" alle gegevens voor de Selectie laten zien. De gegevens worden getoond in een rooster (zie het voorbeeld in de paragraaf "Selectie venster (zie pagina 40)") en kan voor een Selectie met meer dan één parameter makkelijk meer dan vijftig kolommen bevatten. Niet alle kolommen en rijen in dit venster zijn even belangrijk voor de vraag die u wilt beantwoorden. Om een voorbeeld te geven: als u gegevens voor pKa experimenten weergeeft, kan het zijn dat u niet geïnteresseerd bent in de kolom "pKa/Origin ID/Origins/Description", die de herkomst van de data weergeeft, omdat u uitsluitend rijen wilt weergeven die een herkomst "Measured" (gemeten) hebben. Hoe u kolommen kunt laten zien of verbergen wordt uitgelegd in de paragraaf "Kolommen tonen of verbergen (zie pagina 19)", terwijl de paragraaf "Beperkingen voor een kolom zetten (zie pagina 21)" vertelt hoe u rijen kunt uit filteren door beperkingen op te geven waar de gegevens aan moeten voldoen.

Kolommen tonen of verbergen




Kolommen verbergen

Kolommen in het Selectie venster kunnen op een aantal manieren worden verborgen.

- Misschien wel de meest intuïtieve manier is door met de muiscursor naar een kolom te wijzen en de rechter muistoets in te drukken. Het hierboven getoonde menu zal verschijnen en door in dit menu "Verbergen" te kiezen zal de kolom verborgen worden.
- Hetzelfde menu kunt u ook vinden via het hoofdmenu van het Selectie venster: kies *Opties/Kolom opties*. In dit geval werkt het commando op de *huidige kolom*, de laatst gekozen kolom met de muis of het toetsenbord. De huidige kolom heeft een 'selectie vierkant' rond de huidige cel, maar deze kan in een deel van het rooster liggen dat op dat moment niet zichtbaar is.
- Een derde manier om een kolom onzichtbaar te maken is door de breedte van de kolom tot 0 te reduceren. Als de muiscursor op één van de bovenste rijen van het rooster **tussen** twee kolommen geplaatst wordt, verandert de aanwijzer in een verticale streep met twee pijlen die naar links en naar rechts wijzen. Als u nu de linker knop van de muis indrukt, kunt u de rechter begrenzing van de rij

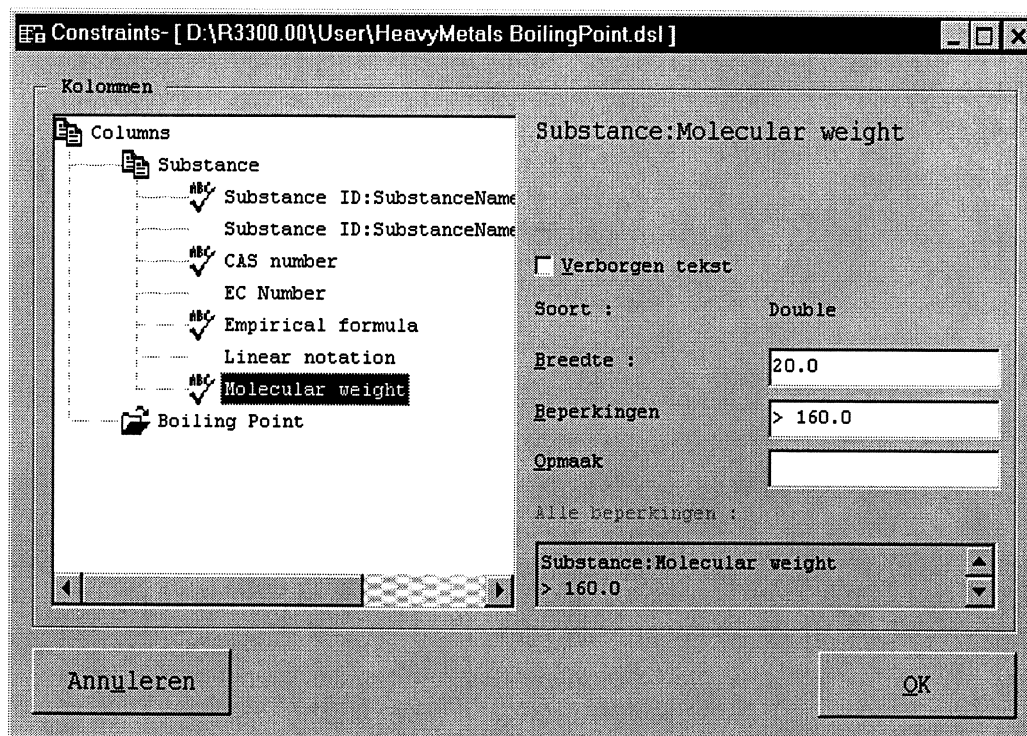
verplaatsen in de richting van de linker begrenzing en de breedte van de kolom aanpassen. Als u de rechter begrenzing verplaatst tot exact dezelfde positie als de linker begrenzing wordt de breedte van de kolom 0, wat er op neer komt dat de kolom onzichtbaar wordt.

De laatste manier om een kolom te verbergen is door de knop "Zet criteria en toon/verberg" op de gereedschapsbalk () in te drukken of door het menu *Opties/Beperkingen* te kiezen. Dit opent het "Beperkingen venster" waar u kolommen ook kunt verbergen. Dit wordt in de volgend sectie uitgelegd.

Het verbergen van een kolom beïnvloedt **niet** de beperkingen voor die kolom. Zie "*Beperkingen voor een kolom zetten (zie pagina 21)*" voor een uitleg over het zetten van beperkingen.

Kolommen tonen

In het Beperkingen venster worden alle details voor elke kolom in het rooster weergegeven en kan de meerderheid van deze gegevens worden bewerkt. Hieronder valt ook het aankruisvak "Verbergen", dat te vinden is in het rechter vlak van dit venster. Door dit vak aan te kruisen wordt de kolom, zoals geïdentificeerd door de oplichtende naam in het linker venstervlak en door het grotere opschrift bovenin het rechter venstervlak, verborgen (in het voorbeeld is dit de kolom "Substance:Molecular weight"). Door het aankruisvak leeg te maken wordt de kolom zichtbaar (als de breedte groter is dan 0). De zichtbaarheid kan ook worden gewisseld door in het linker venstervlak met de **rechter** muisknop op de naam van een kolom te klikken. Zichtbare kolommen worden hier aangegeven met een vinkje voor de naam.



Meer informatie over dit venster is te vinden in de paragraaf "*Beperkingen voor een kolom zetten (zie pagina 21)*".

De waarde voor de breedte wordt uitgedrukt in millimeters. De opgegeven waarde zal niet altijd precies zijn door verschillen in schermafmetingen en verschillen tussen printers.

De breedte van een kolom kan ook direct worden ingesteld in het Selectie venster, zoals in de sectie "kolommen verbergen" hier boven is uitgelegd.

Beperkingen voor een kolom zetten

Een beperking voor een kolom is als de WHERE clause in een SQL query: ze formuleert welke records (rijen) getoond zullen worden als resultaat van een bevraging van de database. In het *beperkingen* tekstvak in het rechter venstervlak van het *Beperkingen venster* (zie pagina 28) kunt u een geldige 'SQL WHERE clause'-achtige zin (zonder namen van velden of kolommen) als beperking invoeren. Wat geldig is en wat niet wordt onder meer bepaald door het soort kolom (dit wordt weergegeven twee rijen boven het tekstvak).

Voorbeelden van geldige beperkingen zijn:

Type veld	Beperking	Opmerkingen
single, double	< 160.0	Selecteer alle rijen waar de waarde van dit veld kleiner is dan 160.0
single, double	> 100.0 AND < 150.0	Selecteer alle rijen waar de waarde van dit veld ligt tussen 100 en 150.
Single, double	<= 100.0 OR > 150.0	Selecteer alle rijen waar de waarde van dit veld kleiner of gelijk aan 100 is of groter dan 150.
Single, double	<> 100.0	Selecteer alle rijen waar de waarde van dit veld ongelijk is aan 100.0. Denk er om dat de vergelijkingen '=' en '<>' bij getallen met drijvende komma onverwachte resultaten kunnen geven door afrondingsverschillen.
Single, double	MEAN	Speciaal geval, zie later in deze paragraaf.
text	= "Janssen"	Selecteer alle rijen waar de waarde van dit veld exact "Janssen" is (niet afhankelijk van hoofdletters of kleine letters).
text	= "Janssen" OR IsNull	Selecteer alle rijen waar de waarde van dit veld exact "Janssen" is (niet afhankelijk van hoofdletters of kleine letters) of leeg is.
text	LIKE "Jans*"	Selecteer alle rijen waar de waarde van dit veld begint met "Jans" (niet afhankelijk van hoofdletters of kleine letters).
text	NOT LIKE "Jans*"	Selecteer alle rijen waar de waarde van dit veld niet begint met "Jans" (niet afhankelijk van hoofdletters of kleine letters).
text	LIKE "*jans*"	Selecteer alle rijen waar de waarde van dit veld "jans" bevat ergens in het veld (niet afhankelijk van hoofdletters of kleine letters).
text	LIKE "P[A-F]###"	Selecteer alle rijen waar de waarde van dit veld begint met de letter P, gevolgd door een letter tussen A en F en drie cijfers.
text	LIKE " 7*"	Selecteer alle rijen waar de waarde van dit veld start met drie spaties en een "7" (bijv. CAS nummers kleiner dan "1000000-00-0" starten met spaties)
long	= 8	Selecteer alle rijen waar de waarde van dit veld gelijk is aan 8.
long	IN (8, 9, 12)	Selecteer alle rijen waar de waarde van dit veld gelijk is aan 8 of 9 of 12.

De sleutelwoorden die gebruikt kunnen worden zijn AND, IN, ISNULL, LIKE, NOT en OR. Sleutelwoorden zijn niet gevoelig voor hoofdletters of kleine letters. Het sleutelwoord ISNULL heeft alleen betekenis indien het alleenstaand gebruikt wordt, of in combinatie met OR. Een zinsnede als "LIKE 'P*' AND ISNULL" zal bijvoorbeeld

nooit rijen opleveren, omdat er nooit rijen zullen zijn waar het veld leeg is en **tegelijkertijd** een tekst bevat die begint met een 'P'.

De vergelijkingsopdrachten die gebruikt mogen worden zijn =, <, <=, <>, > en >=.

Haakjes mogen gebruikt worden om te groeperen.

Er zijn drie speciale beperkingen voor numerieke velden: de woorden **MIN**, **MEAN** en **MAX**, geschreven met hoofdletters en **als enige beperking** voor een veld hebben een speciale betekenis: de rijen die na alle andere beperkingen overblijven worden tot één rij gereduceerd. Bij het sleutelwoord MIN door de rij te laten zien met de laagste waarde voor het veld, bij het sleutelwoord MAX door de rij met de hoogste waarde te laten zien en in geval van MEAN door de gemiddelde waarde van alle resulterende rijen te nemen.

Door op de toets F2 te drukken zal een lijst met alle mogelijke waarden voor het betreffende veld getoond worden. Door één of meer van deze waarden te selecteren zal een beperking met die waarden door het programma worden ingevuld. Niet erg bruikbaar als veel waarden mogelijk zijn, maar handig als het aantal mogelijke waarden beperkt is tot ongeveer 10.

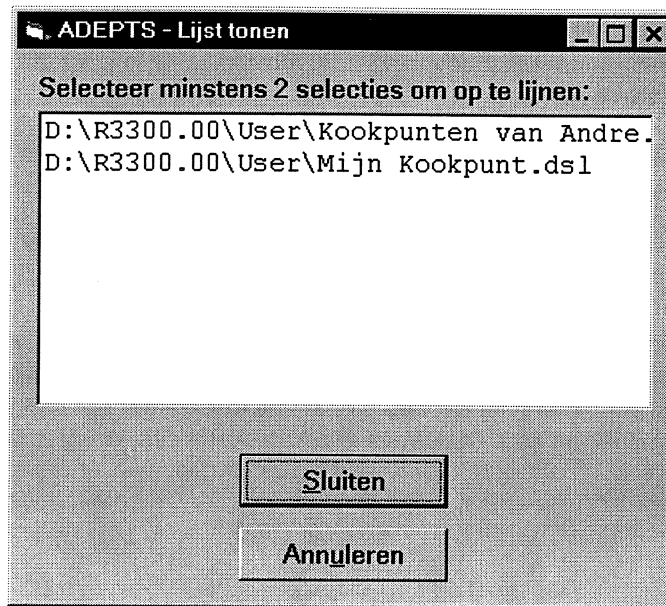
Door op de toets F4 te drukken, zal het programma proberen de beperking te controleren op geldigheid. Als een deel van de beperking twijfelachtig is, zal dit aangegeven worden.

Als beperkingen voor meer dan één kolom zijn opgegeven, worden zij gecombineerd met behulp van 'AND'.

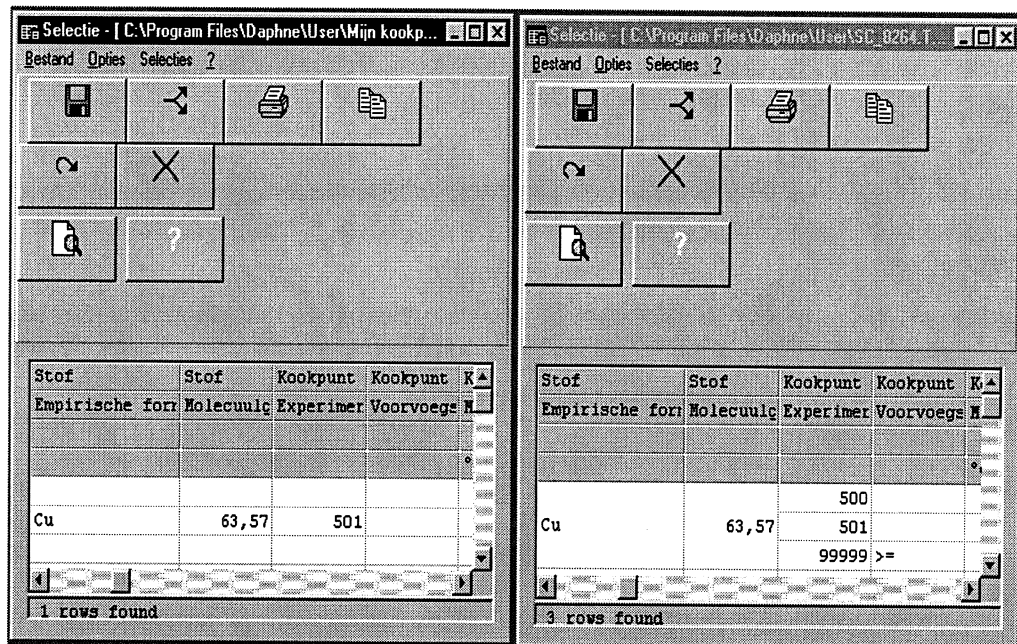
De totale lengte van een beperking mag niet langer zijn dan 1000 tekens.

Selecties oplijnen

Als twee of meer Selecties op het scherm zichtbaar zijn, is het mogelijk om rijen met gelijke gegevens op gelijke positie in alle *Selectie vensters* (zie pagina 40) te laten zien. Dit wordt bereikt door het menu *Selecties / Oplijnen* in één van de Selectie vensters te kiezen. Een lijst met alle op het scherm aanwezige Selecties verschijnt:



Selecteer twee of meer van deze Selecties door ze met de muiswijzer aan te klikken terwijl u de Ctrl toets ingedrukt houdt en druk daarna op de knop Sluiten. Na de vensters gepositioneerd te hebben met de *naast elkaar* of *trapsgewijs* optie, zal het scherm er ongeveer zo uitzien als in het volgende voorbeeld:




Voor iedere rij die wel aanwezig is in de rechter Selectie, maar niet in de linker Selectie, wordt een lege regel getoond in de linker Selectie. Bovendien zouden, indien de linker Selectie rijen zou hebben die niet in de rechter Selectie voorkwamen, lege rijen zijn toegevoegd aan de rechter Selectie. Op deze manier tonen alle Selecties dezelfde gegevens op dezelfde rij. Verschillen tussen Selecties zijn zo makkelijk te zien. Door Selecties te sorteren op een kolom worden de lege rijen niet verwijderd, maar zullen de rijen niet langer in alle Selecties op dezelfde positie zichtbaar zijn! Veranderingen die aangebracht worden in de beperkingen zullen de lege rijen wel doen verdwijnen.

Gegevens afdrukken of exporteren

Gegevens afdrukken


Het afdrukken van de gegevens is mogelijk in het *Selectie venster* (zie pagina 40). Om de Selectie af te drukken kunt u

- de knop "Afdrukken" op de gereedschapsbalk indrukken ()
- het menu *Bestand/Afdrukken* kiezen, of
- op Ctrl-P drukken.

Het *Afdrukvoorbeeld venster* (zie pagina 27) verschijnt dan. Hier kunt u op de knop "Afdrukken" drukken om de Selectie op de huidige printer af te drukken of de knop "Instellen" gebruiken om het *Paginaopbouw venster* (zie pagina 37) op te roepen, waar u de paginaopbouw en de afdrukeenheid kunt wijzigen.

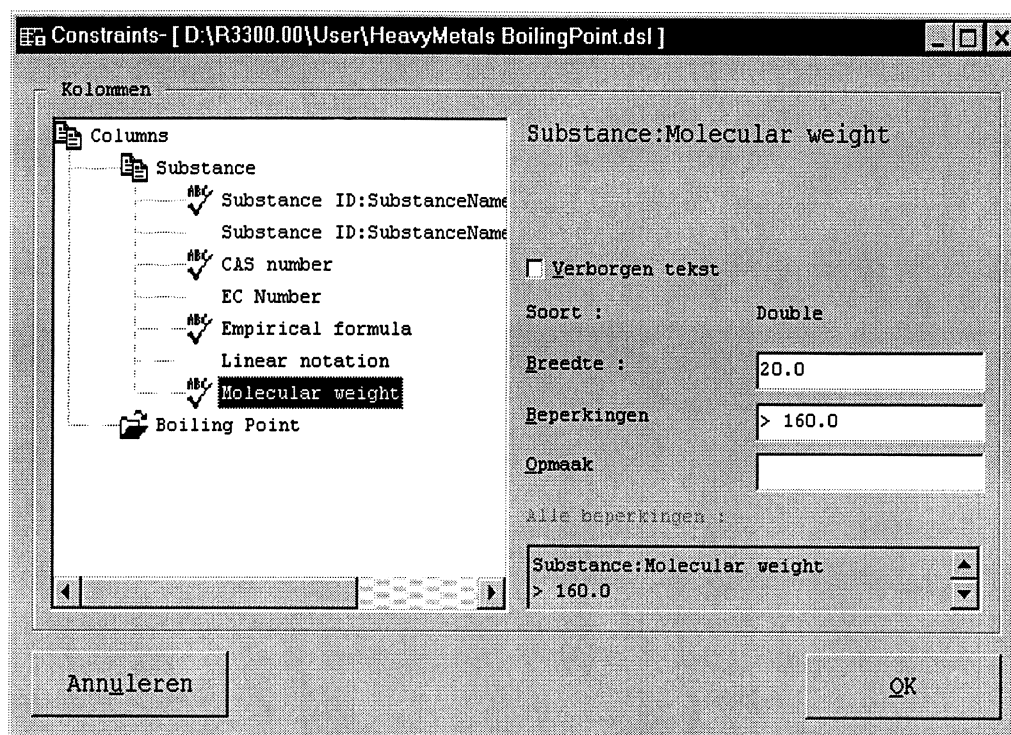
Gegevens exporteren

Export van de gegevens naar een CSV file, welk gelezen kan worden door Microsoft Excel® en andere spreadsheet programma's, is mogelijk van in het *Selectie venster* (zie pagina 40). Om de Selectie te exporteren kunt u

- op de knop "Exporteren" op de gereedschapsbalk drukken () of
- het menu *Bestand/Exporteren...* kiezen.

Het *Export dialoogvenster* (zie pagina 29) verschijnt. Daar kunt u de naam van het bestand waar u de gegevens naar toe wilt schrijven opgeven.

Beperkingen venster



Dit venster stelt u in staat beperkingen voor een Selectie op te geven. De Selectie waar u mee werkt wordt weergegeven in de titelbalk van het venster. Meer informatie over het zetten van beperkingen kunt u vinden in "*Beperkingen voor een kolom zetten (zie pagina 21)*", hoe u kolommen kunt verbergen of zichtbaar kunt maken, wordt uitgelegd in "*Kolommen tonen of verbergen (zie pagina 19)*".

De breedte wordt opgegeven in millimeters.

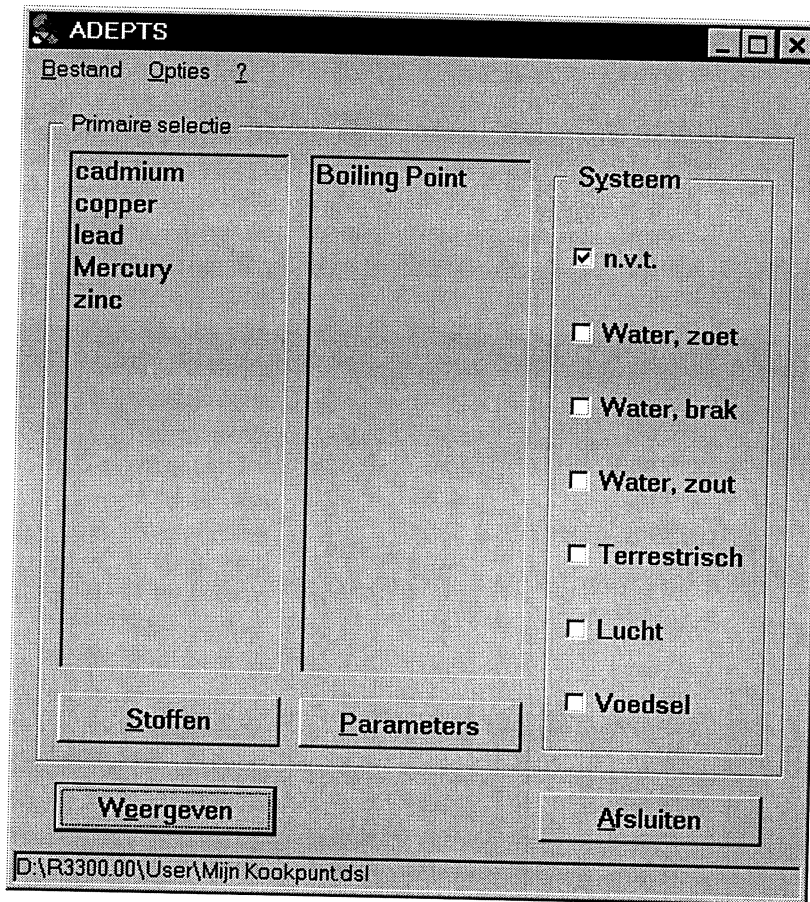
Beperkingen mogen tot 1000 tekens lang zijn.

In het opmaak veld kunt u een opmaakcode voor de kolom opgeven. Bijvoorbeeld code "0.00" zal numerieke waarden met twee cijfers achter de komma afbeelden (en zoveel tekens voor de komma als nodig). "<" zal tekstvelden met kleine letters laten zien en ">" zal tekstvelden met hoofdletters weergeven. Opmaakcodes voor de stof kolommen worden genegeerd. De opmaakcode mag maximaal twaalf tekens lang zijn.

Een momentje dialoog

Dit dialoog ziet u terwijl het programma gegevens uit de database ophaalt of informatie aan het verwerken is. De voortgangindicator laat zien welk deel van de taak volbracht is, terwijl het opschrift duidelijk maakt met welke taak het programma bezig is.

Hoofdvenster



In het Hoofdvenster heeft u een overzicht over de drie belangrijkste elementen van een Selectie: de stoffen, parameters en omgevingssystemen. De naam van de huidige Selectie wordt weergegeven in de status balk onderin het venster, terwijl de menu's het mogelijk maken bestanden te openen en op te slaan, opties in te stellen en toegang geven tot dit helpbestand.

Het venster heeft de volgende menu's

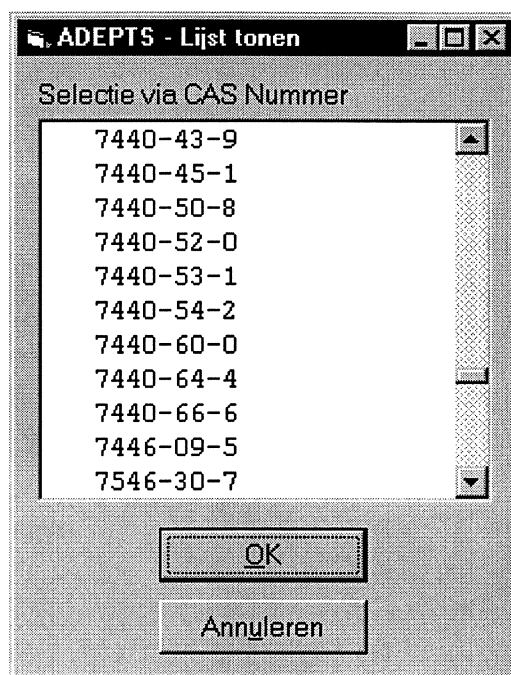
<u>B</u> estand	Nieuwe selectie		:	Open een nieuwe Selectie.	
	Selectie <u>o</u> penen		:	Open een bestaande Selectie (zie pagina 36) .	
	Selectie - opslaan		:	Bewaar de huidige Selectie.	
	Sla selectie op als ...		:	Bewaar de huidige Selectie in een nieuw bestand (zie pagina 39) .	
	Profiel <u>o</u> penen		:	Open een bestaand Profiel (zie pagina 35) .	
	Profiel opslaan		:	Bewaar het Profiel, waarbij de stoffen, parameters of systemen (zoals aangegeven in het menu Opties / Voorkeuren / Onbepaald in Profiel) worden weggelaten. De naam van het bestand is hetzelfde als de naam van de Selectie, waarbij de extensie wordt vervangen door .dpr.	
	Sla profiel op als ...		:	Bewaar het huidige Profiel (zie pagina 39) in een nieuw bestand.	
	<u>A</u> fsluiten		:	Beëindig de applicatie.	
	<u>O</u> pties	<u>V</u> oorkeuren	Onbepaald in Profiel	<u>S</u> toffen	:
<u>P</u> arameters				:	Laat de parameters weg uit het Profiel als een Selectie als zodanig wordt bewaard.
<u>S</u> ystemen				:	Laat de systemen weg uit het Profiel als een Selectie als zodanig wordt bewaard.
<u>T</u> aal		<u>E</u> nglish	:	Kies Engels als de taal voor de	

		gebruikersinterface.
	<u>N</u> ederlands	: Kies Nederlands als de taal voor de gebruikersinterface.
T <u>e</u> kengrootte	Extra <u>k</u> lein	: Gebruik een extra klein lettertype voor de gebruikersinterface.
	<u>K</u> lein	: Gebruik een klein lettertype voor de gebruikersinterface.
	<u>N</u> ormaal	: Gebruik een normaal lettertype voor de gebruikersinterface.
	<u>G</u> root	: Gebruik een groot lettertype voor de gebruikersinterface.
	Extra <u>g</u> root	: Gebruik een extra groot lettertype voor de gebruikersinterface.
<u>?</u>	Inh <u>o</u> uds- opgave	: Laat dit helpbestand zien.
	<u>Z</u> oeken	: Laat het tabblad Zoeken van dit helpbestand zien.
	<u>I</u> nfo over ADEPTS...	: Laat de Over ADEPTS dialoog (zie pagina 37) zien.

Menu's kunnen geselecteerd worden door op ze te klikken met de muisaanwijzer (met de linker knop), of door de Alt-toets en de toets voor de onderstreepte letter gezamenlijk in te drukken. Naast de menu's vindt u vier grote knoppen:

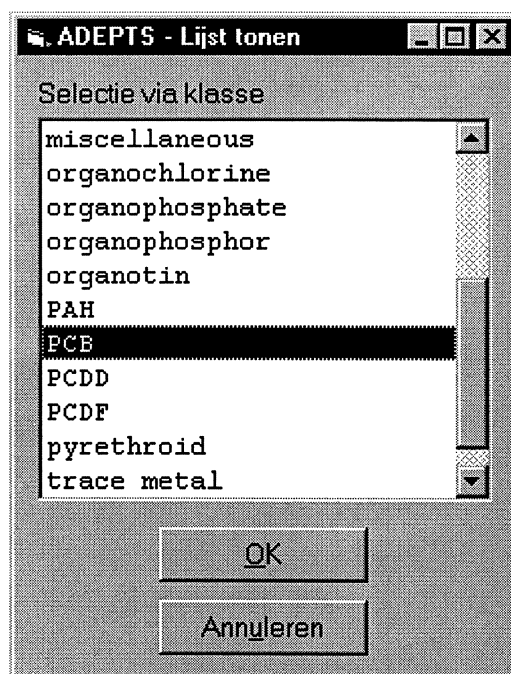
- **Stoffen** om stoffen aan de Selectie toe te voegen of om stoffen te verwijderen in het *Stoffen venster* (zie pagina 43).
- **Parameters** om parameters aan de Selectie toe te voegen of parameters te verwijderen in het *Parameters venster* (zie pagina 38).
- **Weergeven** om het *Selectie venster* (zie pagina 40) te laten zien.
- **Afsluiten** om de applicatie te beëindigen.

Lijst CAS nummers tonen



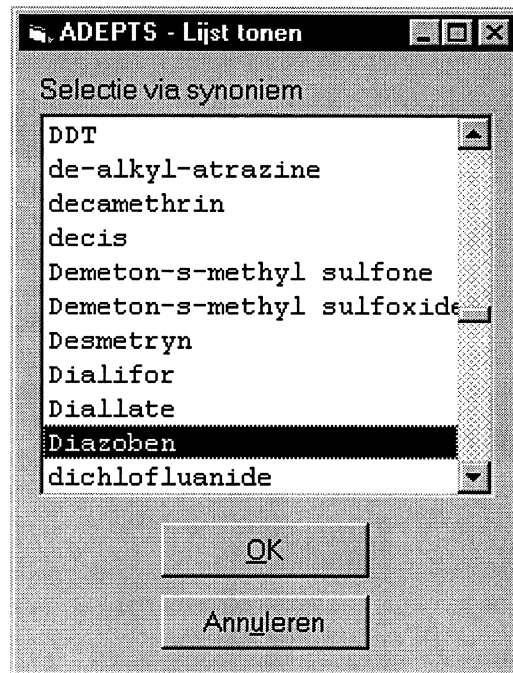
Dit dialoog laat alle CAS nummers zien die horen bij stoffen aan de gekozen kant van het *Stoffen venster* (zie pagina 43). De procedure waarin dit dialoog voorkomt wordt beschreven in "*Stoffen selecteren via CAS nummer* (zie pagina 15)".

Lijst klassen tonen



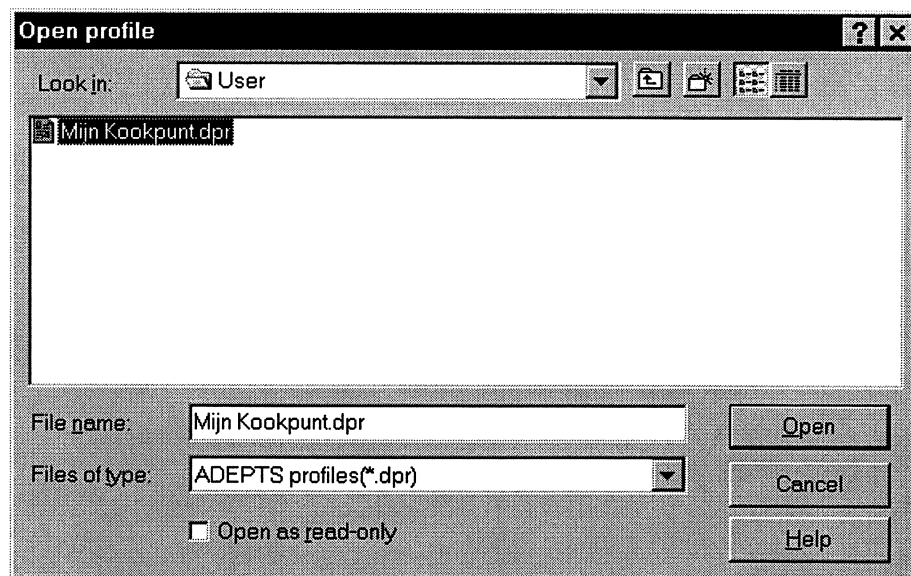
Dit dialoog laat alle klassen zien die horen bij stoffen aan de gekozen kant van het *Stoffen venster* (zie pagina 43). De procedure waarin dit dialoog voorkomt wordt beschreven in "*Stoffen selecteren via de klasse* (zie pagina 13)".

Lijst synoniemen tonen



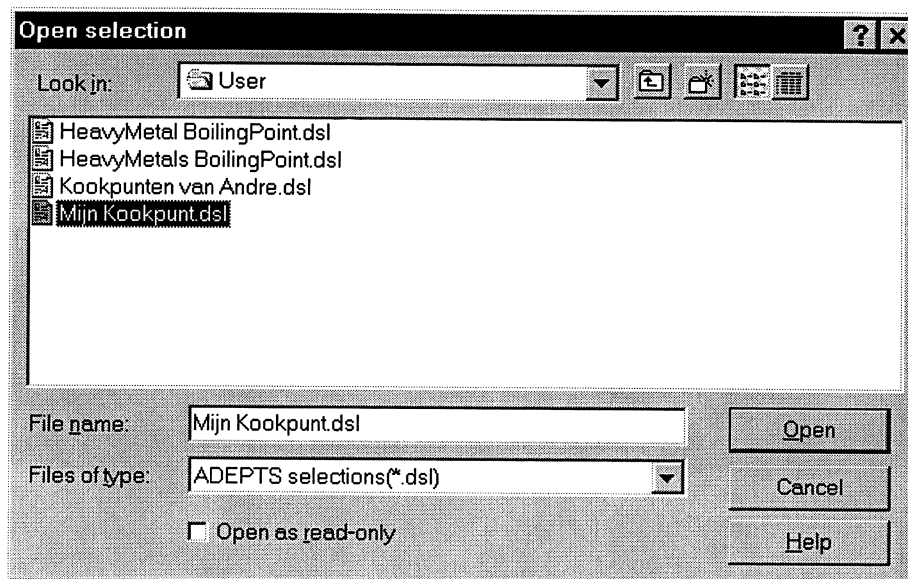
Dit dialoog laat alle synoniemen zien die horen bij stoffen aan de gekozen kant van het *Stoffen venster* (zie pagina 43). De procedure waarin dit dialoog voorkomt wordt beschreven in "*Stoffen selecteren via synoniem* (zie pagina 14)".

Open profiel dialoog



Dit dialoog vraagt u om de naam van een bestand met een Profiel. Profielbestanden hebben bij verstek de extensie `.dpr`, bestanden met andere extensie kunnen worden gevonden door het bestandstype 'Alle bestanden' te kiezen. De map waar dit dialoog begint te zoeken is de 'user folder' zoals die is opgegeven in het *ADEPTS ini bestand* (zie pagina 47).

Open selectie dialoog

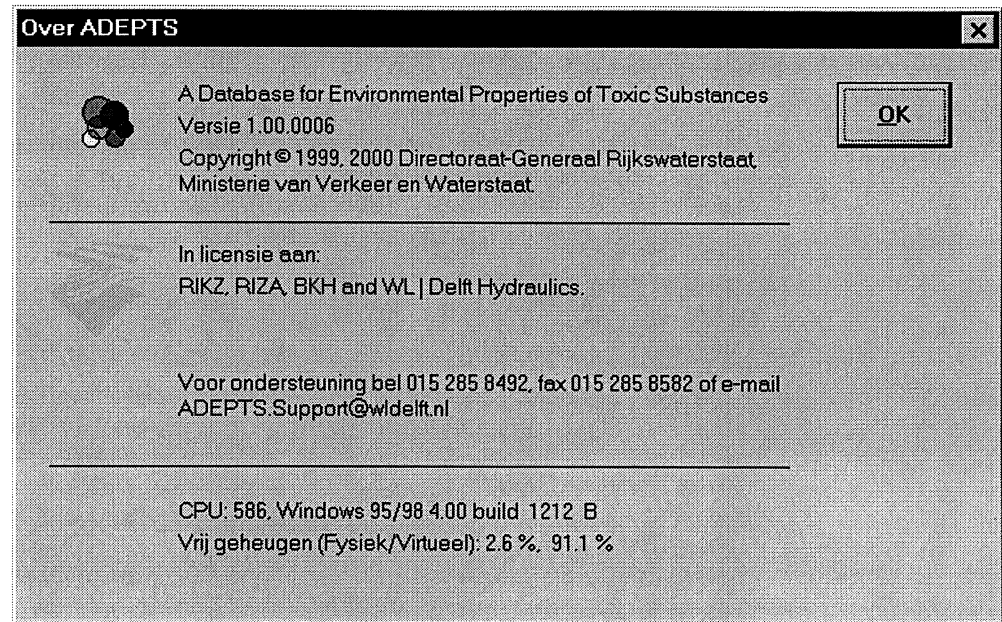


Dit dialoog vraagt u om de naam van een bestand met een Selectie. Selectiebestanden hebben bij verstek de extensie `.dsl`, bestanden met andere extensie kunnen worden gevonden door het bestandstype 'Alle bestanden' te kiezen. De map waar dit dialoog begint te zoeken is de 'user folder' zoals die is opgegeven in het ADEPTS ini bestand (zie pagina 47).

Openen ASCII import bestand dialoog

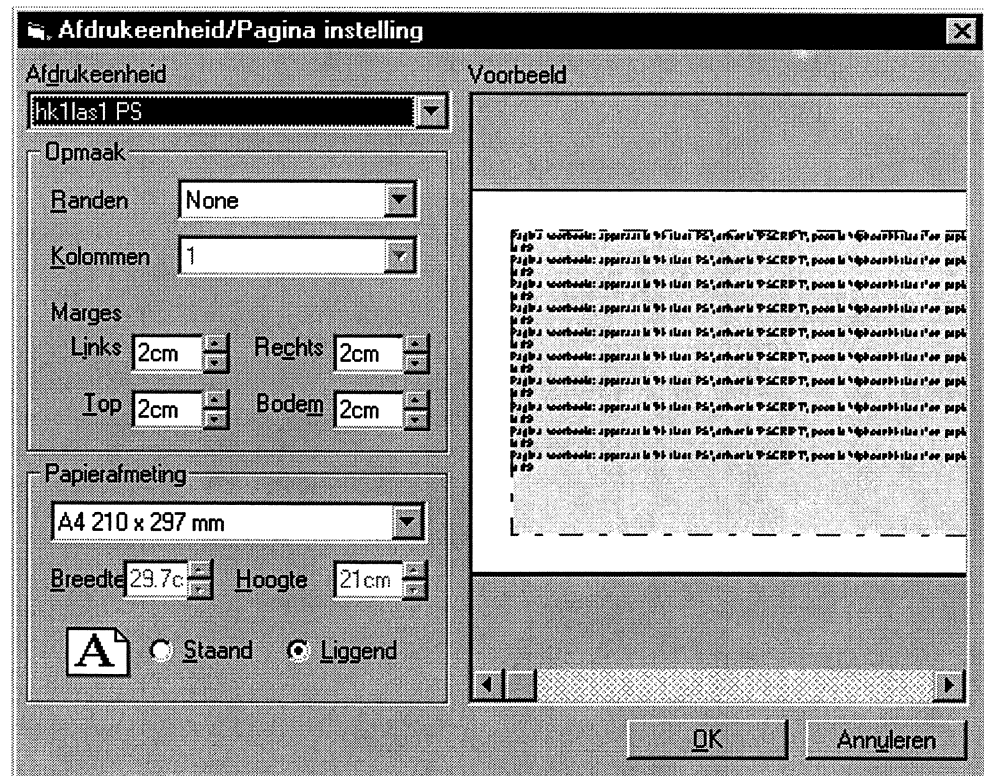
Dit is een normaal Windows 'bestand openen' dialoog, dat u vraagt om de naam van een ASCII bestand (tekstbestand) dat CAS nummers bevat. Nadat u op OK drukt, zal de applicatie dit bestand openen en in de linker lijst van het *Stoffen venster* (zie pagina 43) alle stoffen markeren die een CAS nummer hebben dat in het bestand voorkomt. Voor meer informatie zie: "CAS nummers importeren (zie pagina 17)".

Over ADEPTS dialoog



Dit dialoog wordt getoond bij het opstarten van het programma en na het kiezen van het menu *Over ADEPTS...* in het help (?) menu van het hoofdvenster of Selectie venster. Het toont niet alleen de gebruikte versie van het programma, wat belangrijk is als u problemen meldt, maar ook de versie en het bouwnummer van het Windows™ besturingssysteem.

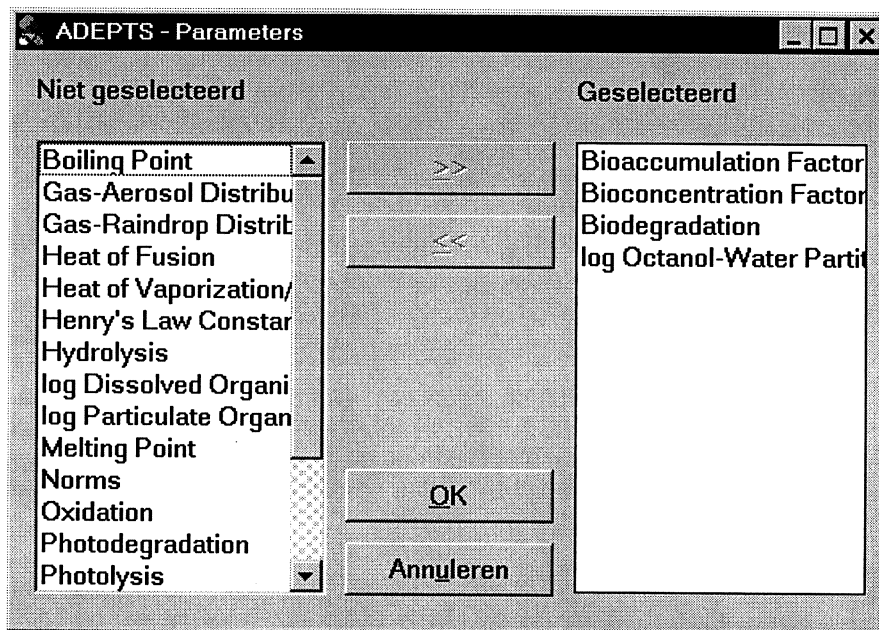
Paginaopbouw venster



In dit venster stelt u aan aantal zaken in die te maken hebben met het afdrucken, zoals de te gebruiken printer, de oriëntatie van het papier en de marges.

Parameter venster

Dit venster laat zien welke parameters gekozen kunnen worden. De lijst aan de linker kant van het venster toont alle parameters die **niet** in de Selectie (of het Profiel) opgenomen zijn, terwijl de lijst aan de rechter kant van het venster alle parameters laat zien die **wel** in de Selectie opgenomen zijn.



In elk van deze lijsten kunt u één of meer namen markeren.

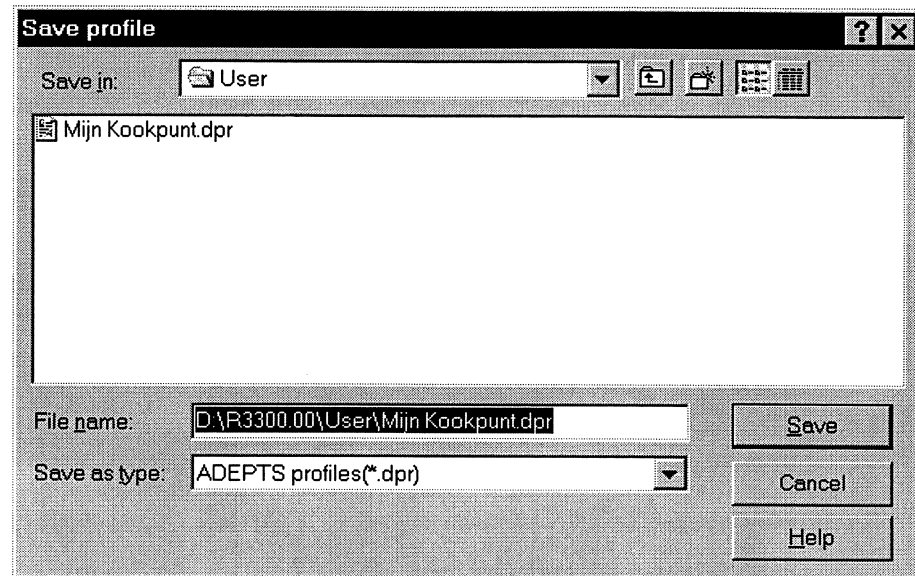
Door het indrukken van de knop met de pijlen naar rechts (>>, tussen de twee lijsten gesitueerd) worden alle gemarkeerde namen uit de linker lijst naar de rechter lijst overgebracht en worden dus opgenomen in de Selectie.

Door het indrukken van de knop met de pijlen naar links (<<) worden alle gemarkeerde namen uit de rechter lijst naar de linker lijst overgebracht en worden dus verwijderd uit de Selectie. Veranderingen aan de Selectie worden effectief zodra u op de knop "OK" drukt. Als u op de knop "Annuleren" drukt, gaat u terug naar het hoofdvenster en worden alle wijzigingen die u gedaan heeft nadat u het venster opende ongedaan gemaakt.

Door 'dubbel te klikken' op de naam van een parameter in één van de lijsten wordt de paragraaf voor de betreffende parameter uit dit helpbestand getoond. De *database administrateur* kan parameters toevoegen aan ADEPTS, deze komen echter niet in dit helpbestand voor. Hoe u parameters kan toevoegen wordt in een separate handleiding beschreven.

Zie ook: *Parameters selecteren* (zie pagina 17).

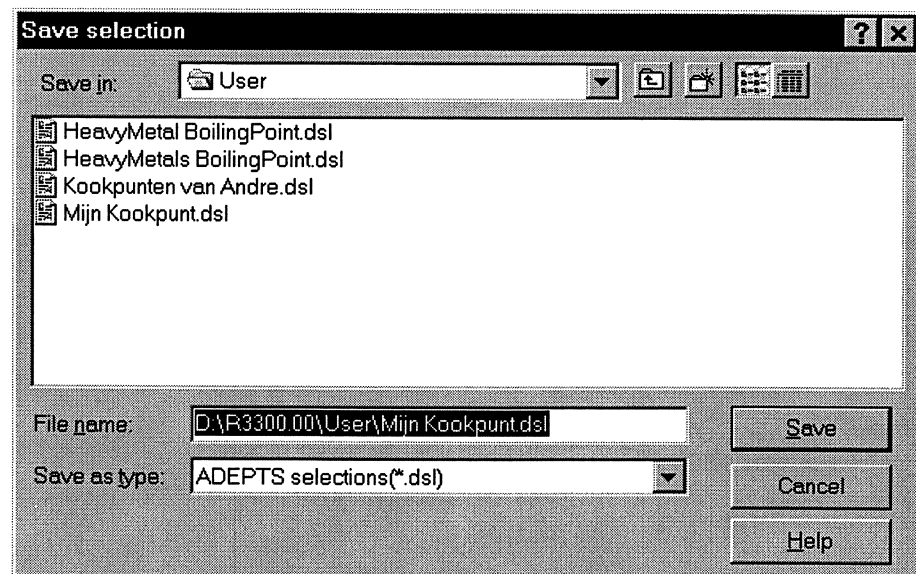
Profiel opslaan dialoog



Dit dialoog vraagt u om een nieuwe naam voor een bestand met een Profiel. Profielbestanden hebben bij verstek de extensie `.dpr`, bestanden met andere extensie kunnen worden bewaard door het bestandstype 'Alle bestanden' te kiezen. De map waar dit dialoog begint te zoeken is de 'user folder' zoals die is opgegeven in het *ADEPTS ini bestand* (zie pagina 47). Als u een Selectie als Profiel bewaard, wordt minstens één van de drie hoofdelementen weggelaten. Welk element wordt weggelaten, wordt bepaald door het menu *Opties / Voorkeuren / Onbepaald in Profiel* in het *hoofdvenster* (zie pagina 30). Te beginnen met Windows™ 95 kunt u lange bestandsnamen gebruiken, zodat het mogelijk is betekenisvolle namen voor de bestanden te kiezen.

Zie ook: *Selecties en Profielen* (zie pagina 7).

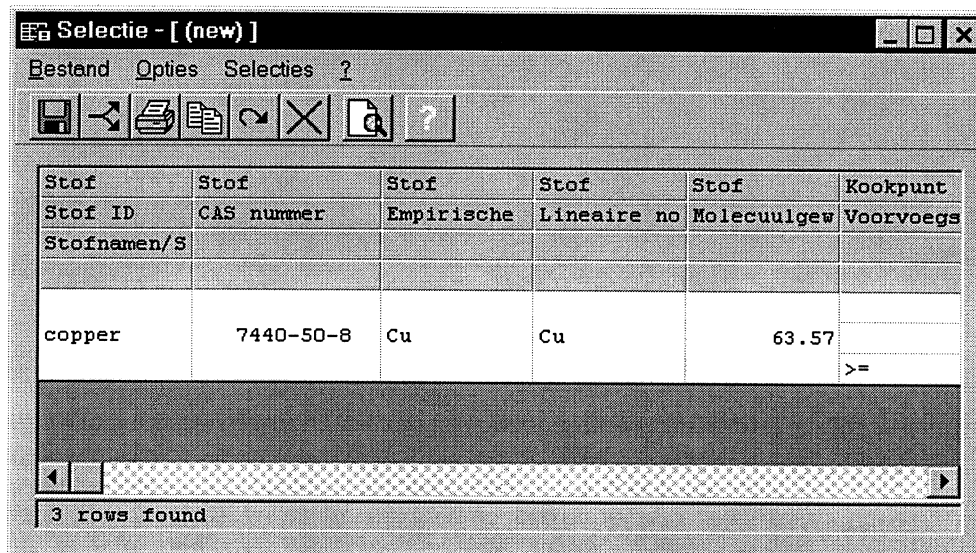
Selectie opslaan dialoog










Dit dialoog vraagt u om een nieuwe naam voor het bestand met de huidige Selectie. Selectiebestanden hebben bij verstek de extensie `.dsl`, bestanden met andere extensie kunnen worden bewaard door het bestandstype 'Alle bestanden' te kiezen.


De map waar dit dialoog begint te zoeken is de 'user folder' zoals die is opgegeven in het ADEPTS ini bestand (zie pagina 47). Te beginnen met Windows™ 95 kunt u lange bestandsnamen gebruiken, zodat het mogelijk is betekenisvolle namen voor de bestanden te kiezen.

Selectie venster



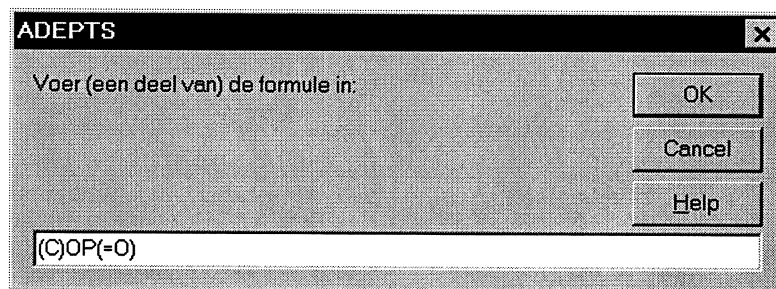
Dit venster toont een rooster met de Selectie. Het heeft de volgende menu's en een gereedschapsbalk met knoppen die populaire menu's versneld toegankelijk maken:

<u>B</u> estand	S <u>e</u> lectie opslaan  : Bewaar de huidige Selectie.	
	S <u>l</u> a selectie op als ... : Bewaar de huidige Selectie in een nieuw bestand (zie pagina 39) .	
	K <u>l</u> oon selectie  : Maak een kopie van de huidige Selectie.	
	<u>A</u> fdrukken  : Opent het Afdrukvoorbeeld venster. (zie pagina 27)	
	<u>E</u> xporter <u>e</u> n.  : Exporteer de huidige Selectie (zie pagina 25) naar een csv bestand.	
	<u>S</u> luiten  : Sluit het venster. Als de in het venster getoonde Selectie niet gelijk is aan de Selectie in het hoofdvenster, wordt aan u gevraagd of u de veranderingen wilt kwijtraken. U kunt door middel van de knop met de pijl er voor zorgen dat de Selectie in het hoofdvenster gelijk wordt aan de Selectie in dit venster, zodat veranderingen niet verloren gaan. 	
<u>O</u> pties	Gereed- schapsbalk zichtbaar : Maakt de gereedschapsbalk zichtbaar of onzichtbaar.	
	<u>T</u> aal	<u>E</u> nglish : Kies Engels als de taal voor de gebruikersinterface.
		<u>N</u> ederlands : Kies Nederlands als de taal voor de gebruikersinterface.
	<u>B</u> eperkingen  : Toon het Beperkingen venster (zie pagina 28) .	
	<u>K</u> olom opties	Sorteer <u>A</u> flopend : Sorteer de actieve kolom in aflopende volgorde.
		Sorteer <u>O</u> plopend : Sorteer de actieve kolom in oplopende volgorde.
<u>V</u> erberg : Verberg de actieve kolom.		
<u>S</u> electies	<u>T</u> raps <u>g</u> ewijs : Rangschik alle Selectie vensters door ze trapsgewijs op het scherm te plaatsen.	
	<u>N</u> aast elkaar : Rangschik alle Selectie vensters door ze niet overlappend op het scherm te plaatsen. Tot 5 vensters worden onder elkaar geplaatst, van 6 tot 8 vensters worden in twee kolommen naast en onder elkaar geplaatst, en 9 venster worden in 3 kolommen naast en onder elkaar geplaatst.	

		Naast elkaar plaatsen kan niet als meer dan 9 vensters actief zijn.
	<u>O</u> plijnen	: Twee of meer Selecties oplijnen. Zie: Selecties oplijnen (zie pagina 23) .
<u>?</u>	<u>I</u> nhouds- opgave	 : Laat dit helpbestand zien.
	<u>Z</u> oeken	: Laat het tabblad Zoeken van dit helpbestand zien.
	<u>I</u> nteractieve ADEPTS...	: Laat de Over ADEPTS dialoog (zie pagina 37) zien.

De kolommen kunnen gesorteerd en verborgen worden: door de rechtermuisknop in te drukken terwijl u naar een kolom wijst, komt een drijvend menu te voorschijn. Kolommen kunnen naar een nieuwe positie gesleept worden door de linkermuisknop in te drukken terwijl u naar één van de vier bovenste rijen wijst: de muisaanwijzer veranderd in een dubbele horizontale pijl en de kolom kan naar de gewenste positie gesleept worden door de muisknop ingedrukt te houden. Eenmaal op deze positie kunt u de muisknop loslaten.

SMILES deelwoord dialoog



Dit dialoog vraagt u om een deel van de lineaire formule (ook wel SMILES notatie genoemd). De procedure waarin dit dialoog voorkomt wordt beschreven in "*Stoffen selecteren via SMILES notatie (zie pagina 16)*". De gebruikte vergelijkingsmethode is gevoelig voor verschillen tussen hoofdletters en kleine letters (Zink in een stof wordt niet gevonden door hier "ZN" of "zn" op te geven, maar wel door "Zn" op te geven).

Stof informatie venster

Stof informatie - [ID 308]

Primaire naam :

Synoniemen :

Synoniemen	Soort na...
zinc dimethyldithiocarbamate	Chemical
(T-4)-bis(dimethyldithiocarbamato-S...	Chemical
ΔAnroterc	Trade na...

CAS Nummer : EC Nummer :

Klassen :

Empirische

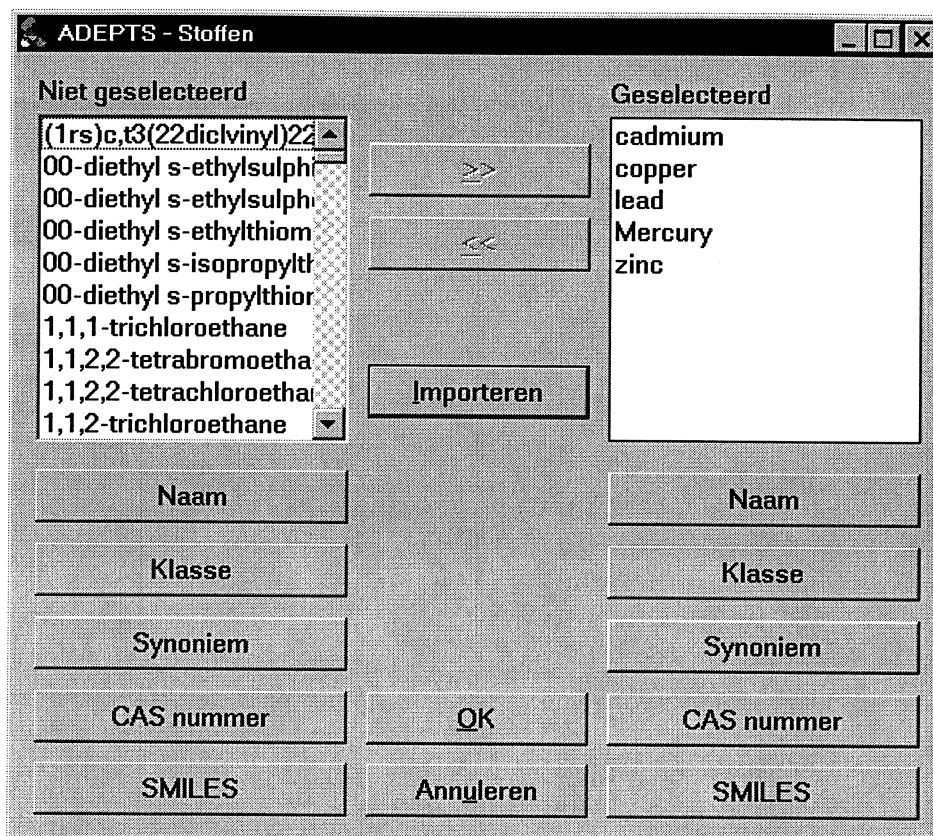
Molecuulgewicht

Lineaire notatie :

Dit venster laat alle bekende gegevens over een stof zien.

Stoffen venster

In dit venster worden twee lijsten getoond. De lijst aan de linkerkant van het venster bevat de primaire namen van alle stoffen die **geen** deel uitmaken van de Selectie (of Profiel), de lijst aan de rechterkant van het venster bevat de primaire namen van alle stoffen die **wel** deel uitmaken van de Selectie.



In elk van deze twee lijsten kunt u één of meer namen uitkiezen. Deze keuze kan plaatsvinden *direct uit de lijst* (zie pagina 11), *via de naam* (zie pagina 12), *via de klasse* (zie pagina 13), *via het synoniem* (zie pagina 14), *via het CAS nummer* (zie pagina 15) of *door middel van de SMILES notatie* (zie pagina 16). Al deze methoden markeren een aantal stoffen in de linker of rechter lijst. Door het *importeren van een tekstbestand* (zie pagina 17) met CAS nummers kan ook een aantal stoffen gemarkeerd worden, maar dit werkt uitsluitend op de linker lijst.

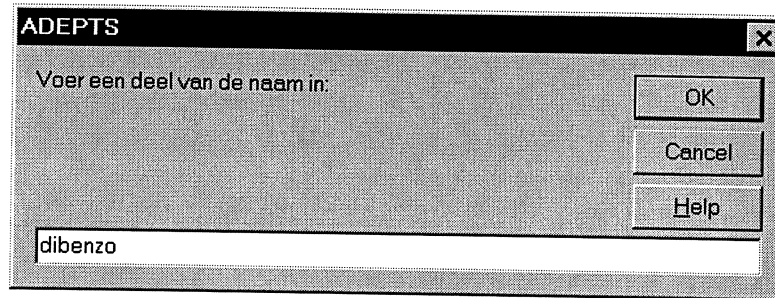
Door het indrukken van de knop met de pijlen naar rechts (>>, tussen de twee lijsten gesitueerd) worden alle gemarkeerde namen uit de linker lijst naar de rechter lijst overgebracht en worden dus opgenomen in de Selectie.

Door het indrukken van de knop met de pijlen naar links (<<) worden alle gemarkeerde namen uit de rechter lijst naar de linker lijst overgebracht en worden dus verwijderd uit de Selectie. Veranderingen aan de Selectie worden effectief zodra u op de knop "OK" drukt. Als u op de knop "Annuleren" drukt, gaat u terug naar het hoofdvenster en worden alle wijzigingen die u gedaan heeft nadat u het venster opende ongedaan gemaakt.

Door 'dubbel te klikken' op de naam van een stof in één van de lijsten wordt het *Stof informatie venster* (zie pagina 43) voor deze stof getoond.

Zie ook: *stoffen selecteren uit de lijst* (zie pagina 11).

Stofnaam dialoog



Dit dialoog vraagt om een deel van een stofnaam. De procedure waarin dit dialoog voorkomt, wordt beschreven in "Stoffen selecteren via de naam (zie pagina 12)".

Synoniem informatie venster

In dit venster kunt u de gegevens van een synoniem bewerken. Het is niet toegankelijk in deze versie van ADEPTS.

ADEPTS hulpbestanden

De ADEPTS ini bestanden

De ADEPTS applicatie gaat uit van een zogenoemd client/server model, en bestaat uit een aantal modules, die ieder een eigen bestand met initiële gegevens hebben. Voor de gebruiker is het initialisatiebestand van de gebruikersinterface, `ADEPTS.ini`, het belangrijkste. De module die gegevens uit de database leest (ADEPTSDC) gebruikt een eigen bestand: `ADEPTSDC.ini`.

ADEPTS.ini

Dit bestand vindt u in dezelfde map als het uitvoerbare bestand voor de gebruikersinterface. De plaats van deze map wordt bepaald tijdens de installatie. Als er geen andere keus gemaakt is tijdens de installatie, is dit `C:\Program Files\ADEPTS`. In dit bestand wordt algemene informatie bewaard, zoals de plaats van hulpbestanden en de naam van het *taalbestand* (zie pagina 49). Verder worden ook de voorkeuren van de gebruiker en plaats van vensters op het scherm in dit bestand opgeslagen. Het bevat de volgende ingangen:

Sectie	Sleutel	Type sleutel	Voorbeeld	Omschrijving
General	UserFolder	String	C:\Program Files\ADEPTS\User	De naam van de 'user folder', de map waar normaal Selecties en Profielen worden bewaard.
General	Language File	String	C:\Program Files\ADEPTS\ADEPTS.lng	De naam van het taalbestand, inclusief pad.
General	Language	Integer	1	Het nummer van de actieve taal.
General	Font	String	normal	De relatieve grootte van de gebruikte tekens.
Main-Window	Left	Single	10.0	De positie van de linkerzijde van het hoofdvenster als percentage van de afmeting van het scherm.
Main-Window	Top	Single	10.0	De positie van de bovenzijde van het hoofdvenster als percentage van de hoogte van het scherm.
Main-Window	Width	Single	60.0	De breedte van het hoofdvenster, als percentage van de breedte van het scherm.
Main-Window	Height	Single	80.0	De hoogte van het hoofdvenster als percentage van de hoogte van het scherm.
Main-Window	State	Integer	0	De staat van het hoofdvenster. Kan zijn 0 (normaal), 1 (gemini-maliseerd) of 2 (gemaxi-maliseerd)
Window	Left	Single	10.0	De positie van de linkerzijde van het venster Window als percentage van de afmeting van het scherm. Zie

MainWindow voor andere mogelijke sleutels.

ADEPTSDC.ini

Dit bestand bevindt zich in dezelfde map als het uitvoerbare bestand van de data-centrische module. Afhankelijk van de installatie is deze geïntegreerd met de gebruikersinterface of is dit een los bestand zijn dat draait op een aparte computer: de 'server'. Het wordt gebruikt om gegevens over de fysieke plaats van de database op te slaan. Het bevat de volgende sleutels:

Sectie	Sleutel	Type sleutel	Voorbeeld	Omschrijving
Data-base	Path	String	C:\Program Files\ADEPTS\ADEPTSDB.mdb	De naam van het database bestand, inclusief pad.

Het ADEPTS taalbestand

Dit bestand bevat de vertalingen voor de gebruikersinterface. Normaal is het aanwezig in dezelfde map als het uitvoerbare bestand voor de gebruikersinterface. De plaats van deze map wordt bepaald tijdens de installatie. Als er geen andere keus gemaakt is tijdens de installatie, is dit C:\Program Files\ADEPTS. Dit bestand bevat vertalingen in maximaal vier actieve talen, die dan tijdens de uitvoering van het programma gekozen kunnen worden van het taal menu in het *hoofdvenster* (zie pagina 30) of het *Selectie venster* (zie pagina 40). Het bestand kan bewerkt worden met de **WL | Delft Hydraulics** applicatie EditLang, onderdeel van de Delft Tools.

Zie ook: *De ADEPTS INI bestanden* (zie pagina 47).

Parameters

Bioaccumulatie Factor

De verhouding van de concentratie van een stof zoals die is opgenomen uit water en voedsel in een organisme en de opgeloste concentratie in water na een zeker tijdsverloop. Deze verhouding wordt gebruikt in bioaccumulatiemodellen en ecotoxicologische effect modellen.

Eenheid: liters per kilogram [l/kg]

Zie ook: *Bioconcentratie Factor* (zie pagina 51)

Bioconcentratie Factor

De verhouding van de concentratie van een stof zoals die **direct** is opgenomen uit water in een organisme en de opgeloste concentratie in water na een zeker tijdsverloop. Deze verhouding wordt gebruikt in bioaccumulatiemodellen en ecotoxicologische effect modellen.

Eenheid: liters per kilogram [l/kg]

Zie ook: *Bioaccumulatie Factor* (zie pagina 51)

Biodegradatie

Een set parameters om het afbraakproces in water te definiëren en kwantificeren voor enzymatische afbraak door micro-organismen. Belangrijkste karakteristiek is de schijnbare halfwaardetijd van een stof, de tijd die nodig is om 50% van de massa van een stof af te breken bij een gegeven temperatuur. Direct hieraan gerelateerd is de eerste orde biodegradatie snelheid ($k = \ln(2)/t_{50\%}$), die gebruikt wordt in modellen.

Eenheid: per dag [/d]

Constante Wet van Henry

De evenwichtsverhouding tussen de dampdruk en de concentratie in water bij een gegeven temperatuur. Deze constante wordt gebruikt in modellen, of direct bij een bepaalde omgevingstemperatuur, of gecorrigeerd voor temperatuur. Voor dit laatste is een temperatuur coëfficiënt nodig.

Eenheid: Pascal.kubieke meter per mol [Pa.m³/mol]

Dampdruk

De druk die uitgeoefend wordt als een vaste stof of vloeistof in evenwicht is met zijn gasvormige fase bij een gegeven temperatuur.

Eenheid: Pascal [Pa]

Fotodegradatie

Een set parameters om het proces van fotolyse in lucht, de decompositie van een stof door middel van een reactie fotonen, te definiëren en kwantificeren. Belangrijkste karakteristiek is de schijnbare halfwaardetijd, de tijd die nodig is om 50% van de massa van de stof om te zetten. De tweede orde reactiesnelheid kan hiervan worden afgeleid door gebruik te maken van de lichtintensiteit, de quantum opbrengst en de moleculaire licht adsorptie, grootheden die in modellen worden gebruikt.

Eenheid (quantum opbrengst): [mol/E]

Fotolyse

Een set parameters om het proces van (directe) fotolyse in water, de decompositie van een stof door middel van een reactie fotonen, te definiëren en kwantificeren. Belangrijkste karakteristiek is de schijnbare halfwaardetijd, de tijd die nodig is om 50% van de massa van de stof om te zetten. De tweede orde reactiesnelheid kan hiervan worden afgeleid door gebruik te maken van de lichtintensiteit, de quantum opbrengst en de moleculaire licht adsorptie, grootheden die in modellen worden gebruikt.

Eenheid (quantum opbrengst): [mol/E]

Gas-Aerosol verdelingscoefficient

De evenwichtsverhouding tussen de concentraties van een stof in (atmosferisch) gas en aerosolen bij een gegeven temperatuur. Deze verhouding wordt gebruikt in modellen.

Eenheid: -

Gas-Regendruppel verdelingscoefficient

De evenwichtsverhouding tussen de concentraties van een stof in (atmosferisch) gas en regendruppels bij een gegeven temperatuur. Deze verhouding wordt gebruikt in modellen.

Eenheid: -

Gesuspendeerd Materiaal partitiec coefficient

De k_d , de evenwichtsverhouding van de concentratie in gesuspendeerd materiaal en de opgeloste concentratie van een stof in een mengsel van gesuspendeerd materiaal en water. Deze coëfficiënt wordt gebruikt in modellen, vnl. voor anorganische stoffen (bijv. zware metalen).

Eenheid: liters per kilogram [l/kg]

Giftigheid

De giftigheid van een stof voor een organisme of groep organismen.

Eenheid: hangt af van omgevingsysteem.

Hydrolyse

Een set parameters om het afbraakproces in water te definiëren en kwantificeren voor hydrolyse. Belangrijkste karakteristiek is de schijnbare halfwaardetijd van een stof, de tijd die nodig is om 50% van de massa van een stof af te breken bij een gegeven temperatuur. De parameter kan afgeleid worden van de tweede-orde zure hydrolyse snelheid, de tweede-orde basische hydrolyse snelheid en de eerste-orde neutrale hydrolyse snelheid en de pH. Deze parameters worden gebruikt in modellen.

Eenheid: k-zuur liters per mol per dag [l/mol/d]

k-basisch liters per mol per dag [l/mol/d]

k-neut per dag [/d]

Kookpunt

De temperatuur waarop een stof bij gegeven druk kookt.

Eenheid: Graden Celsius [C]

log Octanol-Water partitiec coefficient

De logaritme (basis 10) van de octanol-water verdelingscoëfficiënt, de verhouding tussen de evenwichtsconcentraties van een organische stof in een octanol-water mengsel.

Eenheid: -

log Opgelost Organisch Materiaal partitiec coefficient

De log k_{DOC} , de evenwichtsverhouding tussen de opgeloste concentratie in opgelost organisch materiaal (DOC) en de opgeloste concentratie in water. Deze coëfficiënt of zijn verhouding met K_{poc} ($= X_{doc}$) wordt gebruikt in modellen.

Eenheid: -

log Particulair Organisch Materiaal partitiec coefficient

De log k_{POC} , de evenwichtsverhouding tussen de opgeloste concentratie in particulier organisch materiaal (POC) en de opgeloste concentratie in water. Deze coëfficiënt wordt gebruikt in modellen en kan met simpele lineaire relaties afgeleid worden uit K_{ow} .

Eenheid: -

Normen

Normen en risicoformuleringen voor een stof.

Eenheid: hangt af van norm.

Oplosbaarheid

De concentratie van een stof in water in een evenwicht met een overmaat van deze stof bij een gegeven temperatuur. Deze constante wordt gebruikt in QSAR's, bijvoorbeeld om de constante in de Wet van Henry te voorspellen.

Eenheid: gram per kubieke meter [g/m³]

Oxydatie

Een set parameters om het oxydatieproces in water, de decompositie van een stof door middel van een reactie met zuurstof of zuurstofhoudende componenten, te definiëren en kwantificeren. Belangrijkste karakteristiek is de eerste orde oxydatiesnelheid bij een gegeven temperatuur, die gebruikt wordt in modellen.

Eenheid: liters per mol per dag [l/mol/d]

pKa

De negatieve logaritme (basis 10) van de zure ionisatie (evenwichts)constante van een stof in water. Deze constante wordt gebruikt in modellen.

Eenheid: -

Smeltpunt

De temperatuur waarbij een stof smelt.

Eenheid: Graden Celsius. [C]

Smeltwarmte

De energie benodigd voor het smelten van een stof bij een gegeven druk.

Eenheid: kilojoules per mol [kJ/mol]

Verdampings- of sublimatiewarmte

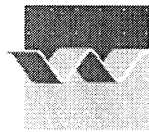
De energie benodigd voor het verdampen/sublimeren van een stof bij een gegeven druk.

Eenheid: kilojoules per mol [kJ/mol]

Problemen oplossen

Ondersteuning

Voor alle vragen over het gebruik van deze versie van ADEPTS kunt u contact opnemen met de ADEPTS helpdesk:



WL | Delft Hydraulics,
ADEPTS helpdesk
t.a.v. André Hendriks

Postbus 177
2600 MH Delft
Nederland

Telefoon: +31 15 285 8492
Telefax: +31 15 285 8582
E-mail: Adepts.support@wldelft.nl

ADEPTS run-time fouten overzicht

Tijdens het draaien van ADEPTS kan een aantal fouten optreden. De meest gangbare fouten zijn in dit helpbestand beschreven, samen met uitleg over de oorzaken en mogelijke oplossingen. Als u met behulp van die beschrijving de fout niet kunt verhelpen, wordt u verzocht contact op te nemen met *WL | Delft Hydraulics* (zie pagina 57).

Mogelijke fouten zijn:

- *Geen gegevens voor combinatie* (zie pagina 58).
- *Veld kan niet verborgen zijn* (zie pagina 58).
- *Foute beperking: ongeldig* (zie pagina 58).
- *Foute beperking: (alfa)numeriek* (zie pagina 58).
- *Geen stoffen voldoen aan de beperkingen.*
- *Initialisatiefouten* (zie pagina 58).

Geen gegevens voor combinatie

Soms zijn er geen gegevens voor een combinatie van *parameter* en *omgevingssysteem* omdat de parameter niet is gedefinieerd voor alle beschikbare systemen. Bijvoorbeeld, als u alleen het Omgevingssysteem **Lucht** en de Parameter **Giftigheid** selecteert, krijgt u deze melding, omdat er geen gegevens in de database zijn opgenomen voor giftigheid in lucht.

Veld kan niet verborgen zijn

Dit veld definieert de stof en kan daarom niet verborgen worden. Er kunnen daarom ook geen beperkingen voor dit veld worden opgegeven. Als u wilt veranderen welke stoffen onderdeel zijn van de Selectie, moet u teruggaan naar het *hoofdvenster* (zie *pagina 30*) en van daar uit verder naar het *Stoffen venster* (zie *pagina 43*), waar u kunt veranderen welke stoffen onderdeel zijn van de Selectie.

Foute beperking: ongeldig

De database engine heeft een ongeldige beperking gedetecteerd. Controleer of de beperking een geldige SQL-achtige WHERE clause is voor het type veld. Zie "*Beperkingen voor een kolom zetten* (zie *pagina 21*)" voor voorbeelden van geldige beperkingen.

Foute beperking: (alfa)numeriek

De database engine heeft een ongeldige beperking gedetecteerd. Vermoedelijk heeft u een alfanumerieke beperking opgegeven voor een numeriek veld, of andersom.

Initialisatiefouten

Tijdens de initialisatie kan een aantal fouten optreden. In het algemeen is dit het gevolg van een onjuiste installatie, waardoor ongeldige initialisatie bestanden zijn aangemaakt en/of van communicatieproblemen tussen de *client* (gebruikersinterface) en de *server* (database). De meest frequente fouten en hun oorzaken worden beschreven in dit helpbestand, indien u met behulp van deze informatie geen oplossing kunt vinden, wordt u verzocht contact op te nemen met *WL | Delft Hydraulics* (zie *pagina 57*).

Zie ook : *De ADEPTS INI bestanden* (zie *pagina 47*)

Fout: INI bestand niet gevonden (zie *pagina 59*)

Fout: database bestand niet gevonden (zie *pagina 59*)

Fout: werkgroep bestand niet gevonden (zie *pagina 59*)

Fout: database fout (zie *pagina 59*)

Fout: ongeldig account (zie *pagina 59*)

Fout: ini bestand niet gevonden

Deze fout treedt op als het gedeelte van de applicatie dat uit de database leest het initialisatie bestand `ADEPTSDC.ini` niet kan vinden. Zorg ervoor dat dit bestand in de juiste map aanwezig is.

Zie ook: *De ADEPTS INI bestanden (zie pagina 47)*

Initialisatiefouten (zie pagina 58)

Fout: database bestand niet gevonden

Deze fout treedt op als het gedeelte van de applicatie dat uit de database leest de naam van de database niet kan vinden in het initialisatiebestand `ADEPTSDC.ini` of als deze naam niet goed is. Zorg ervoor dat de sleutel `Path` in de sectie `Database` goed is. Uw *database administrator* moet in staat zijn u het goede pad naar de database te vertellen.

Zie ook: *Initialisatiefouten (zie pagina 58)*

Fout: werkgroep bestand niet gevonden

Deze fout treedt op als het werkgroep bestand `system.mdw` niet gevonden kan worden. Dit bestand bevat informatie over gebruikers van de database en hun permissies, en is normaal gesproken aanwezig in dezelfde map als het database bestand. Het bestand wordt in een afzonderlijke gebruikershandleiding beschreven. Deze is in bezit van uw *database administrator*.

Zie ook: *Initialisatiefouten (zie pagina 58)*

Fout: database fout

Deze fout treedt op als zich een probleem voordoet bij het lezen van het werkgroep bestand `system.mdw`. Dit bestand kan niet gevonden kan worden of bevat verkeerde informatie over gebruikers van de database en hun permissies. Het bestand is normaal gesproken aanwezig in dezelfde map als het database bestand. Het bestand wordt in een afzonderlijke gebruikershandleiding beschreven. Deze is in bezit van uw *database administrator*.

Zie ook: *Initialisatiefouten (zie pagina 58)*

Fout: ongeldig account

Deze fout treedt op als het werkgroep bestand `system.mdw` verkeerde informatie bevat over gebruikers van de database en hun permissies. Het bestand wordt in een afzonderlijke gebruikershandleiding beschreven. Deze is in bezit van uw *database administrator*.

Zie ook: *Initialisatiefouten (zie pagina 58)*

Index

—A—

ADEPTS run-time fouten overzicht, 57
Afdrukvoorbeeld venster, 27

—B—

Beperkingen venster, 28
Beperkingen voor een kolom zetten, 21
Bioaccumulatie Factor, 51
Bioconcentratie Factor, 51
Biodegradatie, 51

—C—

Compartimenten selecteren, 18
Constante Wet van Henry, 51

—D—

Dampdruk, 52
De ADEPTS ini bestanden, 47
De hoeveelheid getoonde data beperken, 19

—E—

Een momentje dialoog, 28
EnvSystem, 18
Export dialoog, 29

—F—

Fotodegradatie, 52
Fotolyse, 52
Fout
 database fout, 59
 ini bestand niet gevonden, 59
 MDB bestand niet gevonden, 59
 ongeldig account, 59
 werkgroep bestand niet gevonden, 59
Foute beperking
 (alfa)numeriek, 58
 ongeldig, 58

—G—

Gas-Aerosol Distributie Coëfficiënt, 52
Gas-Regendruppel Distributie Coëfficiënt, 52
Geen gegevens voor combinatie, 58
Gegevens afdrukken, 25
Gegevens exporteren, 25
Gesuspendeerd Materiaal partiticoëfficiënt, 53
Giftigheid, 53

—H—

Henry, Wet van, 51
Het ADEPTS taalbestand, 49

Hoofdvenster, 30
Hydrolyse, 53

—I—

Importeren CAS nummers, 17
Initialisatiefouten, 58
Installatie, 9
Introductie, 7

—K—

Kolommen tonen of verbergen, 19
Kookpunt, 53

—L—

Lijst CAS nummers tonen, 33
Lijst mogelijke waarden tonen, 34
Lijst oplijnen tonen, 34
Lijst synoniemen tonen, 35
Lineaire notatie, 16
log Octanol-Water partiticoëfficiënt, 53
log Opgelost Organisch Materiaal partiticoëfficiënt, 54
log Particulair Organisch Materiaal partiticoëfficiënt, 54

—N—

Normen, 54

—O—

Omgevingssysteem, 18
Ondersteuning, 57
Open profiel dialoog, 35
Open selectie dialoog, 36
Openen ASCII import bestand dialoog, 36
Oplosbaarheid, 54
Over ADEPTS dialoog, 37
Oxydatie, 54

—P—

Paginaopbouw venster, 37
Parameter venster, 38
Parameters selecteren, 17
pKa, 54
Profiel opslaan dialoog, 39

—S—

Selectie opslaan dialoog, 39
Selectie venster, 40
Selecties en Profielen, 7
Selecties oplijnen, 23
Smeltpunt, 55

Smeltwarmte, 55
SMILES deelwoord dialoog, 42
Stof informatie venster, 43
Stoffen selecteren, 11
Stoffen selecteren uit de lijst, 11
Stoffen selecteren via CAS nummer, 15
Stoffen selecteren via de klasse, 13
Stoffen selecteren via de naam, 12
Stoffen selecteren via SMILES, 16
Stoffen selecteren via synoniem, 14

Stoffen venster, 43
Stofnaam dialoog, 45
Sublimatiewarmte, 55
Synoniem informatie venster, 45

—V—

Veld kan niet verborgen zijn, 58
Verdampingswarmte, 55



• Delft

Widelft - Waterlaboratorium | w.l.

Rotterdamseweg 185
postbus 177
2600 MH Delft
telefoon 015 285 85 85
telefax 015 285 85 82
telex 38176 hydel-nl
e-mail info@widelft.nl
internet www.widelft.nl

