



Bijlage K: Vraagspecificatie HR en LR data science

Project: HR en LR data science
Zaaknummer: 31178877

Datum 09-05-2022



Rijkswaterstaat
Ministerie van Infrastructuur en Waterstaat



Colofon

Uitgegeven door	Ministerie van Infrastructuur en Waterstaat Rijkswaterstaat Water verkeer en Leefomgeving
Datum	9 mei 2022
Status	Definitief
Versienummer	0.5

Deze vraagspecificatie is gebaseerd op het standaardformat vraagspecificatie WVL versie 2.0



Inhoud

1	Inleiding	5
1.1	Identificatie	5
1.2	Het programma/project	5
1.2.1	Beschrijving programma/project	5
1.2.2	Doelstelling programma/project	7
1.3	De opdracht	7
1.3.1	Achtergrond van de opdracht	7
1.3.2	Opdrachtbeschrijving op hoofdlijnen	8
1.3.3	Doel van de opdracht(en)	9
1.4	Leeswijzer	10
2	Opdrachtoomschrijving	11
2.1	Beschrijving van de opdracht	11
2.2	Indeling van de opdracht in onderdelen/werkpakketten	11
2.3	Beschrijving resultaat van de opdracht	12
3	Te leveren diensten en/of producten	14
3.1.1	Dienst en producten naar analogie van de tekst in 2.3 – werkpakket	114
3.1.2	Dienst en producten naar analogie van de tekst in 2.3 – werkpakket	214
3.1.3	Tussen- en/ eindrapport	15
3.1.4	Becomentariëring van de producten	16
4	Projectmanagement	17
4.1	Interactie tussen Opdrachtgever en Opdrachtnemer	17
4.1.1	Geplande overlegmomenten	17
4.1.2	Geplande startbespreking	17
4.1.3	Opstellen voortgangsrapportage	18
4.1.4	Verslaglegging	18
5	Kwaliteitsmanagement	20
5.1	Toepassen kwaliteitsmanagement	20
5.1.1	Het identificeren en registeren van afwijkingen	20
5.1.2	Opstellen plan van aanpak	20
6	Projectbeheersing	22
6.1	Planning	22
6.1.1	Opstellen van een planning	22
6.2	Betaling	22
6.3	Risicomanagement	23
6.3.1	Opstellen risicoregister	23
7	Veiligheid	25
	Bijlage 1: Overzicht gevraagde producten	26
	Bijlage 2 Verstreckte en te verstrekken Informatie	27
	Bijlage 3 Schymanski levels	28



1 Inleiding

1.1 Identificatie

Deze vraagspecificatie beschrijft de opdracht, bestaande uit de uit te voeren werkzaamheden, diensten en/of te leveren producten. Deze vraagspecificatie is als bijlage K opgenomen bij de aanbestedingsleidraad.

1.2 Het programma/project

1.2.1 *Beschrijving programma/project*

In 2020 heeft I&W (DGWB¹) Rijkswaterstaat de opdracht te geven een werkwijze op te laten stellen voor een data-analyse op regulier ingewonnen data-bestanden. Deze data-bestanden worden regulier binnen het chemisch meetnet (MWTL²) ingewonnen. De gevraagde data-analyse heeft betrekking op zowel data-bestanden met lage resolutie (GCMS) als hoge resolutie (LCMS).

Naast deze inhoudelijke werkzaamheden zijn er ook werkzaamheden uitgevoerd op het gebied van het verkrijgen van een gezamenlijk beeld over toepassing van de zgn. non-target data-analyse in (toekomstige) chemische monitoring en in een bredere context.

Deze werkzaamheden, zowel dus inhoudelijk als organisatorisch van aard, krijgen een vervolg in 2022 (en 2023). Ook hiervoor heeft de beleidsdirectie van I&W (DGWB) Rijkswaterstaat opdracht gegeven.

In 2022 worden de producten die in een eerder stadium zijn opgeleverd, de 'proof of concepts', verder gebruikt. Er worden meerdere data-bestanden aangeboden. Daarnaast zal (organisatorisch spoor) moeten worden gewerkt aan (i.) een procesbeschrijving waarin beschreven wordt hoe zulke data-analyses in de toekomst worden gebruikt. Ook zal beschreven worden (ii.) op welke wijze dit soort data-analyses onderdeel van het toekomstige chemisch meetnet kunnen worden. Een (iii.) stakeholders analyse en (iv.) een document waarbij het handelingsperspectief wordt geschetst behoren ook tot de producten van huidige opdracht.

Resultaten van de werkzaamheden zijn van groot belang voor RWS. Het chemisch meetnet zal worden aangepast. Dit zal leiden tot een andere kostenverdeling, wellicht worden er minder kosten gemaakt. Ook zullen de werkzaamheden leiden tot een beter inzicht in de kwaliteit van het hoofdwatersysteem (HWS). RWS is de waterbeheerder van het HWS. Daarnaast levert RWS (WVL) veel beleidsadviezen af aan de beleidsdirectie van I&W (DGWB). De resultaten van de werkzaamheden kunnen mogelijk leiden tot betere maatregelen om verontreinigingen te voorkomen, of op te ruimen. In ieder geval geven de resultaten meer zicht op de overige in het

¹ I&W, DGWB staat voor Ministerie van Infrastructuur en Waterstaat, Directoraat Generaal Water en Bodem.

² MWTL staat voor Monitoring van de Waterstaatkundige Toestand des Lands, zie ook:

<https://www.helpdeskwater.nl/onderwerpen/monitoring/chemie/>.

9 mei 2022

aquatisch watersysteem aanwezige stoffen. RWS analyseert ongeveer 0,2% van de aanwezige stoffen in het water op reguliere basis.

De afgelopen jaren is veel werk verzet op het gebied van zgn. screening-onderzoeken bij verschillende laboratoria. Internationaal worden resultaten en methodes geëvalueerd binnen het NORMAN project. Hierbij is een uitgebreid netwerk ontstaan van (inter)nationale instituten, onderzoeksinstituten en laboratoria die kennis delen wat betreft het uitvoeren van screenings.

Op nationaal niveau worden werkzaamheden met betrekking tot opkomende stoffen behandeld in de werkgroep Aanpak Opkomende Stoffen (WG AOS). Deze werkgroep zal ook een belangrijke rol vervullen tijdens het huidige project.

Zoals reeds gemeld heeft RWS in 2021 de opdracht gekregen van I&W om het project 'HRMS en data science ontwikkeltraject'³ uit te gaan voeren. Met dat project is in 2021 een start gemaakt. Een data analyse is uitgevoerd op data-bestanden die oorspronkelijk afkomstig zijn vanuit regulier ingewonnen gegevens. Uiteindelijk ging het zowel om bestanden die na analyse via hoge resolutie (HRMS) zijn verzameld en bestanden die na analyse via lage resolutie (LRMS) zijn verzameld. Er is een tweetal protocollen (PoC's) opgesteld om LRMS en HRMS bestanden te analyseren.

Bij de werkzaamheden in 2022 moet gebruik gemaakt worden van de opgeleverde resultaten in 2021⁴. Met de opgestelde protocollen zullen in 2022 (en 2023) opnieuw data analyses worden uitgevoerd op zowel LRMS en HRMS bestanden.

Daarnaast zal in 2022 samen met verschillende stakeholders gezocht worden naar een gezamenlijke basis om in de toekomst zulk soort data analyses uit te gaan voeren. Wat is hiervoor nodig? Welke kansen liggen voor het grijpen? Welke risico's zijn er te mitigeren en hoe?

De begeleidingscommissie (BC) die is ingesteld om gedurende de opdracht resultaten te bekijken, voortgang te bespreken, fasemomenten te bespreken en bij te sturen blijft ook in 2022 en 2023 ingesteld.

De partij die de werkzaamheden (in samenwerking met RWS) gaat uitvoeren dient dus een tweetal data-analyses uit te voeren, een data-analyse van resultaten afkomstig uit zowel lage resolutie als hoge resolutie analyses.

RWS wordt ingeschakeld om de data-bestanden samen met de aan te besteden partij door te nemen. Dit wordt ook in samenwerking met andere waterbeheerders gedaan. Het gaat dan om waterbeheerders die hun data beschikbaar stellen. In het aangevraagde budget wordt hiermee rekening gehouden.

Voor de werkzaamheden die moeten leiden tot meer samenwerking tussen verschillende stakeholders zal de te contracteren partij overleggen moeten plannen, belangen moeten benoemen en discussies moeten beslechten. Uiteindelijk leiden deze werkzaamheden tot een voorstel tot inpassing van deze data-analyses in toekomstige meetnetten.

³ HRMS staat voor hoge resolutie massa spectrometrie. Na scheiding van stoffen in het monster via vloeistof- (LC) of gaschromatografie (GC) vindt detectie (en identificatie) van de stoffen plaats via HRMS.

⁴ De werkzaamheden in 2021 zijn in april 2022 afgerond.
9 mei 2022

1.2.2 *Doelstelling programma/project*

Dit project betreft de analyse van chemische verbindingen in het aquatisch milieu en heeft implicaties op toekomstige monitoring en regelgeving.

Hierbij dient opgemerkt dat RWS regulier maar 0,2% van de aanwezige stoffen analyseert (in het aquatisch milieu). Met de beschreven data-analyse zullen veel meer stoffen worden gedetecteerd.

Resultaten vanuit de data-analyse kunnen leiden tot optimalisatie van het huidige reguliere meetnet en tot wijziging (en verbetering) van maatregelen om verontreiniging tegen te gaan of bronnen op te sporen.

De opdracht is onderverdeeld in twee werkpakketten. Eerst (werkpakket 1) wordt gewerkt aan optimalisatie van de in 2021 opgeleverde PoCs. Hierbij worden meerdere data-bestanden (van verschillende waterbeheerders) gebruikt. In 2021 is telkens gewerkt met bestanden afkomstig van één leverancier. Resultaten zullen leiden tot interessante signalen (in de data) die in werkpakket 2 wordt bekeken welke signalen worden uitgekozen om te gaan identificeren. Resultaten leiden dan tot namen van stoffen die ook voorkomen in het watersysteem.

Binnen beide werkpakketten zal ook worden gewerkt aan een 'zachte' kant. In werkpakket 1 wordt verwacht dat een stakeholdersanalyse wordt opgesteld en een procesbeschrijving. In werkpakket 2 volgt een visie op toekomstig handelingsperspectief vanuit beheer en beleid. Resultaten vanuit deze data-analyse zullen leiden tot andere handelingen vanuit beheer en beleid.

Gebruikte tooling wordt eventueel verbeterd. Tooling (open source) dient vervolgens aangeboden te worden om op te pakken door iedere organisatie die dat wil.

Op deze wijze krijgt de waterbeheerder beter inzicht in de chemische waterkwaliteit en weet de waterbeheerder beter wat een RWZI zuivering daadwerkelijk voor effect heeft.

Deze andere manier van monitoren zal op een generieke wijze worden opgeleverd, opdat deze manier ook door andere waterbeheerders kan worden ingezet.

1.3 De opdracht

1.3.1 *Achtergrond van de opdracht*

De methodes (tooling) die zijn opgeleverd in 2021 worden in 2022 (en 2023) ingezet om meer data te analyseren. Het gaat dan om schaalbaarheid van het opgeleverde producten met de laatst beschikbare data vanuit betrokken partijen⁵.

In 2022 wordt gestart met lage resolutie (LRMS) data afkomstig van minimaal één waterschap (of drinkwaterlaboratorium). Deze data wordt dan samen met recente RWS data gebruikt. Hiermee wordt de scope vergroot, omdat dan resultaten van twee verschillende waterbeheerders worden gecombineerd.

⁵ In de begeleidingscommissie nemen de volgende partijen deel: RWS, I&W, vertegenwoordigers van waterschapslaboratoria, drinkwaterbedrijven, ILT en RIWA. 9 mei 2022

Daarnaast wordt in 2022 gestart met hoge resolutie (HRMS) data afkomstig van minimaal één waterschap (naast data afkomstig vanuit drinkwaterlaboratoria of RWS). Ook nu geldt dan dat er resultaten van twee verschillende waterbeheerders worden gecombineerd.

Ook wordt data gebruikt welke is verzameld bij analyse van RWZI effluenten. Het gaat hierbij om HRMS data.

Deze drie data-analyses worden in werkpakket 1 uitgevoerd. Bij dit werkpakket wordt gewerkt aan het benoemen van verschillende signalen (ook wel features genoemd) aanwezig in de verschillende data-sets. Nogmaans, het gaat om een data-analyse van LRMS data (oppervlaktewater), een data-analyse van HRMS data (oppervlaktewater), en een data-analyse van HRMS data (RWZI).

Bij werkpakket 1 hoort ook uitvoering van een stakeholder analyse en afstemmen van een gezamenlijke procesbeschrijving over hoe de tooling kan worden gebruikt bij toekomstige monitoring. Afstemming dient daarbij plaats te vinden met deelnemers van de begeleidingscommissie.

Na de zomer van 2022 zullen de resultaten van de data-analyses beschikbaar moeten komen. Vanaf dat moment kan gewerkt worden aan een duiding van de resultaten (werkpakket 2). Met andere woorden; er wordt dan gewerkt aan identificatie van de chemische verbindingen die horen bij de geconstateerde signalen (ook wel features genoemd). Hierbij dient gebruik te worden gemaakt van internationaal ontwikkelende prioriteringsmethodes (bijvoorbeeld NORMAN en iPiE).

Bij werkpakket 2 hoort ook het verder verbeteren van de procesbeschrijving van de inpassing van deze data-analyses binnen het toekomstige (chemisch) meetnet, welke is opgesteld in werkpakket 1.

Bij de werkzaamheden, worden de resultaten van beide data-analyses (LRMS en HRMS) samengevoegd en in ruimte en tijd weergegeven. Op deze wijze dient de Opdrachtnemer duidelijk maken (i.) hoe stoffen zich bij verschillende waterbeheerders gedragen (ruimtelijke weergave). Daarnaast dient de Opdrachtnemer (ii.) weer te geven waar de resultaten van de LRMS analyses de resultaten van de HRMS data analyse elkaar aanvullen.

1.3.2 *Opdrachtbeschrijving op hoofdlijnen*

Werkpakket 1 (doorlooptijd: 6 maanden):

LRMS en HRMS data bestanden van verschillende leveranciers worden geanalyseerd. Hierbij wordt de tooling uit 2021 gebruikt. Hiervoor wordt een drietal rapportages opgeleverd. Een rapportage van de data-analyse van de LRMS data, een rapportage van de HRMS data (een aparte rapportage van de HRMS data van de oppervlaktewater matrix en een rapportage van de HRMS data van RWZI analyses)

Opdrachtnemer maakt een stakeholdersanalyse.

Opdrachtnemer maakt een procesbeschrijving hoe de data-analyse in de toekomst kan worden ingezet.

Alle werkzaamheden dienen te worden uitgevoerd in samenspraak met leden van de BC.

Verzamelde data dient structureel te worden opgeslagen. Opdrachtnemer neemt hiervoor contact op met opdrachtgever om te komen tot een acceptabel data-format.

Werkpakket 2 (doorlooptijd: 6 maanden):

Opdrachtnemer zorgt voor identificatie van signalen die uit werkpakket 1 zijn gekomen. Opdrachtnemer stelt hiervoor één rapportage op. In deze rapportage wordt ingegaan op de resultaten van de drietal data-analyses.

Verzamelde data dient structureel te worden opgeslagen. Opdrachtnemer neemt hiervoor contact op met opdrachtgever om te komen tot een acceptabel data-format.

De opdracht zal antwoorden geven op vragen over opkomende stoffen die voorkomen in het watersysteem. Zoals: welke opkomende stoffen komen er voor? Waar komen deze stoffen vandaan? Zouden ze een plaats moeten krijgen in reguliere chemische meetnetten?

Gedurende de werkzaamheden zal overlegd worden met verschillende partijen, zoals de opdrachtgever, werkgroep Aanpak Opkomende Stoffen, begeleidingscommissie (BC).

Opdrachtnemer stelt uiteindelijk ook een rapportage op waarin wordt ingegaan op de implicaties van de resultaten die behaald worden uit de data-analyses. Welk handelingsperspectief is er voor (toekomstig) beheer en beleid?

1.3.3 *Doel van de opdracht(en)*

Resultaten van deze opdracht leiden tot een tweetal data analyses⁶. De methodes die gebruikt worden zijn in 2021 ontwikkeld en worden verbeterd opgeleverd in 2022, met in een volgende fase een duiding van de resultaten. De resultaten van de analyses (2022) zullen inzicht geven in opkomende stoffen in het watersysteem. Deze informatie wordt gebruikt om het (chemisch) meetnet te verbeteren. De opdrachtgever krijgt duidelijke handvatten om zulk soort data-analyses in de toekomst onderdeel uit te laten maken van het (chemisch) meetnet.

Eerst wordt onderzocht welke signalen (features) in meerdere data-bestanden voorkomen (HRMS en LRMS).

Vervolgens wordt gewerkt aan een procesbeschrijving hoe zulk soort data-analyses een rol kunnen gaan spelen in toekomstige monitoring.

Tegelijkertijd wordt gewerkt aan een stakeholdersanalyse.

Later worden de uitgekozen signalen geïdentificeerd. De chemische verbindingen die hier uit voortkomen. De keuze om over te gaan tot identificatie van signalen moet gebaseerd zijn op internationaal afgesproken prioriteringsmethodes.

⁶ Let op: Het gaat om een LRMS en een HRMS data-analyse. Echter worden er twee soorten HRMS data gebruikt (oppervlaktewater en RWZI).
9 mei 2022

Gaandeweg dient de gebruikte tooling te worden bewaard en eventueel verbeterd. De (verbeterde) tooling wordt in eerste instantie bij Rijkswaterstaat ondergebracht.

De verzamelde data wordt binnen het project opgeslagen. Uiteindelijk dienen de data te worden aangeboden via Waterinfo Extra.

1.4 Leeswijzer

In hoofdstuk 2 is de opdracht alsmede het resultaat hiervan omschreven, inclusief randvoorwaarden op basis waarvan deze tot stand dient te komen. Aansluitend is in hoofdstuk 3 aangegeven wat in relatie tot de opdracht en met betrekking tot de te leveren producten en/of diensten tot stand dient te worden gebracht.

Aansluitend is aangegeven wat in relatie tot de opdracht en met betrekking tot het projectmanagement (hoofdstuk 4), kwaliteitsmanagement (hoofdstuk 5), projectbeheersing (hoofdstuk 6) en veiligheidsmanagement (hoofdstuk 7) tot stand dient te worden gebracht.

2 Opdrachtomschrijving

2.1 Beschrijving van de opdracht

In dit hoofdstuk zal uitgebreid in worden gegaan op de uit te voeren werkzaamheden. De nadruk ligt op de samenwerking tussen de verschillende stakeholders tijdens de uitvoering van de werkzaamheden.

In hoofdstuk 3 zijn de aan de opdracht verbonden eisen geformuleerd.

2.2 Indeling van de opdracht in onderdelen/werkpakketten

Werkpakket 1:

In 2021 zijn een tweetal protocollen opgesteld. Deze protocollen zullen in werkpakket 1 worden ingezet om wederom een data analyse uit te voeren. De data analyse moet plaatsvinden op LRMS- en HRMS-data. De protocollen (ook wel tooling genoemd) wordt beschikbaar gesteld door de Opdrachtgever. Er volgen dan een drietal op te leveren rapportages (zie ook verderop). Het gaat dan om een rapportage over de gevonden signalen (ook wel features genoemd) 'over' de waterbeheerders heen en voor LRMS (oppervlaktewater) en HRMS (oppervlaktewater en RWZI).

In werkpakket 1 wordt eerst veel aandacht besteed aan het verzamelen van data. In 2021 is LRMS-data van RWS gebruikt. In 2022 wordt ook LRMS-data van RWS verzameld en LRMS-data van een andere partij. In 2021 is de RWS-data van locaties Eijsden en Lobith gebruikt van de afgelopen drie jaar. In 2022 zullen twee andere locaties kunnen worden toegevoegd en voor Lobith en Eijsden extra meetjaren. Voor de andere LRMS data zal gelden dat locaties boven- danwel benedenstrooms van de RWS-locaties moeten worden verzameld. Vervolgens worden signalen (ook wel features) gezocht die in de RWS-data en andere gebruikte data worden gevonden.

In 2021 is HRMS-data van HWL⁷ gebruikt. In 2022 wordt de Opdrachtnemer gevraagd bij twee verschillende partijen HRMS-data te verzamelen. Het gaat dan om HRMS-data verzameld door RWS en HRMS-data van een andere partij. Bij de start van de werkzaamheden wordt met de Opdrachtgever besproken welke andere partij dat zal zijn. Deze HRMS data dient vervolgens te worden gebruikt bij de data analyse. Ook nu wordt eerst gekeken naar signalen (ook wel features genoemd) die voorkomen in beide data sets.

In beide gevallen is de Opdrachtnemer verantwoordelijk voor het verzamelen van zowel de LRMS en de HRMS data. De opdrachtnemer heeft hierover nauw contact met de leden van de begeleidingscommissie (BC), alwaar alle betrokken partijen in participeren.

In dit werkpakket dient ook een met de BC afgestemde procesbeschrijving van deze data-analyse(s) te worden opgesteld.

⁷ HWL = Het Waterlaboratorium. Dit laboratorium voert analyses uit voor de drinkwaterbedrijven (HWL is onderdeel van Dunea, PWN en Waternet).
9 mei 2022

Opdrachtnemer levert ook een stakeholdersanalyse op.

Werkpakket 1 dient te worden beëindigd met aanvaarding en / of goedkeuring van de resultaten.

Werkpakket 2:

Opdrachtnemer heeft in werkpakket 1 met verschillende stakeholders (beginnende bij de leden van de BC) een beschrijving hoe toekomstig gebruik van LRMS en HRMS data analyses een plaats binnen de reguliere monitoring kan krijgen. Bij deze werkzaamheden moet gebruik worden gemaakt van de zgn. Schymanski levels⁸. Het is hierbij de bedoeling dat stapsgewijs wordt weergegeven welke stappen er nodig zijn om te komen tot deze data-analyse.

Opdrachtnemer maakt gebruik van de in werkpakket 1 opgeleverde stakeholdersanalyse. Opdrachtnemer zorgt er voor dat stakeholders door interviews worden bevraagd over de procesbeschrijving. Het gaat hierbij om minimaal één interview met elke stakeholder.

Mede op grond van werkpakket 1 wordt begonnen met deze werkzaamheden. Door de Opdrachtnemer wordt allereerst met betrokkenen afgestemd welke features uit werkpakket 1 verder worden gebruikt bij de identificatie.

Opdrachtnemer beschrijft welke criteria zullen worden gebruikt om te besluiten een bepaald feature te gebruiken bij dit werkpakket. Deze criteria worden opgesteld in samenwerking met betrokkenen. Er moet worden gebruik gemaakt van reeds bestaande prioriteringskaders, zoals bijvoorbeeld al is ontwikkeld bij het internationale project 'NORMAN' en 'iPiE'.

Deze features worden vervolgens geïdentificeerd. Uiteindelijk volgen er een drietal identificaties van features gemaakt, LRMS (één maal) en HRMS (twee maal (oppervlaktewater en RWZI)).

Opdrachtnemer dient met RWS en DGWB te werken aan mogelijk handelingsperspectief zodra resultaten van de data-analyse in de toekomst openbaar wordt gemaakt.

2.3 Beschrijving resultaat van de opdracht

Deze opdracht kent meerdere resultaten. Er moet worden gewerkt aan een inhoudelijk spoor en aan een 'afstemming' spoor.

Het resultaat van de opdracht bestaat uit de navolgende deel- en eindproducten:

Werkpakket 1

- Verzameling van LRMS data – gegevensdrager met verzamelde data;
 - Dienst: ON overlegt met OG om te bepalen welke twee partijen LRMS data zullen aanleveren en van welke tijdstippen en locaties. Het overleg vindt plaats met betrokken RWS medewerkers. Het gaat om twee overleggen.

⁸ Aan het einde van huidige documentatie is kort weergegeven welke Schymanski levels er zijn.
9 mei 2022

- Product: twee verslagen
Na uitvoeren van de data-analyse worden er features benoemd die interessant zijn verder te verwerken.
- Verzameling van HRMS data – gegevensdrager met verzamelde data;
 - Dienst: ON overlegt met OG om te bepalen welke twee partijen HRMS data zullen aanleveren en van welke tijdstippen en locaties. Het overleg vindt plaats met betrokken RWS medewerkers en betrokken medewerkers bij HWL. Het gaat om twee overleggen.
 - Product: twee verslagen
Na uitvoeren van de data-analyse worden er features benoemd die interessant zijn verder te verwerken.
- Product: een met de BC afgestemde procesbeschrijving van deze data-analyses
- Fasemoment – de BC komt bijeen om vertrouwen uit te spreken in vervolg van de werkzaamheden. De mening van de BC leden wordt gedocumenteerd door ON.
 - Product: er wordt één document opgesteld (titel: 'Rapportage van werkpakket 1 werkzaamheden').

Werkpakket 2

- ON neemt de resultaten vanuit werkpakket 1 mee naar betrokkenen en komt met een voorstel voor identificatie van features (uit LRMS en HRMS). Het voorstel wordt gedocumenteerd en besproken met de BC.
 - Dienst: Oprachtnemer heeft twee overleggen met stakeholders (dit dient telkens in een (hybride) bijeenkomst met alle stakeholders te gebeuren (via BC)) om uitleg te geven over de gemaakte keuzes.
 - Product: twee verslagen
 - Product: er wordt een document opgeleverd waarin wordt weergegeven welke keuzes er ten grondslag liggen aan het vervolg van de werkzaamheden (identificatie van signalen (ook wel features genoemd), titel 'Van signalen naar identificatie').
- Gezamenlijke visie over het proces waarin toekomstige LRMS en HRMS data analyses in reguliere (chemische) meetnetten kunnen worden opgenomen. ON neemt hiervoor initiatief overleggen tussen stakeholders te organiseren om tot een afgestemd product te komen.
 - Dienst: overleggen met stakeholders. Er dient één overleg met stakeholders te worden gepland. Dit dient in een sessie te zijn waarbij de verschillende stakeholders aanwezig zijn.
 - Product: verslag
 - Product: er wordt één document opgesteld (titel 'Inpassen van NTS in meetnetten').
- Visie hoe opdrachtgever (I&W) om kan gaan met resultaten vanuit dit soort data-analyses. Wat is het handelingsperspectief voor RWS en beleid (DGWB)?
 - Dienst: overleggen met RWS en DGWB. Er dient één overleg met stakeholders te worden gepland. Dit dient in een sessie te zijn waarbij de verschillende stakeholders aanwezig zijn.
 - Product: verslag

- Product: er wordt één document opgesteld (titel 'Handelingsperspectief wanneer (opkomende) stoffen in het aquatisch milieu worden gesignaleerd via NTS').

3 Te leveren diensten en/of producten

PR001 De Opdrachtnemer dient zijn opdracht uit te voeren, zodanig dat hieruit voortvloeiende diensten en/of producten, aantoonbaar en traceerbaar voldoen aan de eisen voortvloeiende uit de Overeenkomst.

3.1.1 Dienst en producten naar analogie van de tekst in 2.3 – werkpakket 1

PR002 Dienst: ON overlegt met OG om te bepalen welke twee partijen LRMS data zullen aanleveren en van welke tijdstippen en locaties. Het overleg vindt plaats met betrokken RWS medewerkers. Het gaat om minimaal twee overleggen. Deze en de hierna vermelde overleggen monden uit in verslagen die tevens als product worden beschouwd.

PR003 Na uitvoeren van de data-analyse worden er features benoemd die interessant zijn verder te verwerken. Deze features worden opgenomen in PR006.

PR004 Dienst: ON overlegt met OG om te bepalen welke twee partijen HRMS data zullen aanleveren en van welke tijdstippen en locaties. Het overleg vindt plaats met betrokken RWS medewerkers en betrokken medewerkers bij HWL. Het gaat om minimaal twee overleggen.

PR005 Na uitvoeren van de data-analyse worden er features benoemd die interessant zijn verder te verwerken. Deze features worden opgenomen in PR006.

PR006 Fasemoment – de BC komt bijeen om vertrouwen uit te spreken in vervolg van de werkzaamheden. De mening van de BC leden wordt gedocumenteerd door ON.
Product: verslag
Product: er wordt één document opgesteld (titel: 'Rapportage van werkpakket 1 werkzaamheden').

3.1.2 Dienst en producten naar analogie van de tekst in 2.3 – werkpakket 2

PR007 ON neemt de resultaten vanuit werkpakket 1 mee naar betrokkenen en komt met een voorstel voor identificatie van features (uit LRMS en HRMS). Het voorstel wordt gedocumenteerd en besproken met de BC.

Dienst: Opdrachtnemer heeft minimaal twee overleggen met stakeholders (dit dient telkens in een (hybride) bijeenkomst met alle stakeholders te gebeuren (via BC)) om uitleg te geven over de gemaakte keuzes.

- PR008 Product: er wordt een document opgeleverd waarin wordt weergegeven welke keuze er te grondslag liggen voor het vervolg van de werkzaamheden (identificatie van signalen (ook wel features genoemd), titel 'Van signalen naar identificatie').
- PR009 Gezamenlijke visie over het proces waarin toekomstige LRMS en HRMS data analyses in reguliere (chemische) meetnetten kunnen worden opgenomen. ON neemt hiervoor initiatief overleggen tussen stakeholders te organiseren om tot een afgestemd product te komen. Dienst: overleggen met stakeholders. Er dient minimaal één overleg met stakeholders te worden gepland. Dit dient in een sessie te zijn waarbij de verschillende stakeholders aanwezig zijn.
- PR010 Product: er wordt één document opgesteld (titel 'Inpassen van NTS in meetnetten').
- PR011 Visie hoe opdrachtgever (I&W) op kan gaan met resultaten vanuit dit soort data-analyses. Wat is het handelingsperspectief voor RWS en beleid (DGWB)? Dienst: overleggen met RWS en DGWB. Er dient minimaal één overleg met stakeholders te worden gepland. Dit dient in een sessie te zijn waarbij de verschillende stakeholders aanwezig zijn.
- PR012 Product: er wordt één document opgesteld (titel 'Handelingsperspectief wanneer (opkomende) stoffen in het aquatisch milieu worden gesignaleerd via NTS').

3.1.3 Tussen- en/ eindrapport

- PR013 De Opdrachtnemer dient een tussen- en eindrapport op te stellen. Het tussenrapport dient na uitvoering van de werkzaamheden van werkpakket 1 te worden opgeleverd. In deze tussenrapportage dient te worden weergegeven welke werkzaamheden zijn uitgevoerd en overleggen zijn gevoerd.
- PR014 Het tussen- en eindrapport dient te voldoen aan de volgende eisen:
- De technisch inhoudelijke rapportages zijn in de Engelse taal opgesteld. Samenvatting is in het Nederlands en Engels.

- Rapportages kunnen in de huisstijl van Opdrachtnemer te worden opgesteld.
- De rapportage dient een beschrijving te geven van de gebruikte methode en de kwaliteit van de gebruikte data.
- Rapportages zijn compleet, leesbaar, éénduidig, vrij van fouten en omissies.
- Tenzij anders vermeld, hoeven rapportages slechts digitaal te worden verstrekt aan Opdrachtgever.
- Documenten in het Open Document Format (odt, ods en odp), PDF-bestanden en de bestanden van Microsoft Office (docx, xlsx, pptx, ppsx, doc, ppt, pps) moeten voldoen aan het Tijdelijk besluit digitale toegankelijkheid overheid. Meer informatie kunt u vinden op: <https://www.digitoegankelijk.nl/>.

3.1.4 *Becommentariëring van de producten*

- PR015 Alle te leveren producten dienen door de Opdrachtnemer als 'concept', ter toetsing, te worden voorgelegd aan de Opdrachtgever en eventuele andere reviewers. Er vindt per product één commentaarronde plaats, waarbij RWS zorgt voor aanlevering van gebundeld commentaar. Na verwerking van het commentaar dienen de documenten door Opdrachtnemer 'definitief' te worden gemaakt.

4 Projectmanagement

PM001 De Opdrachtnemer dient de Opdracht zodanig voor te bereiden en uit te voeren dat deze op beheerste en controleerbare wijze verloopt, zodat het gewenste resultaat wordt behaald.

4.1 Interactie tussen Opdrachtgever en Opdrachtnemer

PM002 De Opdrachtnemer dient bij te dragen aan een effectieve informatie-uitwisseling met de Opdrachtgever, zodanig dat beide partijen juist en tijdig zijn geïnformeerd.

4.1.1 Geplande overlegmomenten

PM003A De Opdrachtnemer dient een voorstel te doen voor het inplannen van overlegmomenten, rekening houdende met:

- Afstemming met verschillende stakeholders;
 - Afstemming met RWS elke maand, dit kan digitaal
 - Afstemming met de projectbegeleiding elke twee weken
 - Drie maal met de BC voor werkpakket 1
 - Drie maal met de BC voor werkpakket 2
- Het fasemoment.

Op zijn minst zijn de volgende overleggen gepland.

Nr	Overleg	Initiator	Gepland
01	Startbijeenkomst, direct na gunning	Opdrachtnemer	September 2022
02	Tweewekelijks overleg	Opdrachtnemer	Vanaf september 2022 (werkpakket 1)
03	Tweewekelijks overleg	Opdrachtnemer	Vanaf start werkpakket 2 (2023)
03	Tweewekelijks en tegelijkertijd Eindgesprek met evaluatie	Opdrachtnemer	einde project

Naast de hier vermelde overleggen (bij de start en het einde) wordt voor de rest van de totale hoeveelheid overleggen verwezen naar Bijlage I Staat van Tarieven en prijzen, met name de posten 10 t/m 12, 16 t/m 18 en 19 en 21.

4.1.2 Geplande startbespreking

PM004 De (hybride) startbespreking wordt direct na gunning door de Opdrachtnemer georganiseerd. De

startbespreking is bedoeld om kennis te maken en de verwachtingen tussen Opdrachtgever en Opdrachtnemer te bespreken. De bespreking dient in hybride vorm te worden aangeboden, opdat iedereen aanwezig kan zijn.

- PM005 Tijdens de startbespreking worden minimaal de volgende onderwerpen besproken:
- Nadere toelichting door de Opdrachtgever op het project en achtergrondinformatie;
 - Deze vraagspecificatie en de aanbidding;
 - Te leveren producten;
 - Geïdentificeerde actuele risico's en beheersmaatregelen;
 - Kwaliteitsborging door Opdrachtnemer;
 - Contractbeheersing door Opdrachtgever.

4.1.3 Opstellen voortgangsrapportage

- PM006 De Opdrachtnemer dient per twee weken een voortgangsrapportage te verstrekken aan de Opdrachtgever.
- PM007 De Opdrachtnemer dient de voortgangsrapportage ten minste vijf (5) werkdagen voorafgaand aan het betreffende voortgangsoverleg beschikbaar te stellen aan de projectleider van de Opdrachtgever.
- PM008 In de voortgangsrapportage dienen minimaal de volgende onderdelen te zijn opgenomen:
- De voortgangsrapportage dient in de Nederlandse taal te worden opgesteld.
 - De voortgangsrapportage dient in de huisstijl van Opdrachtnemer te worden opgesteld.
 - De voortgangsrapportage bevat een verantwoording van de voortgang van de betreffende (werkpakket)activiteiten in de tijd in relatie tot de hier aan verbonden mijlpalen.
 - De voortgangsrapportage bevat een actuele planning met daarin opgenomen de weergave van de activiteiten in de tijd alsmede een duiding van het kritieke pad hierin.
 - De voortgangsrapportages beschrijven de voortgang alsmede eventuele afwijkingen en wijzigingen over de periode waarop de voortgangsrapportage betrekking heeft.
 - Tenzij anders vermeld, hoeven voortgangsrapportages slechts digitaal te worden verstrekt aan Opdrachtgever.

4.1.4 Verslaglegging

- PM009 De verslaglegging van overleggen dient te worden verzorgd door Opdrachtnemer.
- PM010 Verslagen van overleggen worden voor de verspreiding door de Opdrachtnemer voorgelegd aan de Opdrachtgever of visa versa.

5 Kwaliteitsmanagement

KM001 De Opdrachtnemer dient de opdracht te beheersen en optimaliseren met als doel fouten en verspillingen zichtbaar te maken en diensten en/of producten continu te verbeteren.

5.1 Toepassen kwaliteitsmanagement

KM002 De Opdrachtnemer dient te beschikken over en te werken conform een kwaliteitsmanagementsysteem, dat is gecertificeerd door een daartoe geaccrediteerde certificatie-instelling, op basis van de vigerende versie van de norm NEN-EN-ISO 9001 of gelijkwaardig, dan wel een eigen ingericht kwaliteitsmanagementsysteem, voor zover dat voor wat betreft de aard van de werkzaamheden, passend is.

5.1.1 Het identificeren en registeren van afwijkingen

KM003 De Opdrachtnemer dient afwijkingen, van hetgeen is overeengekomen in de overeenkomst dan wel het eigen kwaliteitssysteem, te identificeren en op te nemen in een afwijkingsrapport.

KM004 In het afwijkingenregister dienen minimaal de volgende aspecten te zijn opgenomen:

- uniek volgnummer van de afwijking;
- omschrijving van de afwijking;
- datum constatering;
- verantwoordelijke actor;
- werkpakket;
- datum wanneer corrigerende maatregelen uitgevoerd zullen zijn;
- beschrijving en status van de corrigerende maatregelen;
- geplande datum implementatie corrigerende maatregelen;
- geplande datum implementatie preventieve maatregelen;
- werkelijke datum implementatie corrigerende maatregelen;
- werkelijke datum implementatie preventieve maatregelen;
- status afwijking;
- datum sluiting van het afwijkingsrapport.

5.1.2 Opstellen plan van aanpak

9 mei 2022

- KM005 De opdrachtnemer dient een plan van aanpak op te stellen, waarin een integrale beschrijving wordt gegeven van de toepassing van het kwaliteitsmanagement bij uitvoering van de opdracht.
- KM006 In het Plan van Aanpak dienen minimaal de volgende onderwerpen opgenomen te zijn:
- beschrijving van de wijze waarop de opdracht wordt gemanaged en waarin is opgenomen:
 - a) beschrijving van de strategie/ -aanpak van de opdracht;
 - b) beschrijving van de voor de uitvoering van de opdracht samengestelde projectorganisatie, waarin de leidinggevenden en sleutelfuncties zijn opgenomen inclusief de aan hen toebedeelde taken, verantwoordelijkheden en bevoegdheden;
 - c) beschrijving van de communicatie en informatievoorziening ten behoeve van de opdracht (intern en extern);
 - d) beschrijving van de wijze waarop met afwijkingen en/of wijzigingen wordt omgegaan;
 - e) etc.

6 Projectbeheersing

PB001 De Opdrachtnemer dient zijn Werkzaamheden te beheersen op de projectbeheersaspecten, zodanig dat de opdracht wordt gerealiseerd conform de uit de overeenkomst voortvloeiende eisen.

6.1 Planning

PB002 De Opdrachtnemer dient de opdracht zodanig te verrichten dat de opdracht en afstemming daarover met de Opdrachtgever in de tijd worden beheerst en dat de hieruit voortkomende diensten en/of producten uiterlijk op de gestelde opleverdatum en eventueel gestelde mijlpaaldata zijn gerealiseerd.

PB003 De Opdrachtnemer dient te de opdracht uit te voeren, waarbij het resultaat hiervan in de vorm van de diensten en/of producten, gereed dient te zijn op de conform het Plan van Aanpak en de vigerende planning vastgelegde momenten:

Nr	Dienst/product	Mijlpaal datum
01	WP1	15 maart 2023
02	WP2	15 september 2023

6.1.1 Opstellen van een planning

PB004 De Opdrachtnemer dient een planning op te stellen en deze, tenminste als onderdeel van zijn inschrijving en voorafgaand aan een voortgangsoverleg, ter kennis te brengen van de Opdrachtgever.

PB004 De planning dient tenminste:

- De voor de opdracht te ondernemen activiteiten zichtbaar te maken, waarbij deze reëel zijn uitgezet in de tijd;
- Relevante afstemming met de Opdrachtgever zichtbaar te maken (bijvoorbeeld acceptatietermijnen, communicatietermijnen);
- De begin- en einddatum van (eventuele) betaalposten zichtbaar te maken.
- Gesloten te zijn, wat betekent dat iedere activiteit en/of werkpakket een voorganger en een opvolger heeft, met uitzondering van de eerste activiteit en/of werkpakket.

6.2 Betaling

9 mei 2022

- PB005 De betaling van de opdrachtsom geschiedt op basis van deels vaste prijs, deels nacalculatie, een en ander zoals bepaald in artikel 3 van de gesloten Overeenkomst
- PB006 Indexering van de prijs van de te leveren diensten en/of producten door de Opdrachtnemer is niet op opdrachtsom, noch op eventueel meerwerk, van toepassing.
- PB007 Betaling van de opdrachtsom vindt overigens verder plaats in overeenstemming met Bijlage I Staat van Tarieven en prijzen en artikel 3 van de gesloten Overeenkomst.

6.3 Risicomanagement

- PB008 De Opdrachtnemer dient gedurende het project risico's te identificeren, analyseren en beheersen, zodanig dat de kans van optreden dan wel het gevolg van ongewenste gebeurtenissen voor de Opdrachtnemer en waar mogelijk de Opdrachtgever wordt geminimaliseerd.

6.3.1 Opstellen risicoregister

- PB009 De Opdrachtnemer dient een risicoregister met beheersmaatregelen op te stellen en actueel te houden.
- PB010 Het risicoregister dient minimaal de volgende aspecten te bevatten:
- Beschrijving van het risico;
 - Oorzaak van het risico;
 - De gevolgen van het risico;
 - De kans van optreden van het risico;
 - Inschatting van het initieel risico op de factoren:
 - Tijd;
 - Geld;
 - Kwaliteit;
 - Omgeving;
 - Veiligheid;
 - Informatie.
 - Beheersmaatregelen om het risico te ondervangen;
 - Status van het risico;
 - Verantwoordelijk persoon voor de beheersing van het risico;
 - Inschatting van het rest risico op de factoren:
 - Tijd;
 - Geld;
 - Kwaliteit;
 - Omgeving;
 - Veiligheid;

- o Informatie.

PB011 De Opdrachtnemer en de Opdrachtgever stemmen samen, op daartoe geëigende momenten, risico's en beheersmaatregelen af, met daarbij aandacht voor het treffen van beheersmaatregelen in relatie tot elkaars risico's.

7 Veiligheid

- V001 De Opdrachtnemer dient de opdracht te verrichten, zodanig dat deze en de resultaten hiervan op een veilige en gezonde wijze verricht en gerealiseerd worden.

Bijlage 1: Overzicht gevraagde producten

Voor een overzicht van de gevraagde producten wordt verwezen naar Bijlage I Staat van Tarieven en prijzen

Bijlage 2 Verstreckte en te verstrekken Informatie

Nr	Titel	Versie en datum	Geleverd bij uitvraag	Geleverd na gunning
01	403817_GC-MS_arrange_qxmax	15-04-2022	X	
02	403817_GC-MS_validation_phenol	15-04-2022	X	
03	403817_HRMS	15-04-2022	X	

Bijlage 3 Schymanski levels

Schymanski levels:

Betrouwbaarheidsniveau van identificatie

Volgt systeem van "Schymanski levels" [*] maar met verdieping

Non Target Screening (NTS)	Target	Niveau 1: Bevestigde structuur met IP via referentiestandaard	MS, MS ⁿ , (precursor & diagnostische fragmenten)	RT (≤ RT eis)	Aanvullende diagnostisch bewijs (bijv. CCS)	
	Suspect	Niveau 2: Waarschijnlijke structuur a) via bibliotheek spectrum match b) via diagnostisch bewijs	MS, MS ⁿ , (uit bibliotheek)	RT _{bibliotheek}		
		Niveau 3: Voorlopige kandidaat structuren structuur, substituent, klasse	MS, MS ⁿ , (experimentele data)	RT _{voorspelling}		
	Unknown	Niveau 4: Onbevestigde kandidaten Eenduidige molecuul formule en/of eenduidig massaspectrum	MS (Geen MS ⁿ info, onvoldoende structuurinformatie)	-		-
		Niveau 5: Exacte massa van interesse en/of massaspectrum	MS (Geschikt voor trendanalyse)	-		-

* DOI: 10.1021/acs.est.0c05713 en DOI: 10.1021/es5002105