TNO innovation for life

Kalibratie en validatie van het ART mechanistisch model

Overzicht ART workshop

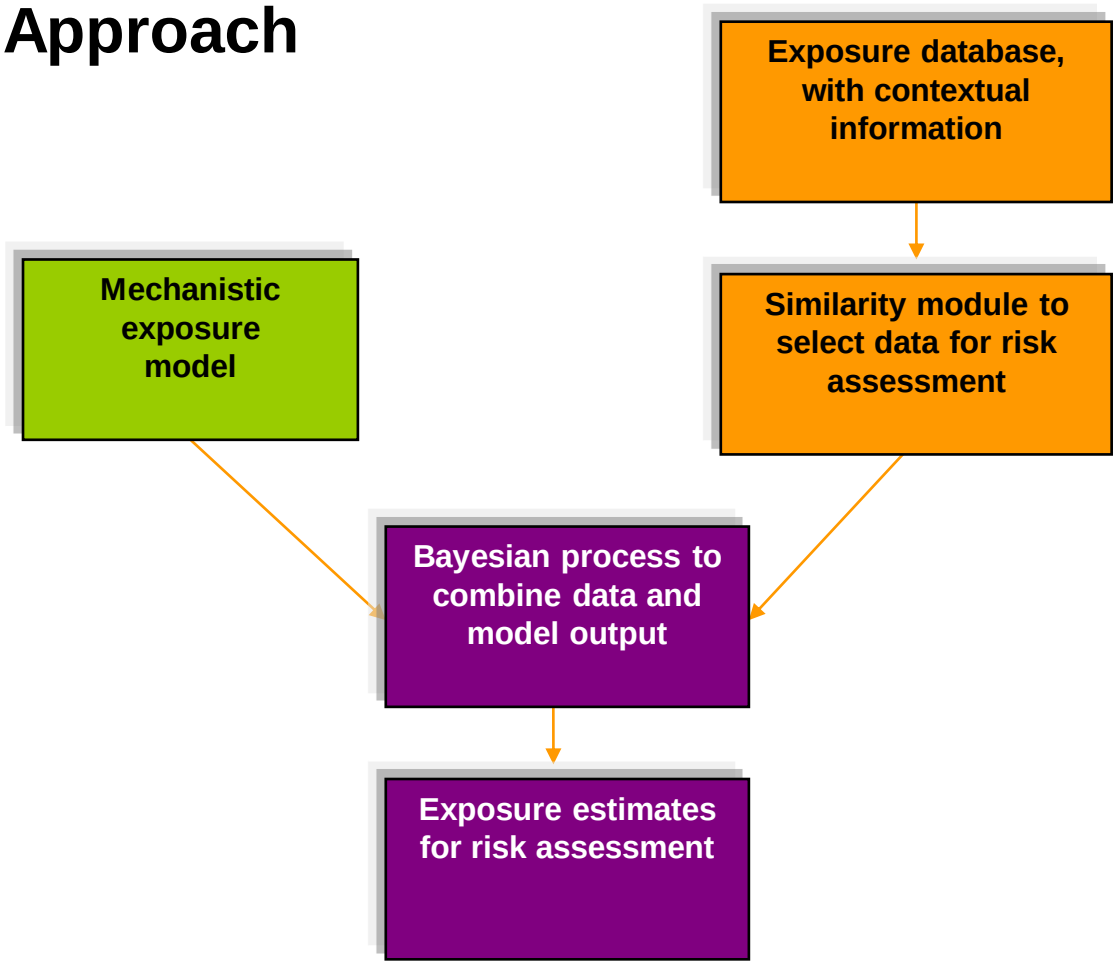
- 11.15-11.40 Kalibratie en validatie van het ART mechanistisch model
  - Introductie
  - Mechanistisch model
  - Kalibratie
  - Validatie
- 11.40-12.20 Maikel van Niftrik
  - Gebruik van ART binnen REACH
- 12.20-12.30 Erik Tielemans
  - ART 1.5
- 12.30-12.45 Discussie

The Advanced REACH Tool (ART)

- Higher tier exposure assessment tool
- Geschikt voor het schatten van blootstelling aan dampen, aerosols, stof en stof ontstaan bij verspanende werkzaamheden (niet geschikt voor rook, gassen en vezels)
- Ontwikkeld door verschillende instituten in samenwerking met industrie (Shell, GlaxoSmithKline, Eurometaux)

- Gefinancieerd door: GSK, Shell, Eurometaux, CEFIC, Affset, HSE, SZW.

ART Approach



9 Modifying Factors (MF):

- Intrinsic emission potential (*E*)
- Activity emission potential (*H*)
- Local controls (*LC*)
- Separation (*Sep*)
- Segregation (*Seg*)
- Surface contamination (*Su*)
- Dilution (*D*)
- Personal behavior (*P*)
- RPE

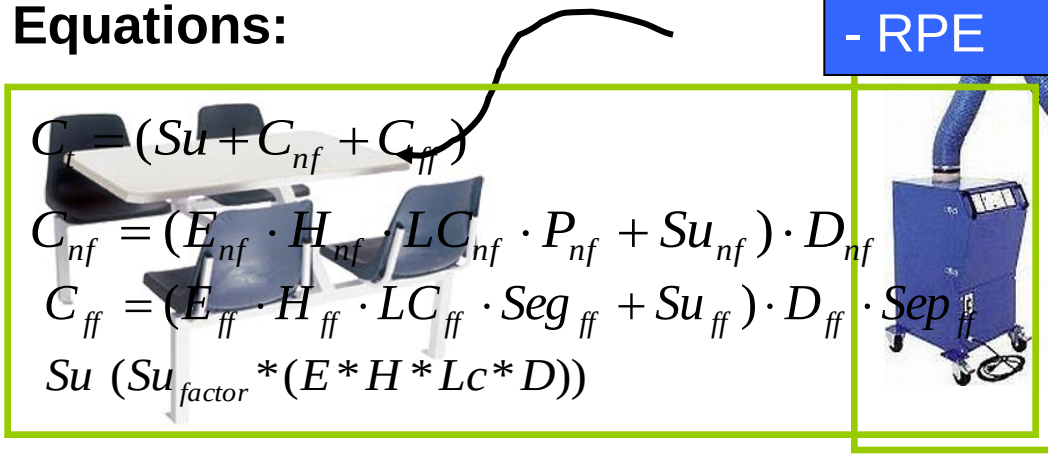
Equations:

$$C_t = (Su + C_{nf} + C_{ff})$$

$$C_{nf} = (E_{nf} \cdot H_{nf} \cdot LC_{nf} \cdot P_{nf} + Su_{nf}) \cdot D_{nf}$$

$$C_{ff} = (E_{ff} \cdot H_{ff} \cdot LC_{ff} \cdot Seg_{ff} + Su_{ff}) \cdot D_{ff} \cdot Sep_{ff}$$

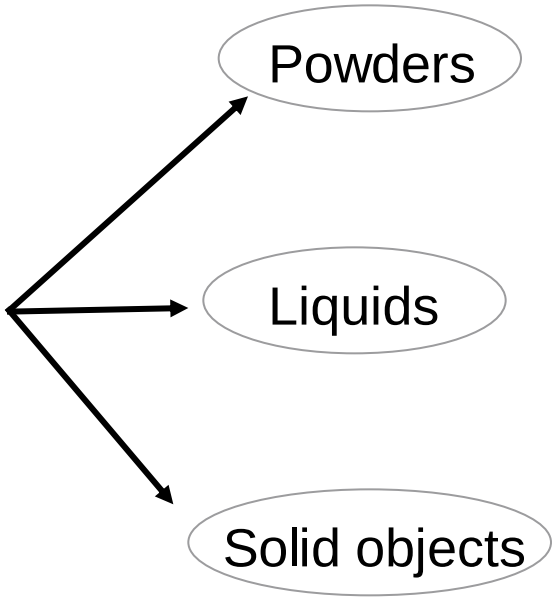
$$Su\ (Su_{factor} * (E * H * Lc * D))$$

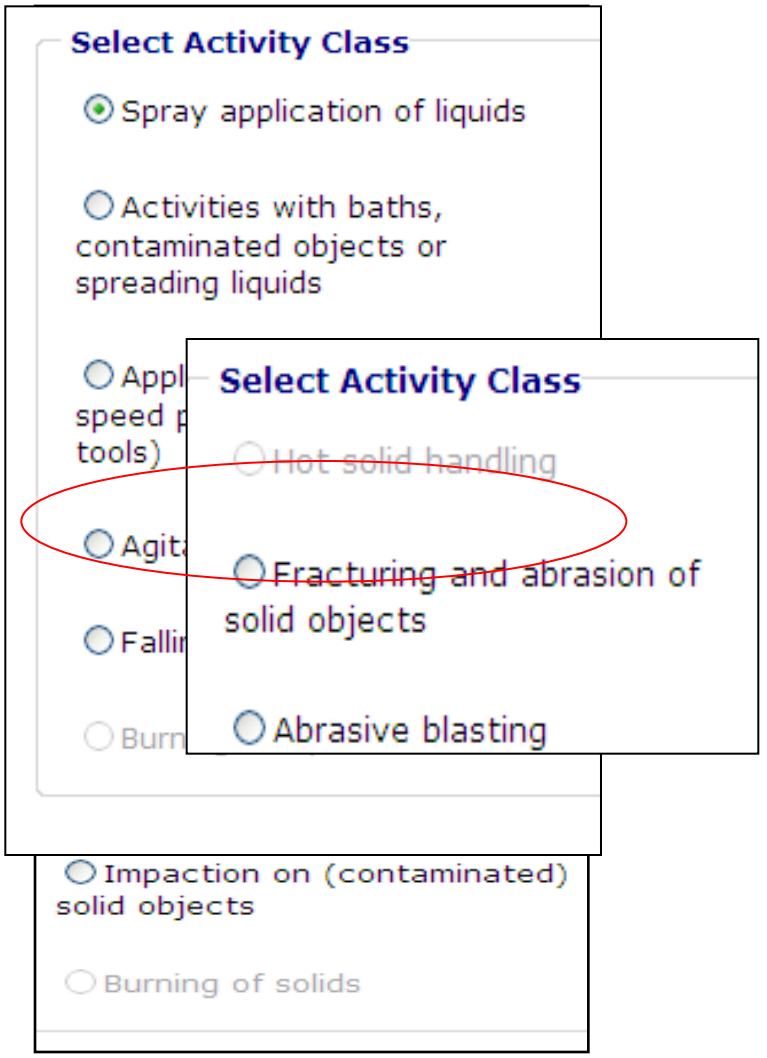


Substance Emission Potential (dustiness)

Category	Relative weight
Firm granule	0.01
Granule	0.03
Coarse dust	0.1
Fine dust	0.3
Extremely fine dust	1.0

Activity Emission Potential





Activity emission potential

Quantity: >1000kg/min (**30**)

Type of handling: Normal (**1**)

Drop height: >0.5m (**3**)

Level of containment: Open (**1**)

ART score for

AEP = **90**

Quantity: 10-100g/min (**0.1**)

Type of handling: Careful (**0.3**)

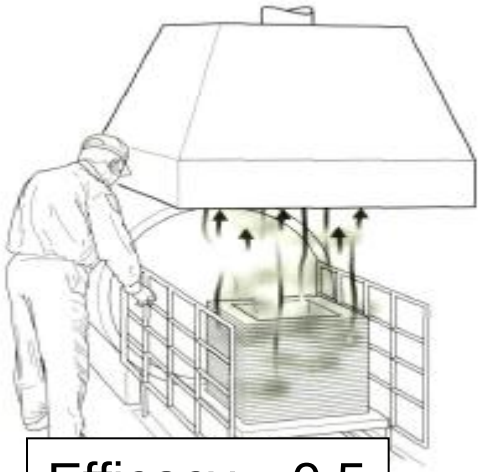
Drop height: <0.5m (**1**)

Level of containment: Open (**1**)

ART score for

AEP = **0.03**

Beheersmaatregelen



Efficacy = 0.5

- No localized controls
- Suppression techniques
  - Wetting at the point of release
  - Knockdown suppression
- Containment (non-extracted)
- Local ventilation systems
  - Receiving hoods
    - Canopy hoods (hot processes)
    - Other receiving hoods
  - Capturing hoods
    - Fixed
    - Movable
    - On-tool (integrated) extraction
  - Enclosing hoods
    - Glove box
    - Fume cupboard
    - LEV systems with partial enclosure (no front cover)

Efficacy = 0.0001

Berekenen van de model scores

In dit geval 1 taak in de NF:

$$C_t = (C_{nf} + Su)$$

$$C_{nf} = (E_{nf} \cdot H_{nf} \cdot LC_{nf}) \cdot D_{nf}$$

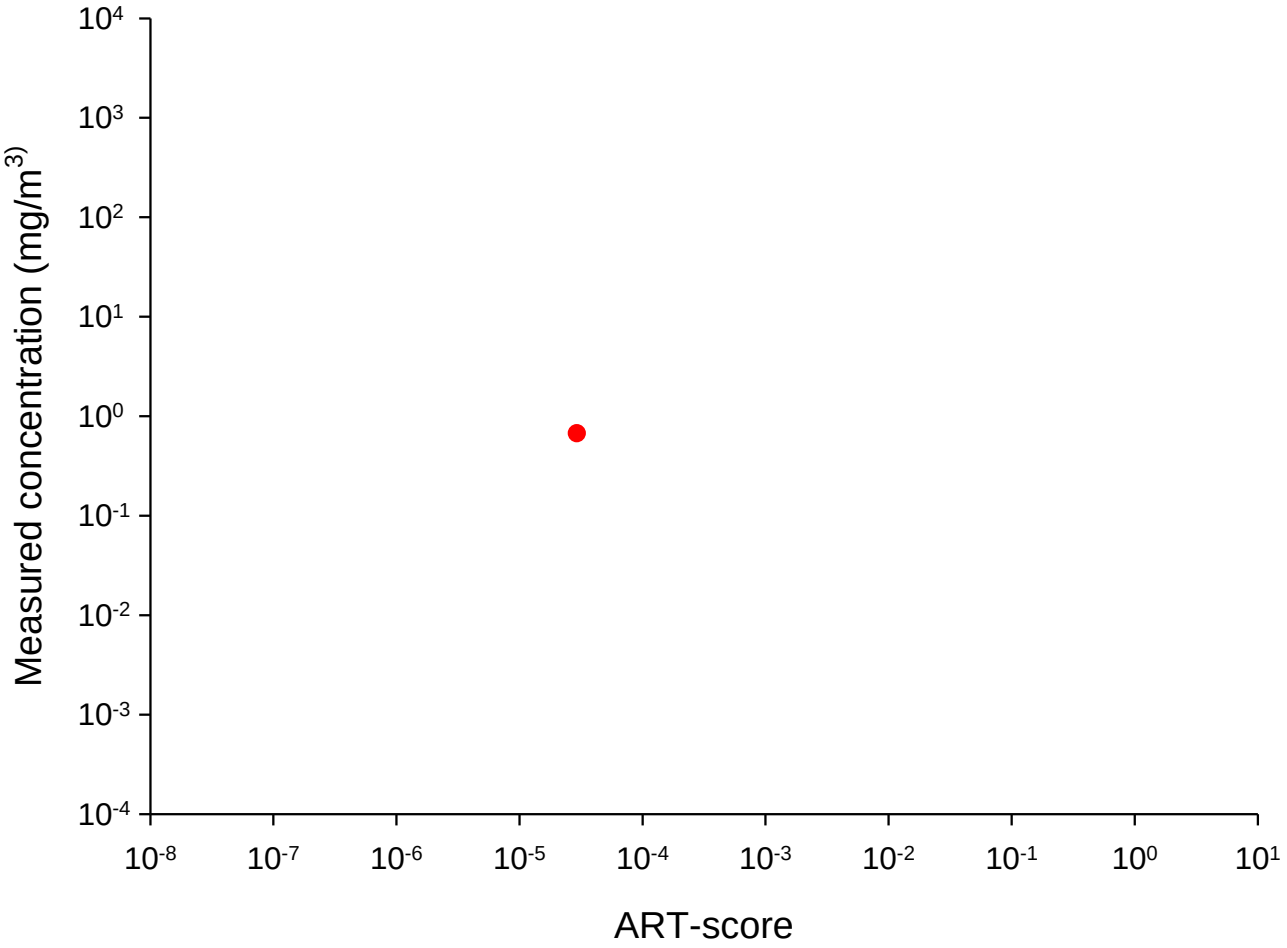
$$Su = Su_{factor} \cdot (E_{nf} \cdot H_{nf} \cdot LC_{nf} \cdot D_{nf})$$

NF and FF source	NF	Score
Substance Emission Potential (E)	E	1
Activity Emission Potential (H)	H	0.09
Localised Controls (LC)	LC	0.01
General Ventilation (D)	D	0.7
Surface factor (Su)	Su	0.003

C_t = (0.00063 + 1.89 x 10-6) = 0.00632

Relatieve modelscore geen exposure (mg/m^3)

Kalibratie van het mechanistisch model

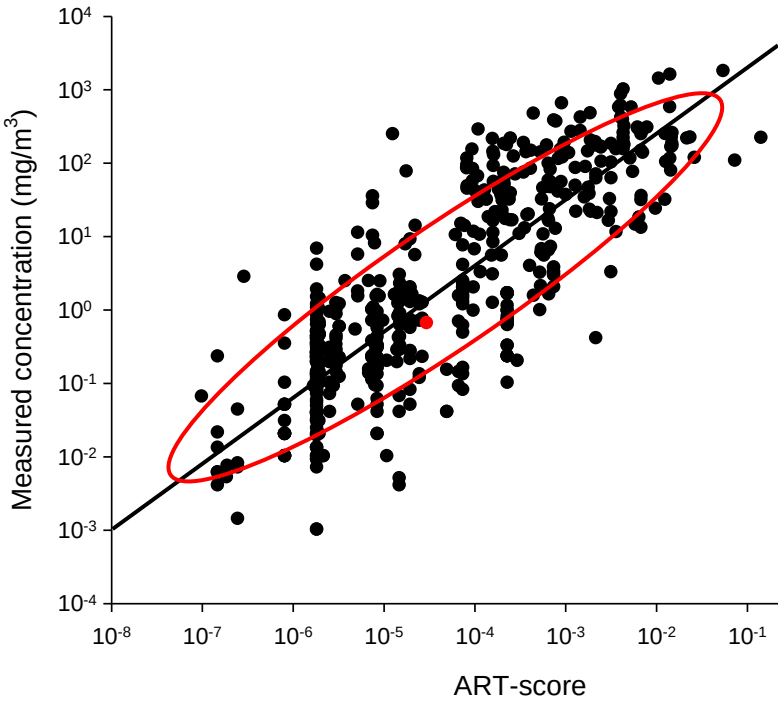


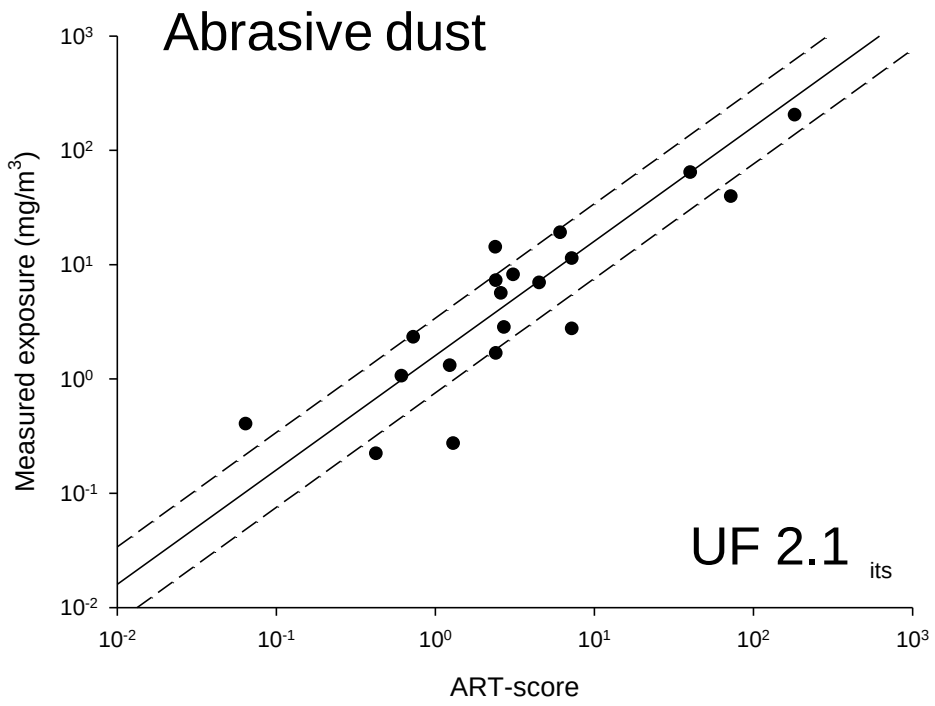
Kalibratie van het mechanistisch model

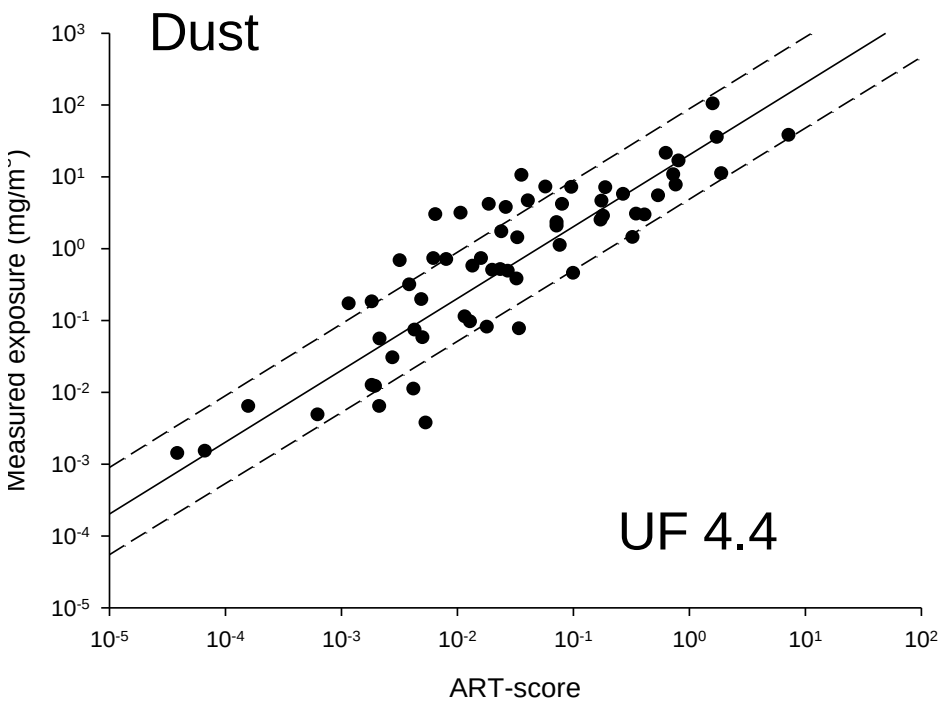
- Beschrijft de relatie tussen ART model score en gemeten blootstelling
- Geeft inzicht in de onzekerheid van de schattingen
  - Kalibratie voor:
    - Verspanende werkzaamheden (n=158)
    - Stof blootstelling (n=847)
    - Blootstelling aan dampen (n=528)
    - Blootstelling aan liquid aerosols (n=523)

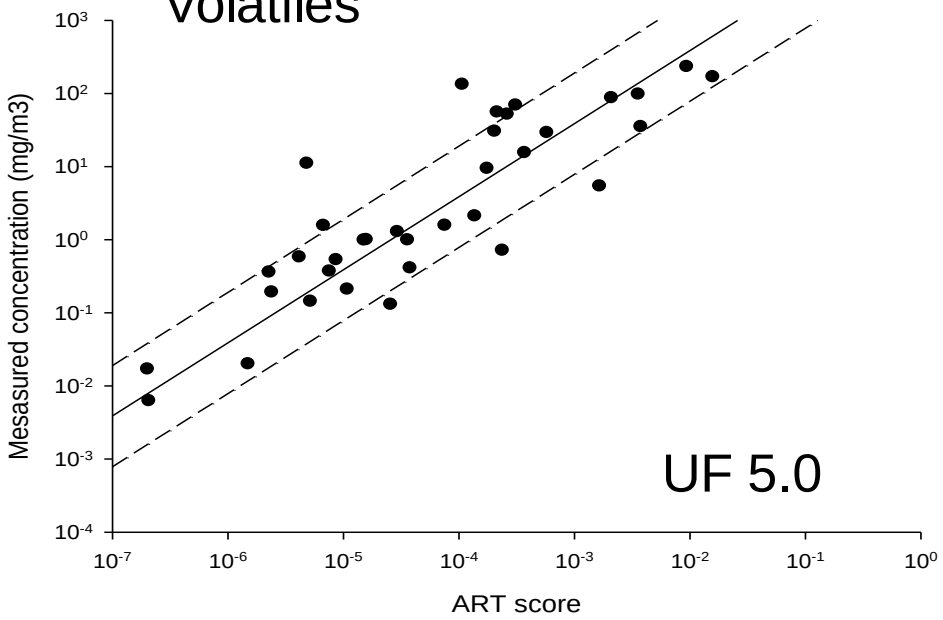
$$Ln(Y_{ijk}) = X_{ijk} = \beta + Ln(ART)$$

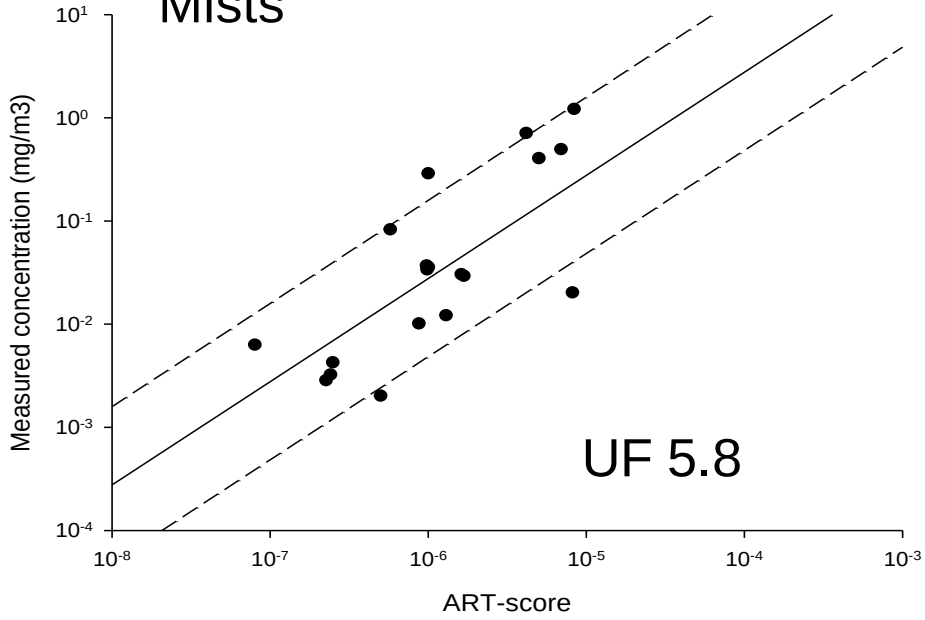
$$Ln(Y_{ijk}) = X_{ijk} = \beta \cdot + \ln(ART) + \delta_i + \varepsilon_{ij}$$



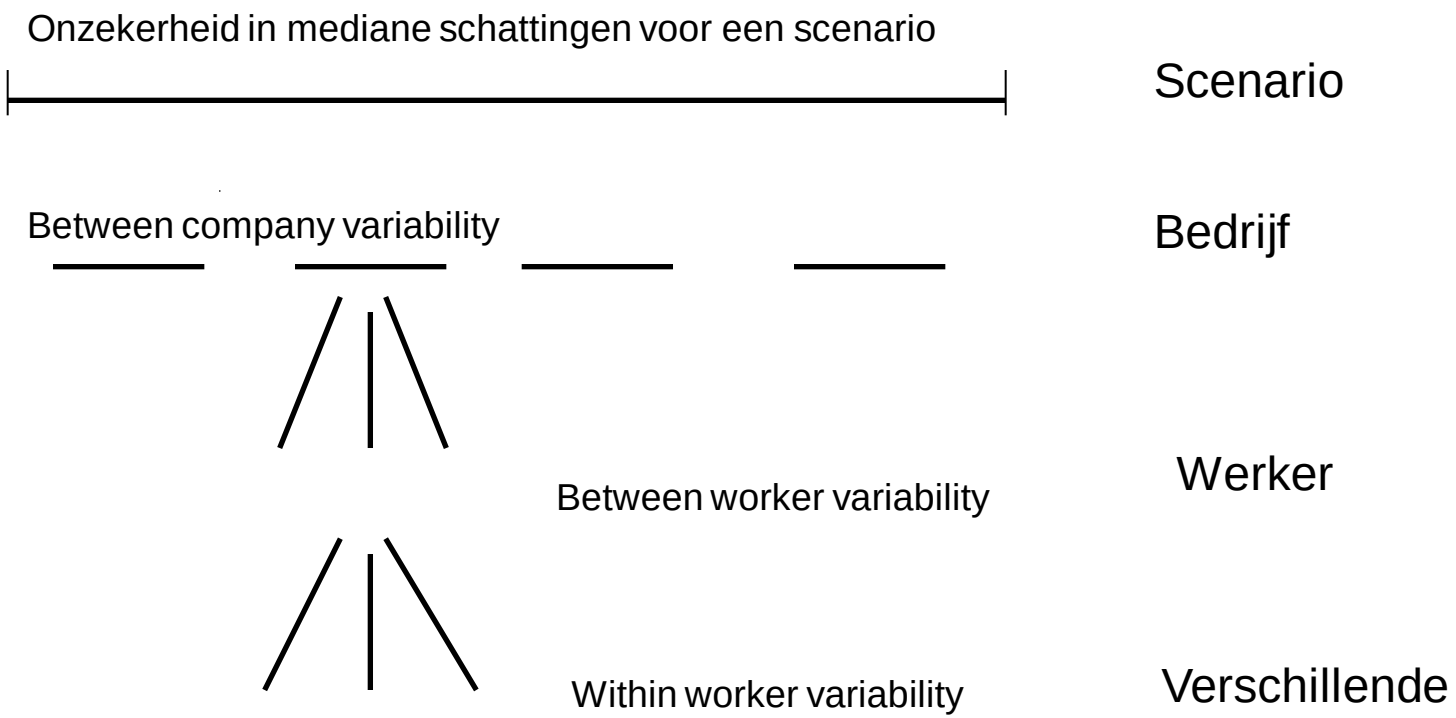

Abrasive dust
Measured exposure (mg/m3)
ART-score
UF 2.1 its


Dust
Measured exposure (mg/m˜)
ART-score
UF 4.4


Volatiles
Mesasured concentration (mg/m3)
ART score
UF 5.0


Mists
Measured concentration (mg/m3)
ART-score
UF 5.8

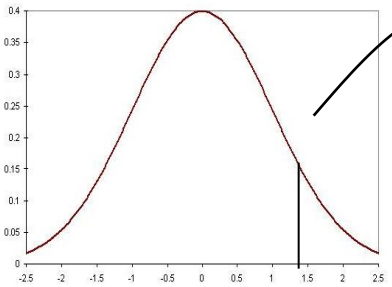
Mechanistisch model output



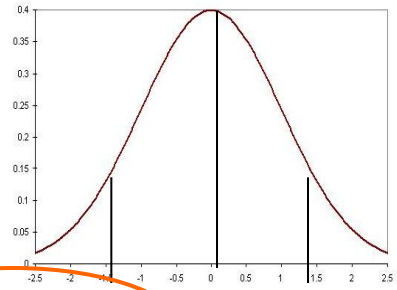
Mechanistisch model output

- Expliciete behandeling van onzekerheid en variabiliteit
  - *Percentiel van de distributie (variabiliteit)*
  - *Betrouwbaarheidsinterval (onzekerheid)*

Variabiliteit



90th, 75th, 50th percentile



Onzekerheid

Inter-quartile, 80 %, 90 %, 95 % CI

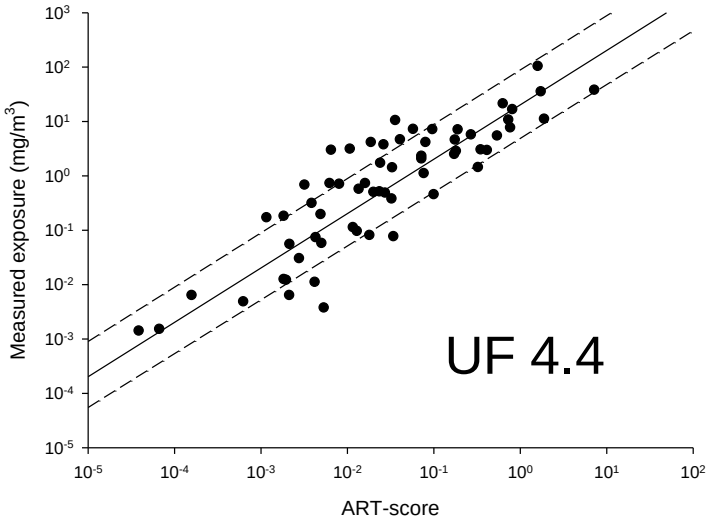
- **Het model geeft een blootstellingsschatting voor een scenario over bedrijven**

Validatie van het ART mechanistisch model

- Kloppen de blootstellingsschattingen van het mechanistisch model?
- Controle van de kalibratie resultaten
  - Schattingen
  - Onzekerheid
- Op het moment hebben we 2 van de 4 type blootstellingen gevalideerd:
  - Stof blootstellingen in pharmaceutische industrie
  - Blootstelling aan dampen

Validatie van het ART model voor stof blootstellingen

- Kalibratie van het ART model voor stofblootstellingen - geschatte GM van een scenario is met 90% betrouwbaarheid binnen een uncertainty factor (UF) 4.4 van de gemeten GM.



Validatie van het ART model voor stof blootstellingen

- 192 blootstellingsmetingen zijn verzameld van 16 verschillende blootstelling scenarios

NF and FF source	NF	Description	Score
Substance Emission Potential (E)	E	Extremely fine powder	1
Activity Emission Potential (H)	H	Transfer 0.1-1kg Careful Open process	0.09
Localised Controls (LC)	LC	Fume cupboard	0.01
General Ventilation (D)	D	10 ACH 300m³ room	0.8
Surface factor (Su)	Su	Demonstratable & effective housekeeping	0.001

$$C_t = (Su + C_{nf} + C_{ff})$$

$$C_{ff} = (E_{ff} * H_{ff} * Lc_{ff} * Seg_{ff}) * D_{nf} * Sep$$

$$C_{nf} = (E_{nf} * H_{nf} * Lc_{nf}) * D_{nf}$$

$$Su\ (Su_{factor} * (E * H * Lc * D))$$

Regressie model kalibratie

Relative score 0.006

GM=0.05 mg/m³

GM=0.03 mg/m3

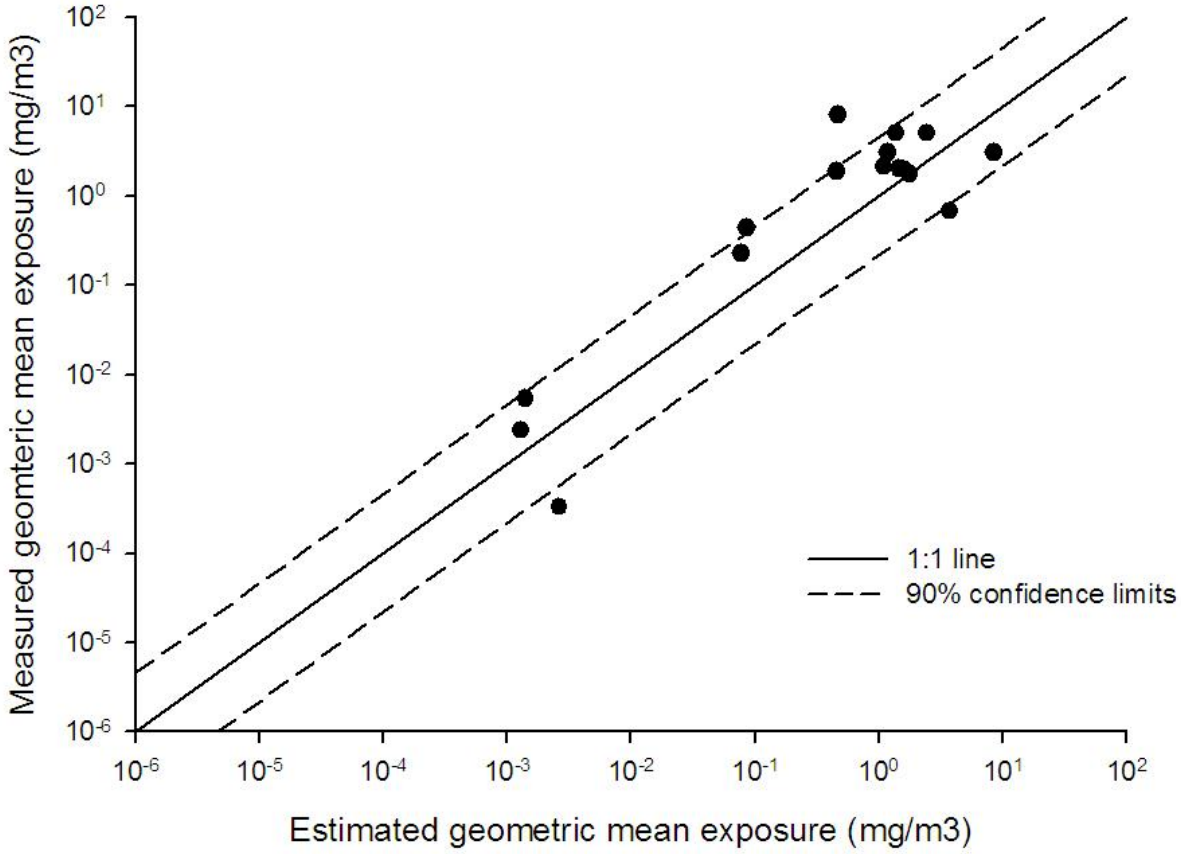
N=10

TNO innovation for life

Validatie van het ART model voor stof blootstellingen

	N	N <LOD	K	GM (mg/m³)	GSD	Estimate GM (mg/m³)	Bias	Factor difference (Estimate GM /GM)
Cleaning 1-10kg (dust)	7	0	1	5.03	2.3	2.42	-2.62	0.48
Dumping 1-10kg (dust) (DF room)	4	2	1	1.77	2.1	1.78	0.02	1.01
Dumping 1-10kg (dust) (GB)	66	6	3	0.002	5.3	0.001	-0.001	0.54
Dumping 1-10kg (dust) (LEV)	5	1	3	1.87	1.6	0.46	-1.41	0.25
Dumping 1-10kg (granules)	6	0	2	0.23	6.0	0.08	-0.15	0.34
Dumping >10kg (dust) (DF room)	6	0	1	2.11	1.3	1.09	-1.03	0.51
Dumping >10kg (dust) (LEV)	12	4	2	3.09	2.2	1.18	-1.91	0.38
Handling of slightly/limited contaminated (granules) (LEV)	7	0	1	0.01	2.0	0.001	-0.004	0.26
Handling of slightly/limited contaminated (paste)	3	0	1	0.44	3.3	0.09	-0.36	0.20
Handling of visible/substantial contamination (dust) (none & LEV)	3	0	1	5.07	1.8	1.37	-3.69	0.27
Movement & agitation >10kg (dust) (containment)	6	0	1	2.01	2.1	1.46	-0.55	0.72
Scooping 1-10kg (dust) (DF room)	7	0	2	1.98	2.0	1.59	-0.40	0.80
Scooping 1-10kg (dust) (LEV)	4	0	1	8.11	1.2	0.47	-7.64	0.06
Scooping <1kg (dust) (enclosing hoods)	44	21	3	0.00033	3.8	0.0026	0.0023	7.99
Vacuum cleaning 1-10kg (dust)	4	0	1	3.07	1.2	8.46	5.39	2.75
Vacuum cleaning <1kg (dust)	8	2	1	0.68	3.1	3.73	3.05	5.50

Validatie van het ART model voor stof blootstellingen

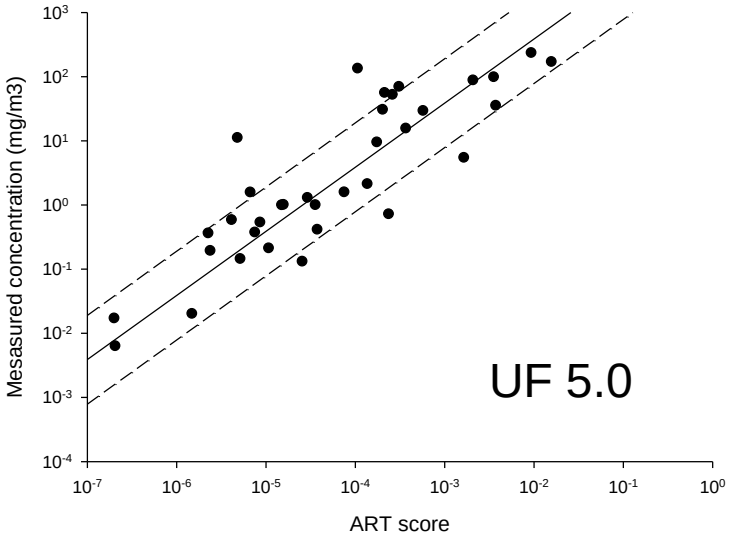


Resulten / conclusies validatie stof model

- De bias over de 16 scenarios was -32%, dit komt overeen met een onderschatting van de blootstelling door het model met een factor 1/3
- 90% van de scenarios zat binnen een uncertainty factor van 5.5
  - De UF gevonden in de kalibratie was 4.4
- Het model was dus niet zo precies als verwacht maar dit komt vermoedelijk door de kleine datasets (vaak metingen uit 1 bedrijf)

Validatie van het ART model voor dampen

- Kalibratie van het ART model voor stofblootstellingen - geschatte GM van een scenario is met 90% betrouwbaarheid binnen een uncertainty factor (UF) 5.0 van de gemeten GM.

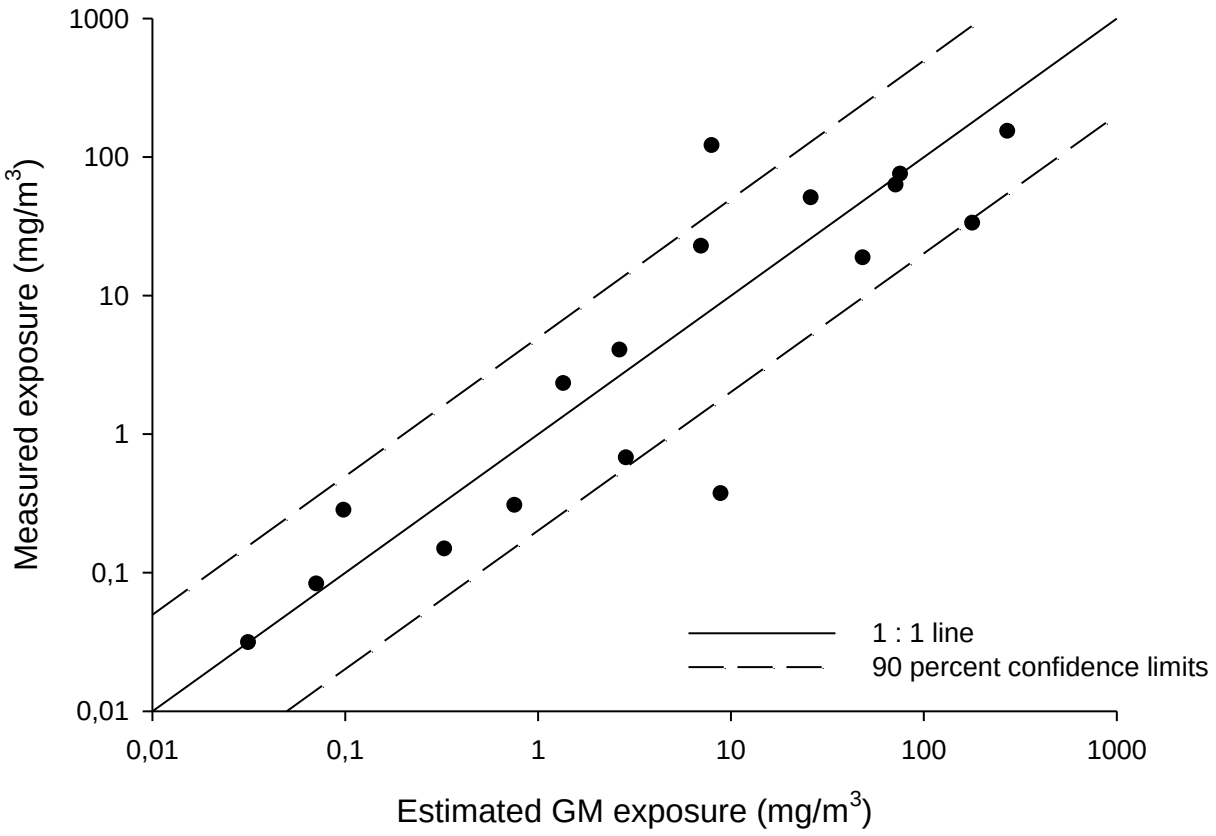


Validatie van het ART model voor dampen

679 personal inhalation measurements from 17 scenarios

Scenario	N	LOD	K	GM (mg/m^3)	GSD	Estimate GM (mg/m^3)	Bias	Factor difference (Estimate GM/ GM)
Bottom loading of storage tanks	5	0	3	0.28	4.02	0.10	-1.03	0.36
Bottom loading of tankwagens	39	0	11	0.15	3.97	0.33	0.82	2.26
Brushing/rolling paint (0.2% methyl ethyl ketoxine)	4	0	1	2.28	1.37	1.31	-0.56	0.57
Brushing/rolling paint (0.4% methyl ethyl ketoxine)	10	0	1	3.98	1.25	2.62	-0.42	0.66
Brushing/rolling paint (1.9% Xylene)	9	0	1	61.92	1.57	71.04	0.14	1.15
Brushing/rolling paint (7.3% Xylene)	5	0	1	151.07	1.41	272.94	0.59	1.81
Drum filling (out)	14	0	2	0.37	3.72	8.96	3.20	24.47
Inspection (out) (100% benzene)	5	0	4	0.03	3.72	0.03	0.03	1.03
Orthopeden <2 hours with LEV	14	0	6	119.07	3.68	8.04	-2.70	0.07
Orthopeden >2 hours with LEV	15	0	7	74.15	3.07	76.42	0.03	1.03
Pump calibration (out)	11	0	4	0.67	10.96	2.89	1.47	4.35
Refueling (out)	64	2	26	0.08	5.04	0.07	-0.13	0.88
Shoerepair <2 hours with LEV	138	0	14	22.38	2.70	7.08	-1.15	0.32
Shoerepair <2 hours without LEV	95	1	8	18.44	2.19	48.84	0.97	2.65
Shoerepair >2 hours with LEV	139	2	16	49.29	2.96	26.26	-0.63	0.53
Shoerepair >2 hours without LEV	30	0	7	32.79	1.96	180.81	1.71	5.51
Toploading (out) (benzene 2.5%)	82	0	20	0.34	5.75	0.76	0.81	2.26

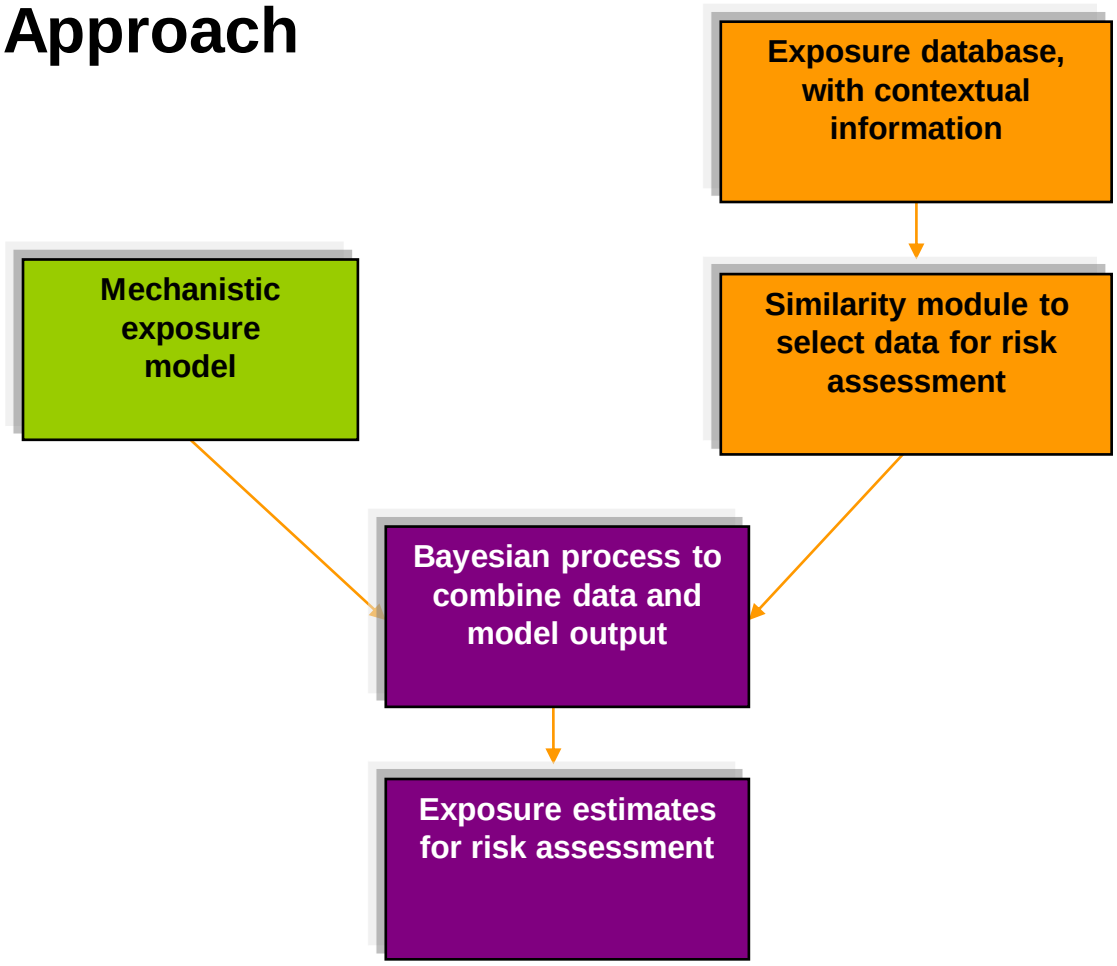
Validatie van het ART model voor dampen



Resultaten / conclusies validatie ART model voor dampen

- The bias over de 17 scenarios was 198% dit komt overeen met een overschatting van de blootstelling door het model met een factor 2
- 90% van de scenarios zat binnen een uncertainty factor van -3 tot 5.5
  - de UF gevonden bij de kalibratie was 5.0
- Het model was dus zo precies als gevonden in de kalibratie.

Samenvatting

- Het mechanistisch model van ART is ontwikkeld door verschillende instituten in Europa in samenwerking met industie
- Het mechanistisch model is gebasseerd op de laatste kennis op het gebied van arbeidshygiene
- Het mechanistisch model is gekalibreerd met ongeveer 2000 metingen
- De uitkomsten van het mechanistisch model zijn transparant en houden rekening met de variabiliteit gevonden in metingen en onzekerheid in de schattingen van het mechanistisch model
- De schattingen van het mechanistisch model voor blootstellingen aan stof en dampen zijn gevalideerd met ongeveer 1000 metingen

ART Approach