

# Progetto di un modello di stima dell'esposizione umana a sostanze chimiche in ambiente indoor

Milano 10 gennaio 2008

Leonello Attias  
Istituto Superiore di Sanità

The screenshot shows a web browser window displaying the OECD's Database on Chemical Risk Assessment Models. The page title is "OECD's Database on Chemical Risk Assessment Models". Below the title, there are navigation links: "View by", "Models Listed By All Countries", "Models Listed By Country", "Models Listed By Property / Effect", and "Contact Names Listed Per Model". The "Contents:" section includes a disclaimer: "This searchable database includes information on models (computerised or capable of being computerised) that are used by OECD Member governments and industry to predict health or environmental effects (e.g., QSARs), exposure potential and possible risks. The methods described here have not been evaluated or validated by OECD, and no endorsement of the methods by OECD should be inferred by the inclusion of certain methods in this database (Disclaimer)." Below this, there is a section titled "To add Information on Models Not in the Database:" which provides instructions on how to submit new models to the database. It mentions that surveys submitted to the Secretariat will be reviewed by OECD's Issue Team on Tools for R&D Screening and/or OECD's Task Force on Environmental Exposure Assessment Task Force before the information is added to the database. The page also includes a link to download an Acrobat Reader and a section for "Comments, questions or corrections:" with contact information for Maggie Wilson. A "Disclaimer:" section at the bottom states that the database is intended as an information resource only and is not intended to present a comprehensive evaluation of these methods.

http://webdomino1.oecd.org/connet/env/models.nsf - Microsoft Internet Explorer

Indirizzo: http://webdomino1.oecd.org/connet/env/models.nsf

## OECD's Database on Chemical Risk Assessment Models

**View by**    [Models Listed By All Countries](#)    [Models Listed By Country](#)    [Models Listed By Property / Effect](#)    [Contact Names Listed Per Model](#)

### Contents:

This searchable database includes information on models (computerised or capable of being computerised) that are used by OECD Member governments and industry to predict health or environmental effects (e.g., QSARs), exposure potential and possible risks. **The methods described here have not been evaluated or validated by OECD, and no endorsement of the methods by OECD should be inferred by the inclusion of certain methods in this database (Disclaimer).**

**To add Information on Models Not in the Database:** Complete the appropriate survey(s) and submit to the OECD Secretariat for that survey:

- For health or environmental effects models predicting physical / chemical properties, chemical and fate properties, and human and aquatic hazard effects, complete [Survey A](#) and send to [env.riskassessment@oecd.org](mailto:env.riskassessment@oecd.org).
- For models predicting human health or environmental exposure potential and potential environmental, worker or consumer risk, complete [Survey B](#) and send to [env.riskassessment@oecd.org](mailto:env.riskassessment@oecd.org).

If the model predicts health or environmental effects AND exposure potential and possible risk, complete BOTH [Survey A](#) and [Survey B](#), and send to [env.riskassessment@oecd.org](mailto:env.riskassessment@oecd.org).

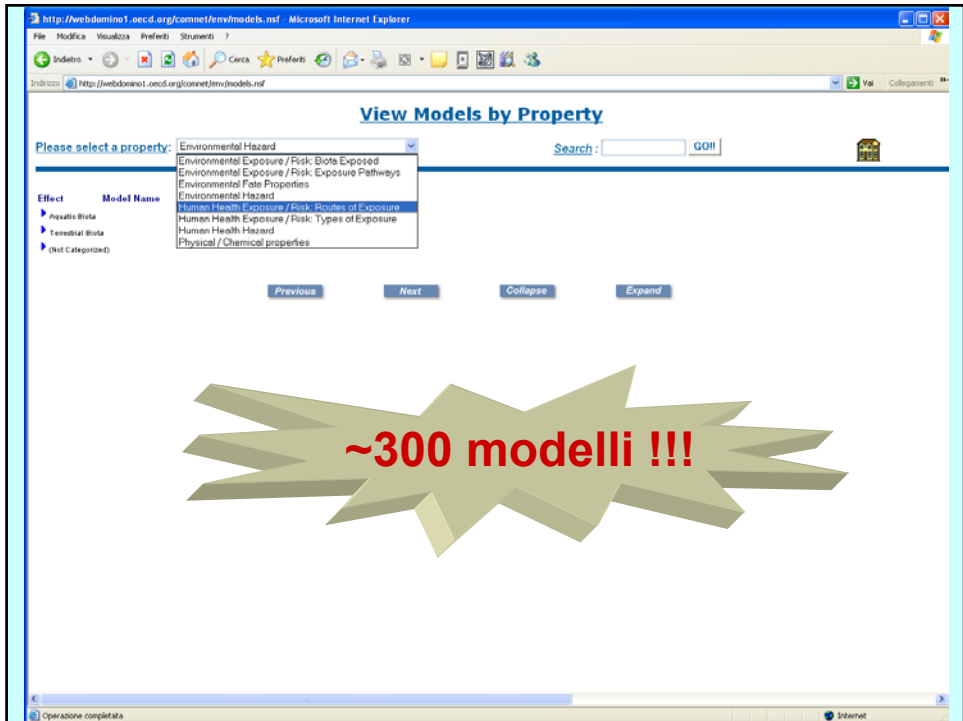
Surveys submitted to the Secretariat will be reviewed by OECD's Issue Team on Tools for R&D Screening and/or OECD's Task Force on Environmental Exposure Assessment Task Force before the information is added to the database.

The surveys are available in WORD97 and/or in PDF. In order to read the PDF file, you will need to have an Acrobat Reader. If you do not have the programme, you can download it for free by clicking here: [Get Acrobat Reader](#)

**Comments, questions or corrections:** If you would like to suggest a correction to the database, or if you have any questions or comments, please contact the project leader, [Maggie Wilson](#).

**Disclaimer:**

This database is intended as an information resource only, and is not intended to present a comprehensive evaluation of these methods. OECD is not recommending these methods as being the best or only methods available. The users should conduct their own investigation of the methods to determine if the



## Obiettivi

- Sviluppo di un modello che permetta di effettuare stime delle concentrazioni di sostanze chimiche rilasciate per evaporazione in ambiente indoor.
- Applicazione del modello mediante lo sviluppo di un software di utilizzo relativamente semplice.
- Validazione del modello
- Utilizzo del modello per la stima dell'esposizione umana in ambiente indoor prevista nell'ambito delle strategie comunitarie di valutazione del rischio e per misure di prevenzione.

## Scenario "Evaporazione da sostanza pura"

### Modo a rilascio per evaporazione

Descrive il rilascio di un composto in aria per evaporazione dalla superficie del prodotto (es. vasca, secchio, contenitore). Durante questo tempo il composto viene simultaneamente rimosso dall'aria della stanza mediante ventilazione.

Il tasso di evaporazione è legato alla differenza di tensione di vapore nell'aria della stanza e la tensione di vapor saturo del composto. Il tasso di evaporazione è proporzionale a questa differenza di pressione e dipende dalla superficie del prodotto e dal tasso di trasferimento di massa. Quest'ultimo è una misura della velocità di rimozione della sostanza evaporata dalla superficie del prodotto.



$$C_{\text{sat}} = \frac{10^6 \cdot V P_r \cdot MW}{24.45 \cdot (298.15 / T_{\text{air}})}$$

## Scenario “Evaporazione da sostanza pura”

### PARAMETRI DI INPUT

Tasso di ventilazione del locale	m <sup>3</sup> /min
Concentrazione ambientale (esterna)	mg/m <sup>3</sup>
Superficie di rilascio	m <sup>2</sup>
Volume del locale	m <sup>3</sup>
Tempo di esposizione	min
Conc. Iniziale	mg/m <sup>3</sup>
Peso Molecolare della sostanza	g/mole
Pressione di vapore a 25 °C	Pa
Temperatura di utilizzo del locale	K

### INTERMEDI DI CALCOLO

Coefficiente di trasferimento di massa Kt	m/min
Entalpia di vaporizzazione a 25°C	kJ mol <sup>-1</sup>
Entalpia di vaporizzazione alla temperatura di utilizzo	J mol <sup>-1</sup>
Pressione di vapore alla temperatura di utilizzo	Pa

Coefficiente di trasferimento di massa  $K_t$

$$K_t = (0.5)^3 \sqrt{\frac{18}{MW}} \quad \text{Thibodeaux}$$

Langmuir

$$K_t = \sqrt{\frac{R \cdot T}{2\pi \cdot MW}}$$

Entalpia di vaporizzazione  $\text{kJ mol}^{-1}$

E' definita come il calore richiesto per vaporizzare una mole di sostanza al suo punto di ebollizione a pressione standard (101325 Pa)

Tensione di vapore a temperatura T (Pa)

$$VP_T = VP_{25} \cdot e^{E_v / R \cdot (1/298.15 - 1/T)}$$

Concentrazione in aria sostanza ( $\text{mg/m}^3$ )

Jayjock (1994)

$$C = (10^3) \frac{(K_t)(MW)(AREA)(VPP)}{(R)(TL)((K_t)(AREA) + Q')} \cdot (1 - e^{-((K_t)(AREA) + Q')(t/V)})$$

Coefficiente di trasferimento di massa  $K_t$

$$K_t = (0.5)^3 \sqrt{\frac{18}{MW}}$$

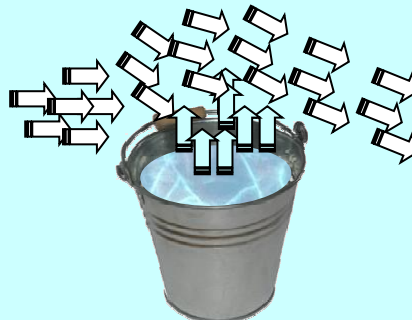
Approssimazione di Thibodeaux, che descrive l'evaporazione di una sostanza dall'acqua

Il coefficiente di trasferimento di massa viene determinato dalla velocità con cui il composto viene trasportato lontano dalla superficie di evaporazione

In generale questo trasporto dipenderà dalla velocità di diffusione del composto attraverso l'aria e dalla movimentazione dell'aria al di sopra della superficie.

Espressione di Langmuir

$$K_t = \sqrt{\frac{R \cdot T}{2\pi \cdot MW}}$$



Entalpia di  
vaporizzazione  $\text{kJ mol}^{-1}$

E' definita come il calore richiesto per vaporizzare una mole di sostanza al suo punto di ebollizione a pressione standard (101325 Pa)

$$\Delta H \rightleftharpoons \Delta H'$$

$$\Delta H(T) = 1000(\Delta H(298K) - 0.054(T - 298)) \quad \text{Price, 2001}$$

$$VP_T = VP_{25} \cdot e^{\Delta H(T)/R \cdot (1/298.15 - 1/T)}$$

Nel caso di una sostanza pura, il dato utilizzato per la tensione di vapore è quello disponibile in letteratura a 25 °C ovvero a condizione standard. La tensione di vapore tende a variare con la temperatura ambientale secondo la seguente relazione:

Tensione di vapore a temperatura T (Pa)

$$VP_T = VP_{25} \cdot e^{\Delta H(T)/R \cdot (1/298.15 - 1/T)}$$

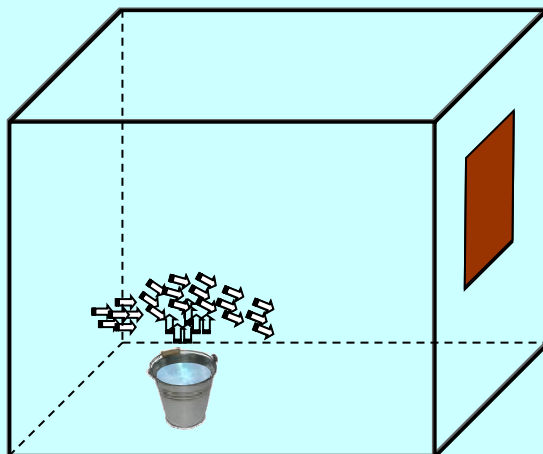
## Scenario "Evaporazione da miscela"

### PARAMETRI DI INPUT

Tasso di ventilazione	m <sup>3</sup> /min
Concentrazione ambientale	mg/m <sup>3</sup>
Superficie di rilascio	m <sup>2</sup>
Volume del locale	m <sup>3</sup>
Tempo di esposizione	min
Conc. iniziale	mg/m <sup>3</sup>
Peso Molecolare della sostanza	g/mole
Pressione di vapore parziale a 25 °C	Pa
Peso Molecolare della matrice	g/mole
Concentrazione della sostanza	mg/kg
Temperatura di utilizzo del locale	K

### INTERMEDI DI CALCOLO

Coefficiente di trasferimento di massa Kt	m/min
Entalpia di vaporizzazione a 25°C	kJ mol <sup>-1</sup>
Entalpia di vaporizzazione alla temperatura di utilizzo	J mol <sup>-1</sup>
Concentrazione della matrice	mg/kg
Pressione di vapore parziale a 25 °C	Pa
Pressione di vapore parziale ad una data temperatura	Pa



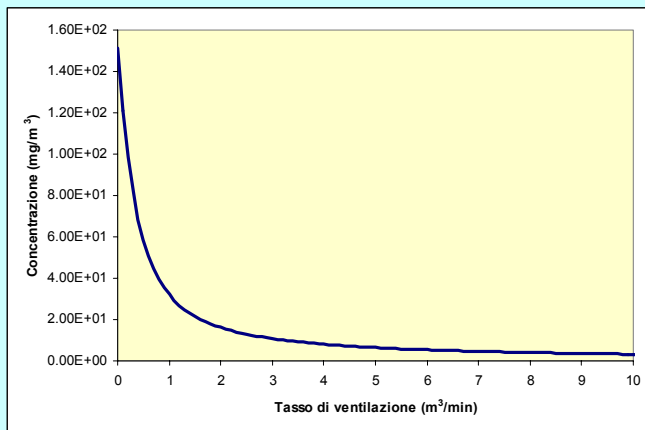
Per il tasso di ventilazione indoor è stato preso come riferimento il lavoro pubblicato dall' US Environmental Protection Agency, Exposure Factors Handbook (USEPA, 1989), dove sulla base di statistiche regionali combinate, gli autori suggeriscono un valore per il tasso di ricambio di aria per ora (ACH) di 0.18 e 0.45 rispettivamente come 10mo e 50mo percentile

## OUTPUT PER TUTTI GLI SCENARI

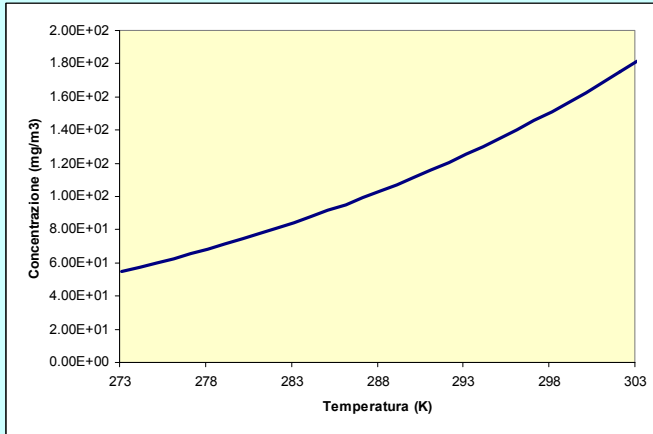
<b><i>Esposizione inalatoria</i></b>	$mg/m^3$
<b>Dose inalatoria</b>	$mg\ kg^{-1}\ gg^{-1}$
<b><i>Esposizione Cutanea indiretta</i></b>	$mg/cm^3$
<b>Dose Cutanea <i>indiretta</i></b>	$mg\ kg^{-1}\ gg^{-1}$
<b><i>Esposizione Orale indiretta</i></b>	$mg/cm^3$
<b>Dose Orale <i>indiretta</i></b>	$mg\ kg^{-1}\ gg^{-1}$



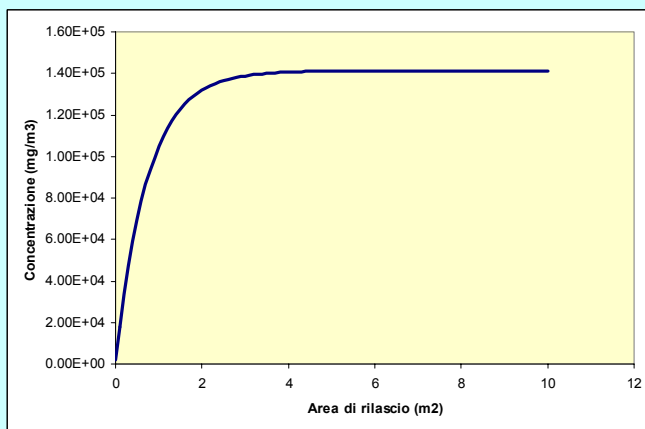
## Analisi della sensibilità del modello



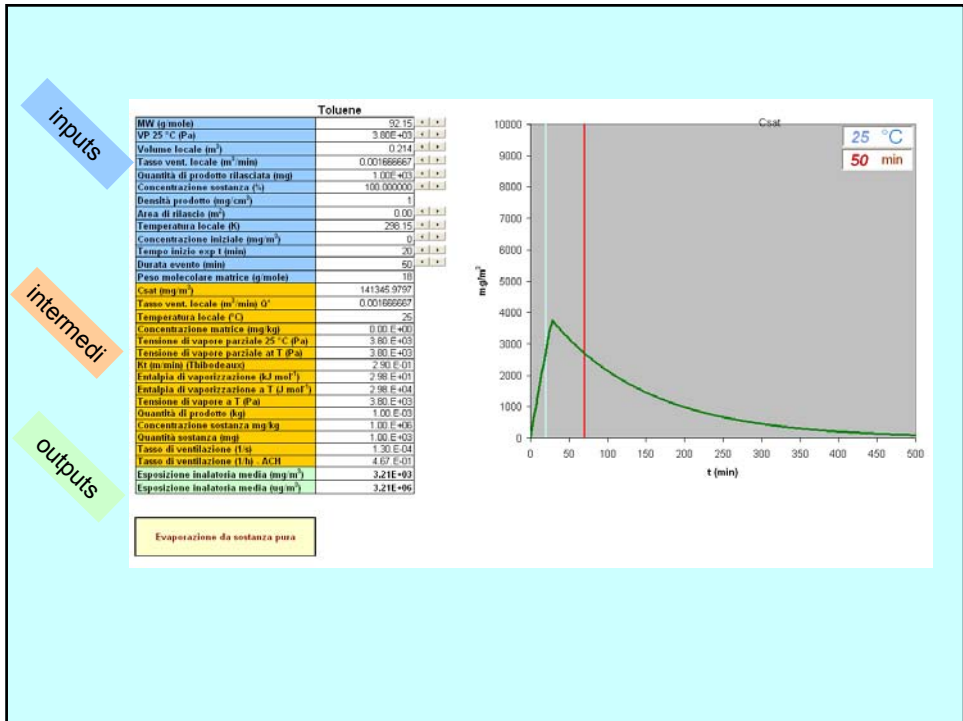
Tasso di ventilazione



Temperatura



Area di rilascio

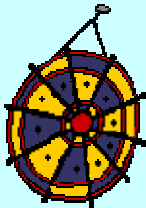


## Validazione del modello

### Validazione mediante utilizzo di dati di letteratura

- Misurazioni specifiche indoor
- Stime pubblicate derivanti dall'utilizzo di altri modelli

### Validazione mediante utilizzo di dati misurati ad-hoc



Descrizione processo di validazione  
mediante l'utilizzo di dati misurati *ad-hoc*

Simulazione ambiente indoor

Sostanza

Superfici di evaporazione

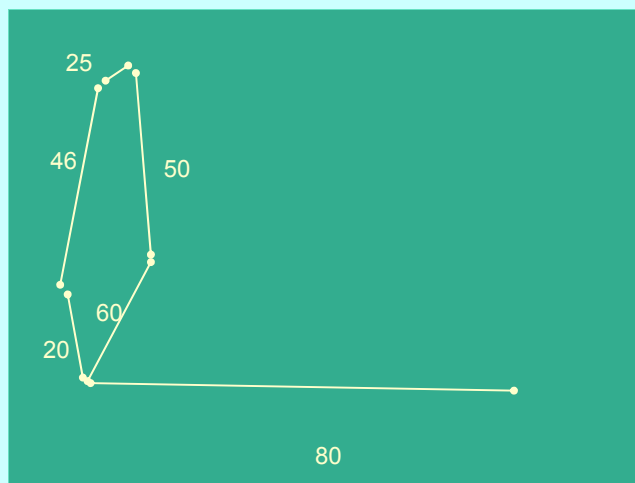
Ricambio aria

Metodo di determinazione e tipo di analisi

Tempi di misurazione

Validazione statistica

Simulazione ambiente indoor



0.214 m<sup>3</sup>



## Sostanza utilizzata

	MW (g/mole)	VP (Pa)	Sol (mg/l)	logKow
<b>Toluene</b> <chem>Cc1ccccc1</chem>	92.14	3.79E+03	526	2.73

**F; R11 - Repr. Cat. 3; R63 - Xn; R48/20-65 - Xi; R38 - R67**

R11: Facilmente infiammabile

R38: Irritante per la pelle.

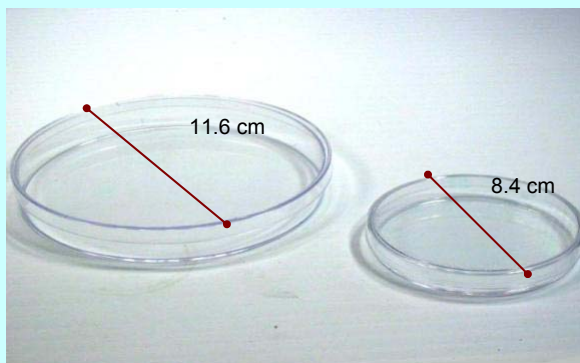
R48/20: Nocivo: pericolo di gravi danni per la salute in caso di esposizione prolungata per inalazione.

R63: Possibile rischio di danni ai bambini non ancora nati.

R65: Nocivo: può causare danni ai polmoni in caso di ingestione.

R67: L'inalazione dei vapori può provocare sonnolenza e vertigini.

## Superfici di evaporazione



## Descrizione processo di validazione

Dispositivo di rilevazione GDA 2  
(Gas Detector Array 2)  
WMA AIRSENSE  
Analysentechnik, GmbH

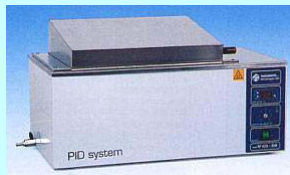


### Tipo di analisi

Uno spettrometro a mobilità ionica, un fotoionizzatore (10.2 eV), una cella elettrochimica e due MOS (metal oxide semiconductor)

## Descrizione processo di validazione

Ricambio aria e metodo di determinazione **mediante pompa di aspirazione**



## Conclusioni 1/4

Il modello sviluppato nel corso di questa ricerca permette di effettuare delle stime relative alle concentrazioni in aria di sostanze chimiche rilasciate in ambiente indoor. Il modello è sensibile a diversi parametri quali le proprietà chimico-fisiche della sostanza in esame e le diverse caratteristiche dell'ambiente in cui la sostanza viene rilasciata come la superficie di evaporazione, la temperatura, il volume ambientale e il tasso di ricambio dell'aria.

## Conclusioni 2/4

E' stata eseguita una validazione del modello in tre fasi. La prima fase della validazione è costituita dalla comparazione dei valori di concentrazione misurati in studi disponibili nella letteratura scientifica con i risultati ottenuti mediante l'utilizzo del modello settato con le stesse condizioni riportate per gli studi. La seconda fase di validazione è stata effettuata mediante la comparazione del modello con le stime di concentrazione effettuate mediante l'utilizzo di altri modelli comunemente utilizzati in ambito di valutazione del rischio. La terza ed ultima fase di validazione è quella legata all'utilizzo di dati ottenuti da misurazioni specifiche (mediante simulazioni effettuate con Toluene) e alla loro comparazione con le stime effettuate mediante l'utilizzo del modello.

## Conclusioni 3/4

L'analisi dei risultati del processo di validazione ha evidenziato una significativa sovrapposizione dei valori calcolati con il modello e i dati relativi alle **prime due fasi** della validazione.

Per quanto concerne la **terza fase**, i dati relativi alle misurazioni effettuate con il Toluene sono relativi esclusivamente ai primi minuti di evaporazione della sostanza. Ciò è principalmente legato ai **limiti strumentali**. Il modello applicato considerando un **coefficiente di trasferimento di massa conservativo**, ha mostrato di sovrastimare le concentrazioni misurate di un fattore medio di 4.8 (2.84 – 7.31). L'analisi delle particolari condizioni sperimentali e l'osservazione dell'andamento dell'evaporazione durante le varie simulazioni indicano che alcuni fattori quali la minima quantità di sostanza utilizzata, la staticità dell'aria all'interno del box di simulazione, le microimperfezioni del vetro delle piastre utilizzate e l'impossibilità di effettuare le simulazioni in condizioni di perfettamente piane, influenzano in modo evidente il tempo di evaporazione della sostanza.

In particolare, alla luce delle considerazioni effettuate sull'influenza della velocità dell'aria sul tempo di evaporazione, si è ritenuto utile apportare un fattore di correzione legato alla staticità delle condizioni sperimentali. Ciò ha permesso di ottenere con il modello delle stime significativamente sovrapposibili ai valori ottenuti dalle misurazioni.

## Conclusioni 4/4

Si ritiene pertanto che il modello possa essere considerato un valido strumento per effettuare delle stime di esposizione in ambiente indoor; l'utilizzatore dovrà in ogni caso effettuare le opportune considerazioni legate allo specifico scenario in esame.



**“2 Giornate REACH:  
Prepararsi Operativamente al  
Nuovo Regolamento”  
Milano, 18-19 Maggio 2006  
Federchimica-AssICC - Sala “G. Orlando”  
Corso Venezia, 47/49**