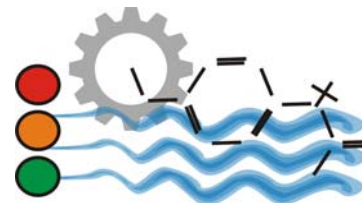


Ontwikkeling van een geïntegreerde databank voor het beleid bij accidentele lozingen

Bram Versonnen
Katrien Arijs
Marnix Vangheluwe



Jan Mees
Ward Vandenberghe
Daphne Cuvelier
Bart Vanhoorne



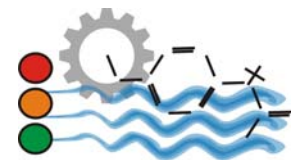
Colin Janssen
An Ghekiere



Ondersteund door het
Federaal Wetenschapsbeleid

Overzicht

- **Doelstellingen**
- **Uitgevoerde taken**
 - **Selectie stoffen**
 - **Data verzamelen**
 - **Dataselectie**
 - **Databank**
- **Modelleren**
- **Planning**



Doelstellingen

Ontwikkelen eenvoudig interpreteerbare, betrouwbare, up-to-date databank met specifiek mariene info

- **Fase I: identificatie stoffen**
lijsten, vervoer, criteria, 100 000 → 5 000 → 400 **ok**
- **Fase II: data collectie**
fys-chem, ecotox, humaan, marien, trofische niveaus **± ok**
- **Fase III: evaluatie en interpretatie**
kwaliteit, zoet → marien, accumulatie, gedrag stoffen **± ok**
- **Fase IV: relationele databank en GUI**
betrouwbaar, bevraging, pictogrammen, eenvoudig, uitbreidbaar **± ok**

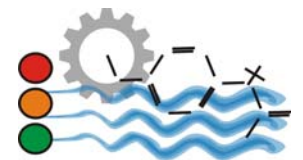


Andere taken

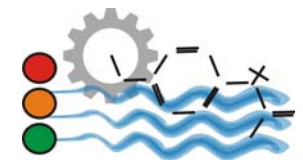
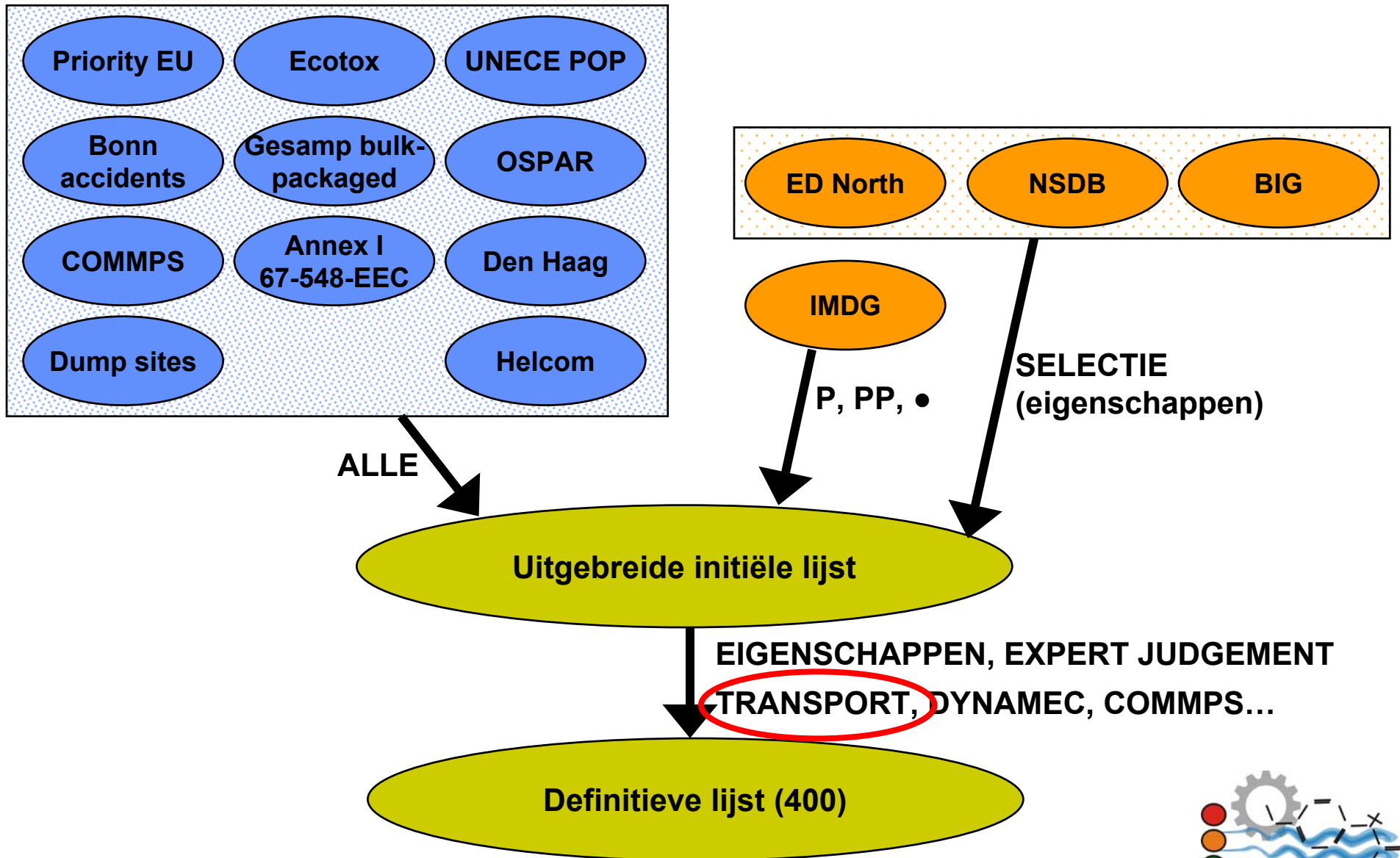
- Website => vertaling inleiding naar Frans **ok**

- Clustering: RAMA-DIMAS
 - Marine Incidents Management Cluster (MIMAc)
 - Optimalisatie communicatie en interactie
 - Symposium (9-10 oktober 2006), geïntegreerd rapport
 - <http://www.vliz.be/projects/mimac/>

- MIMAc-samenwerking: transportgegevens (kwantiteit, frequentie)



Selectie stoffen



Selectie stoffen: transportgegevens

Geregistreerde hoeveelheid (ton)

VN_NR (as in Ivs db)	Name material (as in IVS db)	IMO of andere code	RAMA Cargo Class	Totale hoeveelheid	gemiddelde hoeveelheid	Aantal reizen		
						met een hoeveelheid opgegeven	totaal aantal reizen met deze productomschrijving	
	COAL TAR	9		1	4,920.00	4,920.00	1	4
1017		2.3		1	3,934.31	1,311.44	3	3
1574	AT/CALCIUMARS ENIET,MENGSEL	6.1		1	3,000.00	3,000.00	1	1
3267	MONIUMHYDROXI	8		1	2,500.00	2,500.00	1	1
1541	YDRINE	6.1		1	2,300.00	766.67	3	3
2282	HEXANOLEN	3		1	1,830.00	1,830.00	1	1
2346	BUTAANDION	3		1	1,500.10	750.05	2	2
1111	1-PENTAANTHIOL	3		1	1,071.00	357	3	3
1017	CHLOOR	2.3		1	1,042.87	30.67	34	44
1300	VANGMIDDEL,V.P	3		1	1,000.40	500.2	2	2
1575	E	6.1		1	624	624	1	1
	NZENE ANNEX 2	CAT A		1	600	600	1	1
1649	VOOR BENZINE	6.1		1	579	289.5	2	2
1897	THYLEEN	6.1		1	558.7	139.67	4	7



Uitgevoerde taken: fase 2, 3, 4

➤ Verzamelen gegevens

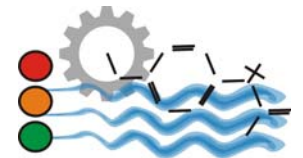
- Fysico-chemie
- Ecotox
- Humaan

➤ Kwaliteit gegevens: betrouwbaarheid data, per stof

- Hoge kwaliteit
- Gemiddelde kwaliteit
- Lage kwaliteit (b.v. geen standaardtesten, te weinig gegevens...)

➤ Ontwerp databank

- Invoeren/bewaren gegevens
- Lay-out databank + output
- ‘modellering’: milieuconcentraties, effectconcentraties



Verzamelen gegevens

➤ Fysico-chemie

- ECB-ESIS:
 - RAR European Commission
 - IUCLID Chemical Data sheet
- Chemfinder + peer reviewed literature

➤ Ecotox

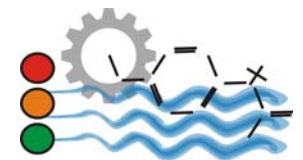
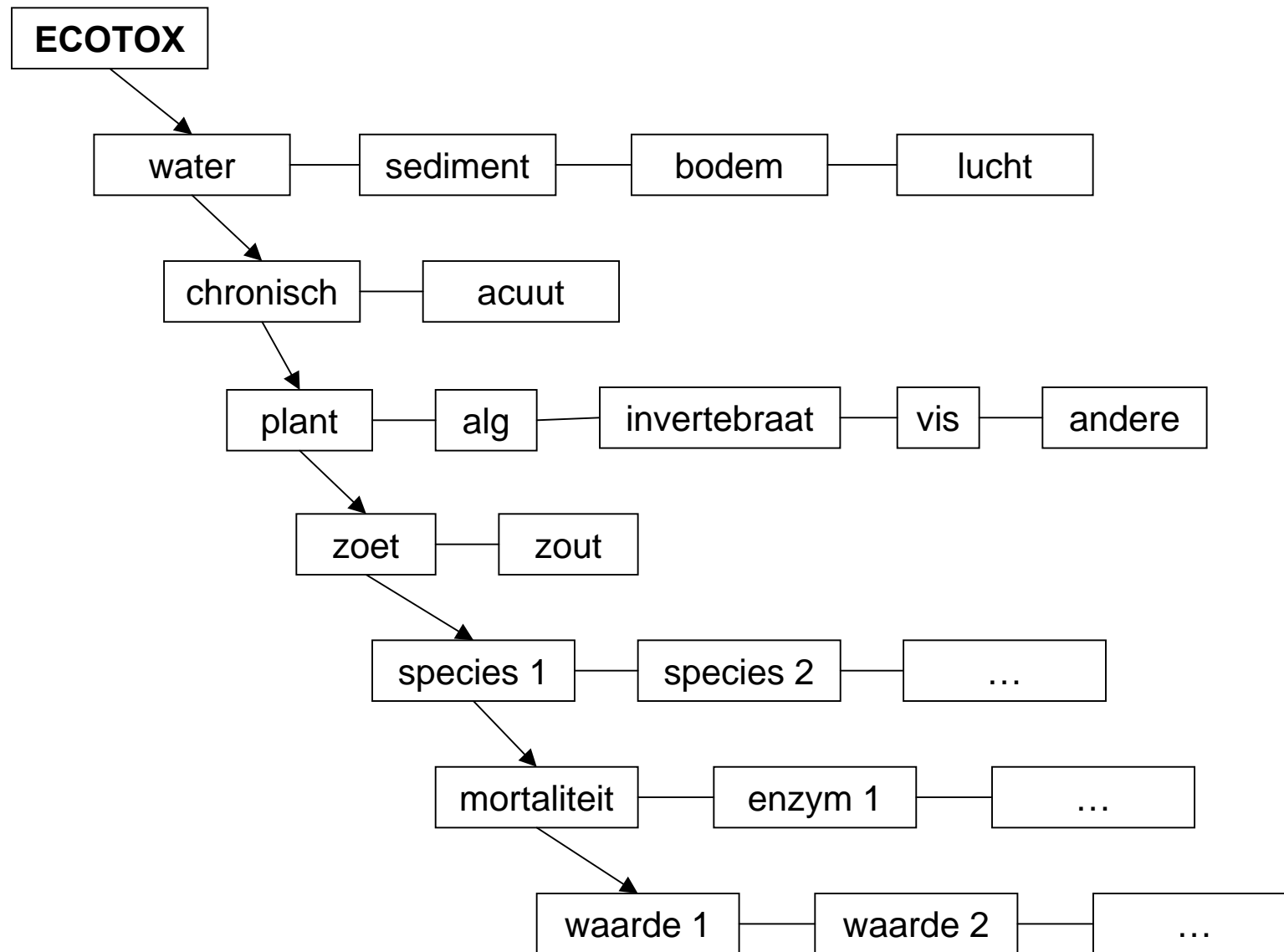
- RAR
- Indien RAR niet beschikbaar: US-EPA ECOTOX database als startpunt (enkel peer reviewed data)
- Web of Science (peer reviewed literature)

➤ Humaan

- ECB-ESIS



Lay-out databank: ecotox (1)



Lay-out databank: ecotox (2)

➤ Acute + chronische toxiciteit:

- plant
- alg
- invertebraat
- vis
- andere

➤ Bioconcentratie: K_{ow}

➤ Data: weinig tot tientallen per stof

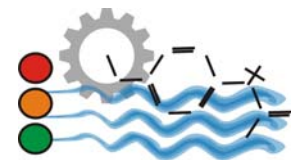
B.v. graan, kokos-olie (geen data) ↔ aniline:

- Water: > 60 acuut, 10 chronisch
- Sediment: enkele
- Lucht: geen
- Bioconcentratie: enkele



Voorstelling databank

➤ **Access**



MS Sans Serif 8 B I U

ChemObjID: 4 Formula: H2SO4 Note/reason for inclusion: Products of "Paardenmarkt", "Spills" and "Priority lists"

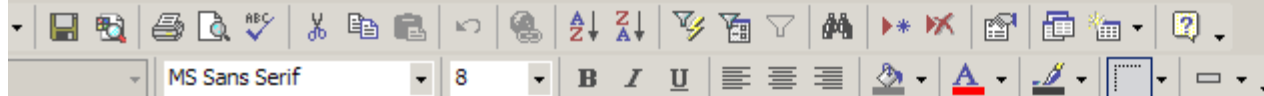
CAS: 5888-89-5

Parent Object: DataQuality:

Refresh Combos Add/edit references

Name UN Phys-Chem Ecotox Human GESAMP Hazard profile

Chemical Name	Sulphuric acid	Name Type	Common name
Language	English	Note	
Chemical Name	zwavelzuur	Name Type	Common name
Language	Dutch	Note	
* Chemical Name		Name Type	
Language		Note	



ChemObjID
4

Formula

H2SO4

Note/reason for inclusion

Products of "Paardenmarkt", "Spills" and "Priority lists"

Refresh Combos

CAS 5888-89-5

Add/edit references

Parent Object

DataQuality

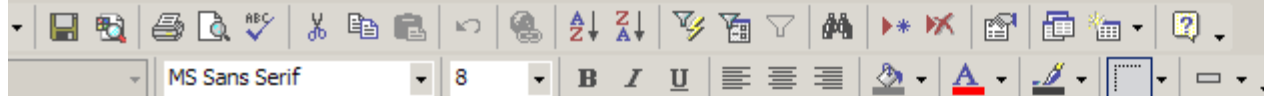
Name UN Phys-Chem Ecotox Human GESAMP Hazard profile

Physico - Chemical Parameter	Value	Unit
Physical state	liquid	dimensionless
Reference	IUCLID	
Note		
Physico - Chemical Parameter	Value	Unit
Melting point	11	°C
Reference	IUCLID	
Note		
Physico - Chemical Parameter	Value	Unit
Boiling point	300	°C
Reference	IUCLID	
Note		
Physico - Chemical Parameter	Value	Unit
Relative density	1.83	g/cm ³ at 20 °C
Reference	IUCLID	
Note		
Physico - Chemical Parameter	Value	Unit
Vapor pressure	0.0001	hPa at 20°C
Reference	IUCLID	
Note		

rd: 1 van 11

ulierweergave

NUM



ChemObjID 4 Formula H2SO4

Note/reason for inclusion Products of "Paardenmarkt", "Spills" and "Priority lists"

Refresh Combos Add/edit references

CAS 5888-89-5 Parent Object

DataQuality

Name UN Phys-Chem Ecotox Human GESAMP Hazard profile

Species/other Crangon crangon

Water type Salt Fresh

Add or edit species and/or vernaculars

Ecotox Exposure Type Acute/prolonged toxicity Compartment Water BioType Invertebrate

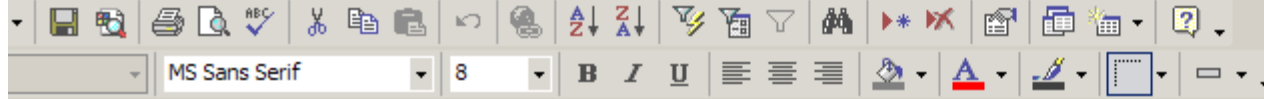
Values

Exposure time 96 hour(s) Unit hour(s) Value 42 Unit dimensionless Concentration EC50 Analytics EC50 Effect Reference IUCLID Note

Record: 1 van 1

Record: 1 van 2

Record: 1 van 11



Species name

AphiaID

Carcinus maenas

107381

Default Compartment

Default BioType

Default Water type

Water

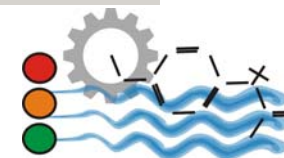
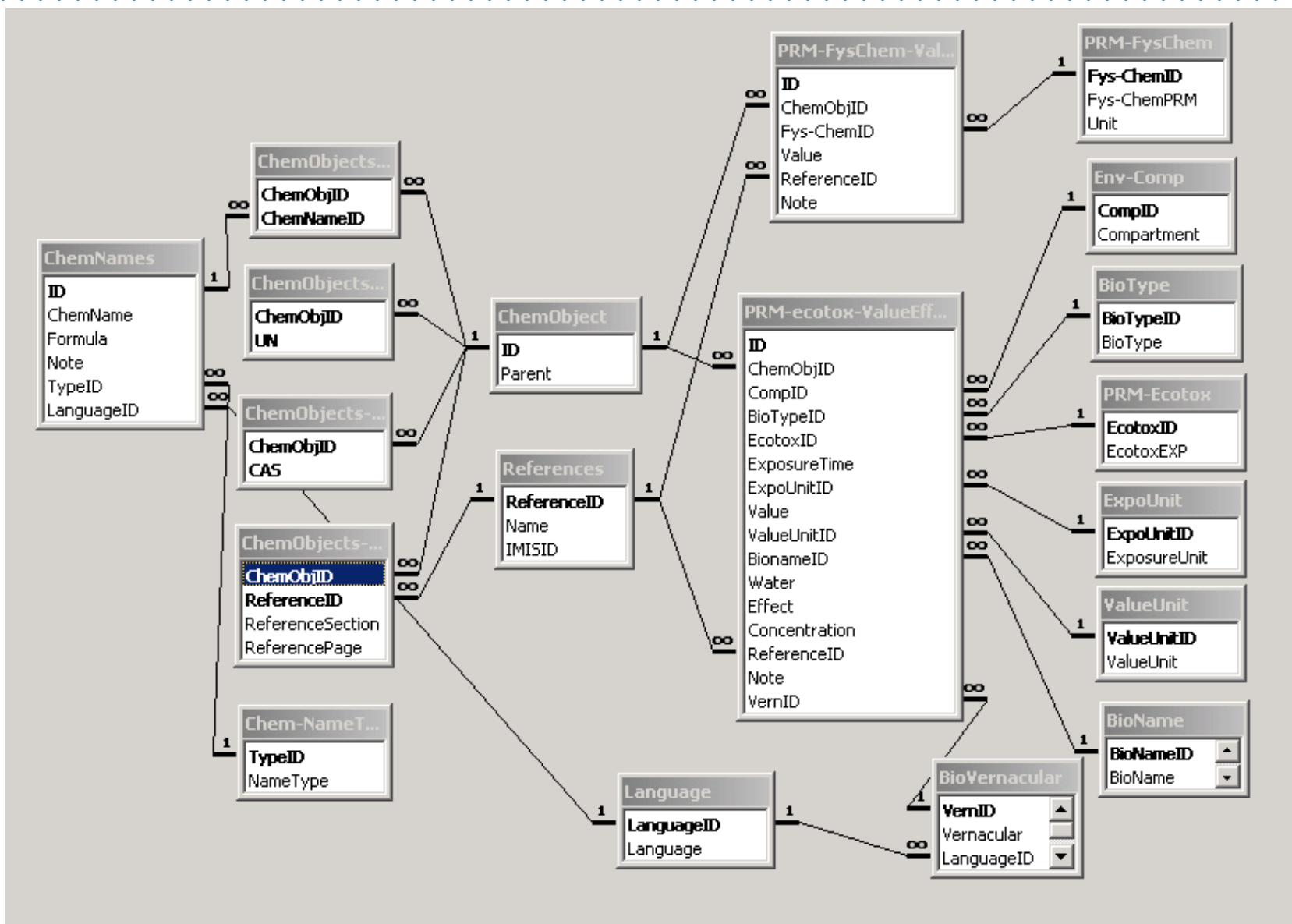
Invertebrate

Salt

Fresh

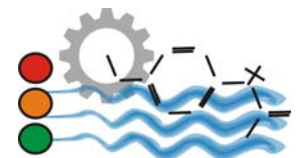
Vernaculars:

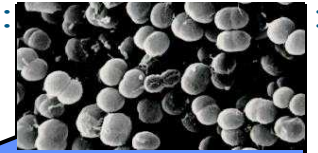
gewone strandkrab	Language	Dutch
crabe vert	Language	French
shore crab	Language	English
Carcinus granulatus	Language	Latin
gewone krab	Language	Dutch
landkrab	Language	Dutch
steenkrab	Language	Dutch
strandkrab	Language	Dutch
green crab	Language	English



Dataverwerking, modelleren (1)

- Na ingeven data, wordt gemodelleerd (effecten, blootstelling)
- Blootstelling: inschatting van water-/sediment-/luchtconcentratie bij lozing op zee (op basis van fysico-chemie)
- Potentieel geAffecteerde Eractie (PAF)
 - Gebaseerd op SSD aanpak (Soorten SensitiviteitsDistributie): een 'ruwe' SSD wordt gebruikt.
 - Schatting van het % soorten dat een negatieve impact ondervindt bij een bepaalde milieuconcentratie
 - Kan geautomatiseerd worden (=> voordeel bij updaten databank!)
 - Kan uitgevoerd worden voor acute en chronische data
 - Kan uitgevoerd worden voor verschillende eindpunten
 - Kan b.v. uitgevoerd worden voor alleen 'hoge kwaliteit' data
 - ...

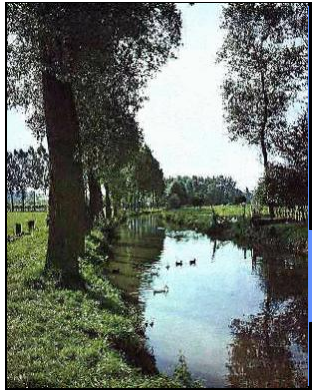
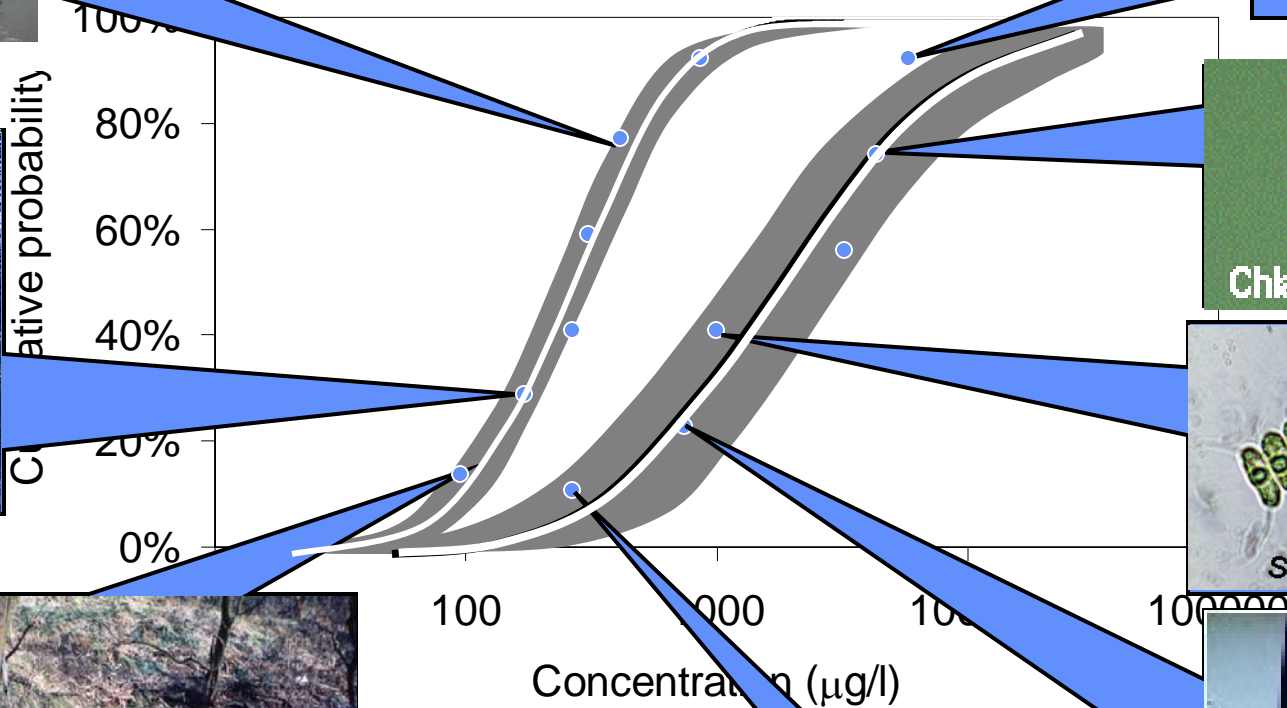




Microcystis

Exposure
Concentration
Distribution (ECD)

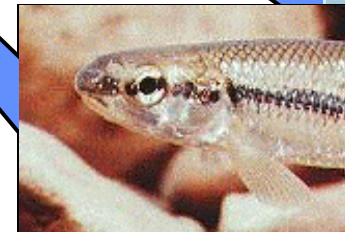
Species Sensitivity
Distribution (SSD)



Chlamydomonas



Scenedesmus



Pimephales



Daphnia



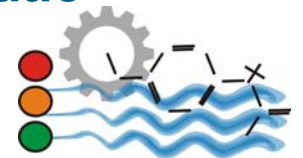
23% kans op
een risico

+ 20-29% onzekerheidsinterval



Dataverwerking, modelleren (2)

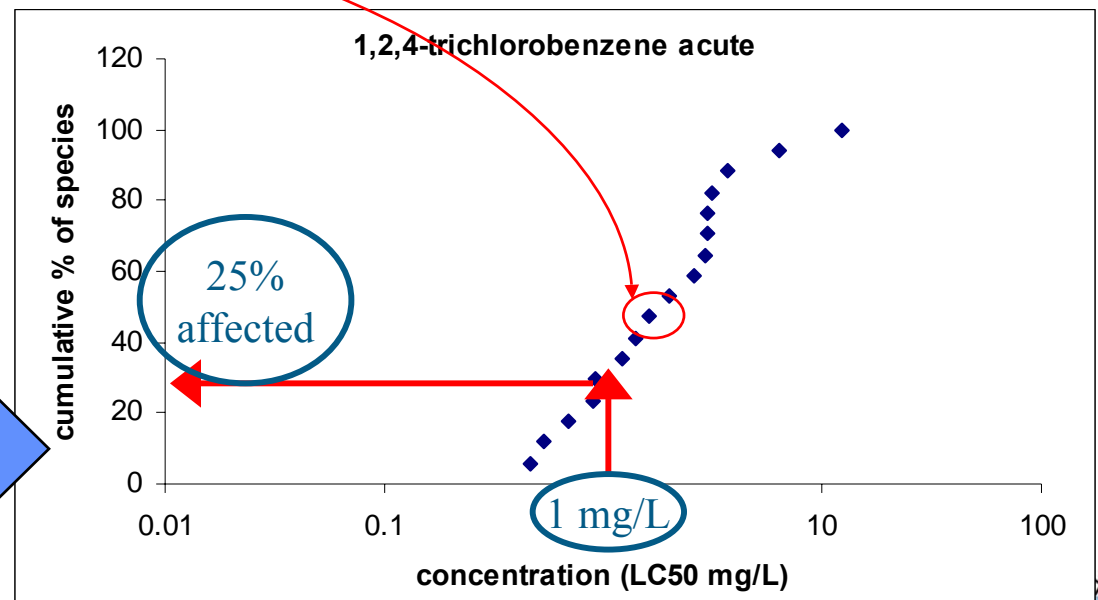
- Verzamelen + ingeven alle toxiciteitsgegevens
- Kwaliteit gegevens nagaan
- Data op zelfde niveau, eenheden brengen (b.v. LC_{50} , NOEC)
- Rangschikken data (LC_{50} , NOEC)
- Cumulatief aantal soorten (%) uitzetten t.o.v. het gekozen eindpunt (b.v. LC_{50} , NOEC)
- Curve fitten (log-logistisch)
- % geaffecteerde soorten aflezen bij bepaalde concentratie in water (na lozing)
- Voorbeelden hierna: gedeeltelijke data als input! Hypothetische voorbeelden, telkens 1 mg/L als geschatte waterconcentratie



Dataverwerking, modelleren (3)

➤ 1,2,4-trichlorobenzene, acute PAF

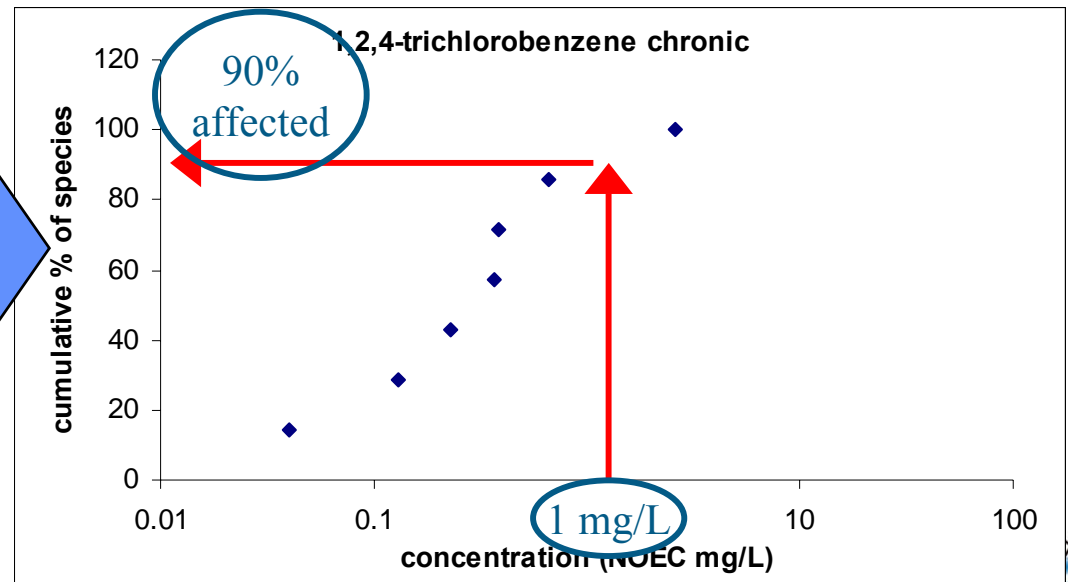
species	LC50	%
<i>Mysidopsis bahia</i>	0.47	6
<i>Palaemonetes pugio</i>	0.54	12
<i>Leuciscus idus</i>	0.70	18
<i>Tetrahymena pyriformis</i>	0.91	24
<i>Tanytarsus dissimilis</i>	0.93	29
<i>Jordanella floridae</i>	1.22	35
<i>Selenastrum capricornutum</i>	1.40	41
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	1.60	47
<i>daphnia magna</i>	1.99	53
<i>Nitocra spinipes</i>	2.60	59
<i>Pimephales promelas</i>	2.89	65
<i>Lepomis macrochirus</i>	3.02	71
<i>Oconectes immunis</i>	3.02	76
<i>Aplexa hypnorum</i>	3.16	82
<i>Scenedesmus subcapitata</i>	3.69	88
<i>Danio rerio</i>	6.30	94
<i>Oryzias latipes</i>	12.30	100



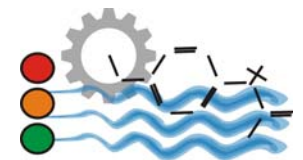
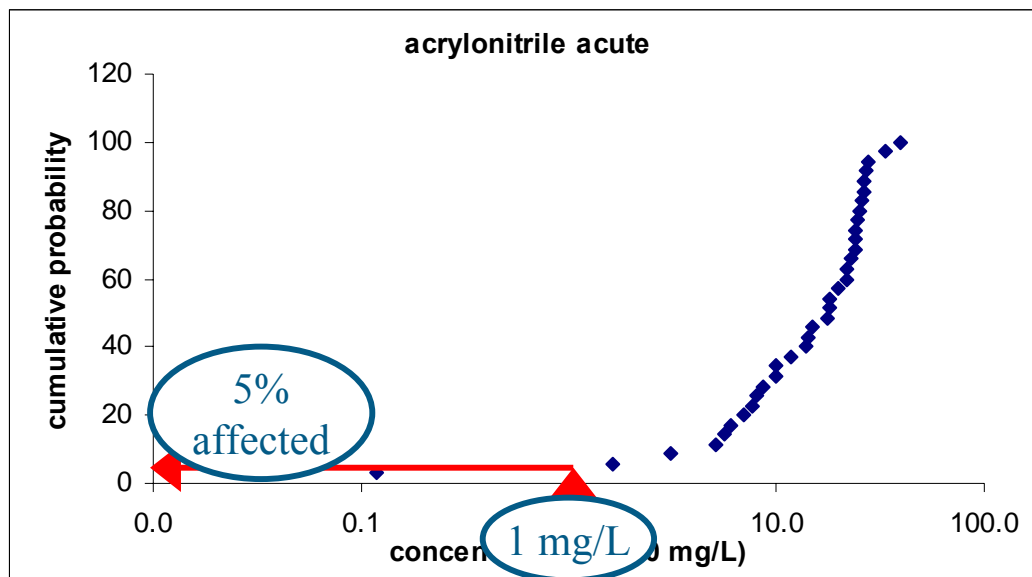
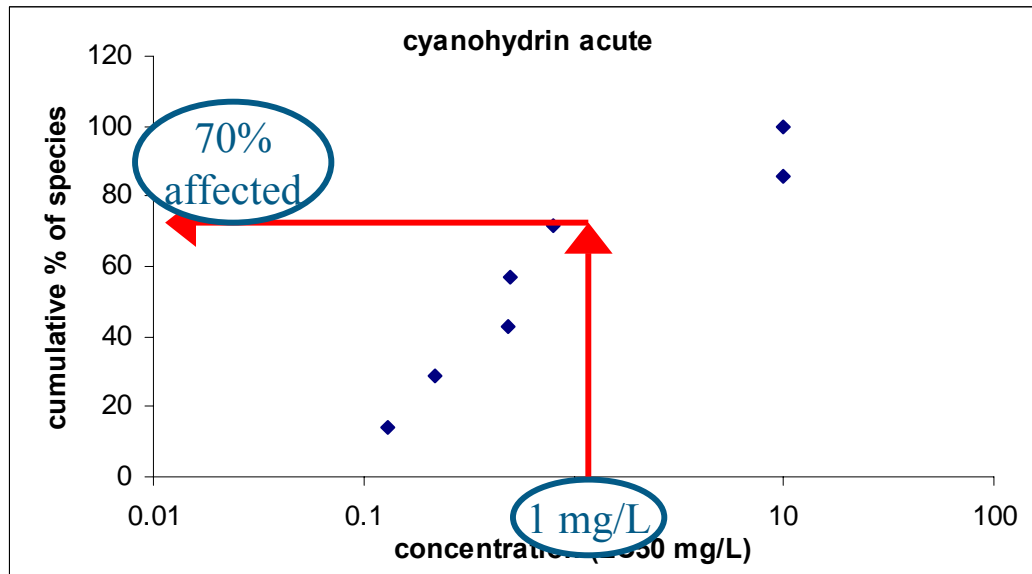
Dataverwerking, modelleren (4)

➤ 1,2,4-trichlorobenzene, chronische PAF

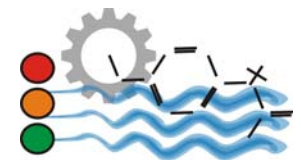
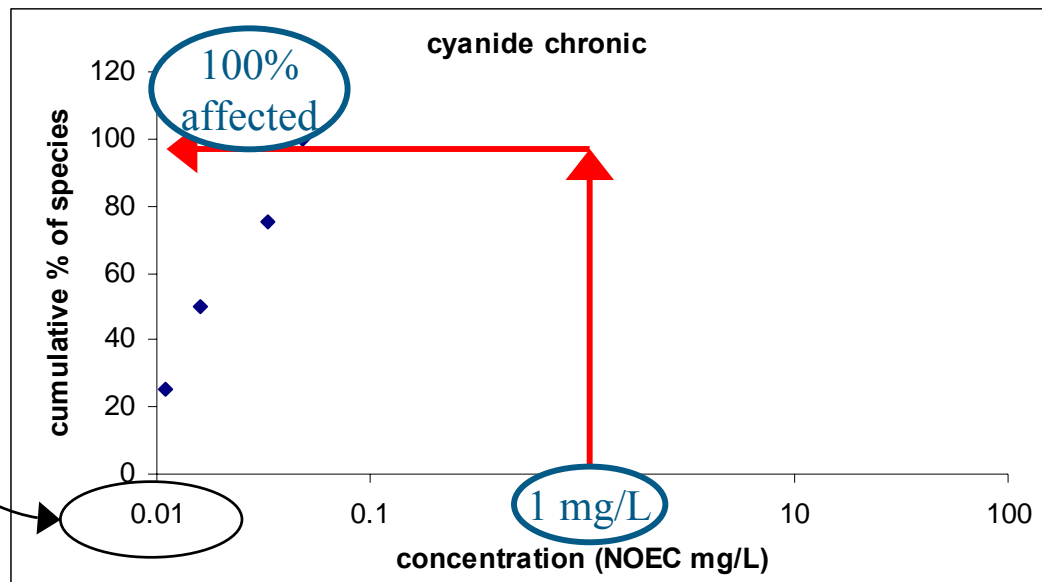
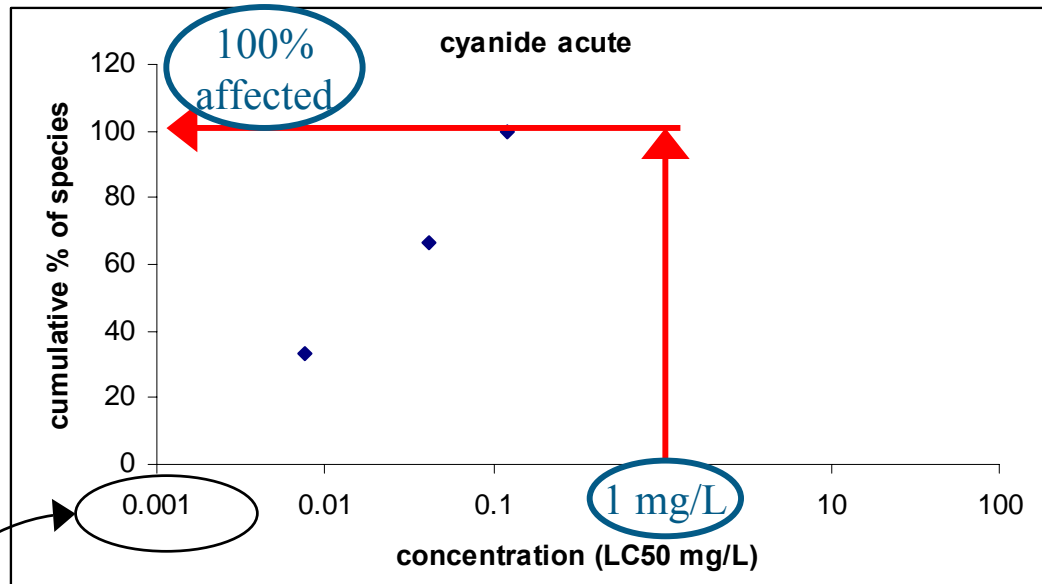
species	NOEC	%
<i>Danio rerio</i>	0.04	14
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	0.13	29
<i>daphnia magna</i>	0.23	43
<i>Selenastrum capricornutum</i>	0.37	57
<i>Pimephales promelas</i>	0.38	71
<i>Poecilia reticulata</i>	0.66	86
<i>Scenedesmus subcapitata</i>	2.57	100



Dataverwerking, modelleren (5)

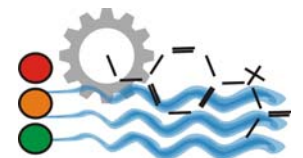


Dataverwerking, modelleren (6)



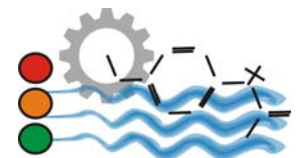
Dataverwerking, modelleren (7)

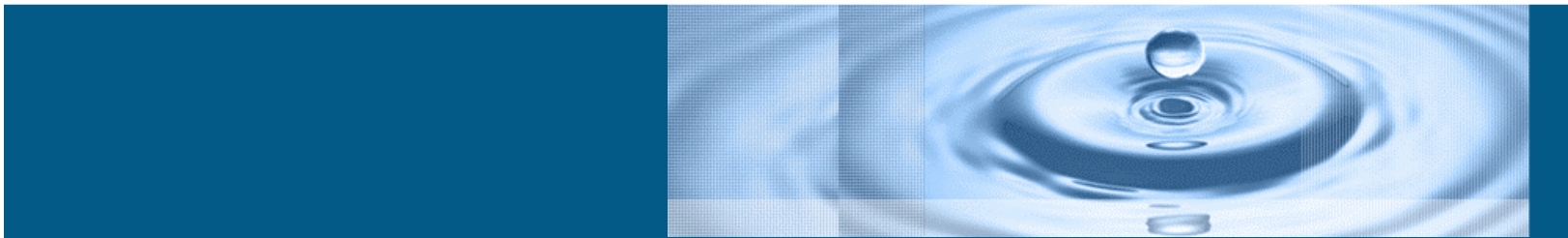
- <http://www.vliz.be/projects/dimas/restricted/databases.php>



Verdere planning

- **Laatste gebruikersvergadering: 04/05**
- **Databank afwerken**
 - Data ingeven (+ deels opzoeken en evalueren)
 - Modelleren (PAF, blootstelling)
 - Bevragingen via internet
- **Opvolging via website**
 - Verslagen, rapporten
 - Verloop project (databank)
- **MIMAc**





EURAS

✉ Rijvisschestraat 118, Box 3,
9052 Gent, Belgium

☎ Tel.: +32 (9) 257 13 99
Fax: +32 (9) 257 13 98

💻 bram.versonnen@euras.be
www.euras.be

VLIZ

Pakhuizen 45-52
8400 Oostende, Belgium

☎ Tel.: +32 (59) 34 21 30
Fax: +32 (59) 34 21 31

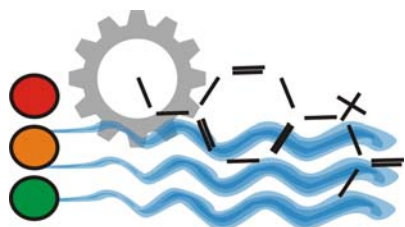
info@vliz.be
www.vliz.be

LETAE

J. Plateaustraat 22
9000 Gent, Belgium

☎ Tel.: +32 (9) 264 37 75
Fax: +32 (9) 264 37 66

Colin.janssen@ugent.be
www.milieutox.ugent.be



<http://www.vliz.be/projects/dimas>

