

Riesgo Químico: Un Modelo Computacional de Cálculo Mediante Lógica Difusa

Oscar M. Obando R.

Maestría en Ciencias de la Computación
Instituto Tecnológico de Costa Rica
Cartago, Costa Rica
Email: ing.oscar.obando@gmail.com

Cesar Garita

Docente Maestría en Ciencias de la Computación
Instituto Tecnológico de Costa Rica
Cartago, Costa Rica
Email: cesar@itcr.ac.cr

Resumen—Se utilizó un modelo computacional de lógica difusa, para el análisis de riesgo químico por inhalación en laboratorios. Los resultados de la investigación se utilizaron para presentar un nuevo enfoque semicuantitativo en este tipo de valoración de riesgo en función del tiempo. El modelo fue sometido a criterio experto para valorar su aplicabilidad futura en instalaciones con agentes químicos.

I. INTRODUCCIÓN

Se presenta el resultado y la validación de la utilización de un modelo computacional basado en lógica difusa, cuyo objetivo es el cálculo del riesgo químico por inhalación (RQI) en un laboratorio en el que existe exposición de agentes químicos a los usuarios. El modelo utilizado corresponde a una versión mejorada del presentado en [1]. La valoración del RQI resultante corresponde a un enfoque semicuantitativo [2].

Las definiciones de RQI, peligrosidad de un agente químico y exposición se presentan en [1] y [3]. Son muchos los factores que deben tomarse en cuenta para la valoración final del RQI en una instalación en la que las personas están expuestas a contacto con sustancias químicas [3].

Los factores de entrada y el modelo de lógica difusa son presentados de manera resumida en la sección de desarrollo. Los resultados exponen los datos de prueba utilizados en la investigación, la estimación de RQI respectiva y la estimación reversa de los factores de influencia. La validación presenta los resultados de la valoración mediante criterio experto y los criterios que se utilizaron para la misma. Finalmente se proponen las conclusiones y los aspectos que podrían dar continuidad al tema.

II. METODOLOGÍA

Esta sección describe el desarrollo del modelo computacional que permite obtener la estimación del RQI. Previamente, se introduce el concepto de lógica difusa.

II-A. Lógica difusa

La lógica difusa fue presentada en [8]. En contraposición a la lógica binaria, permite que una variable determinada pueda pertenecer a varios conjuntos al mismo tiempo. Por ejemplo, en la Figura 1 una persona con edad E_0 puede ser clasificada como niño o adolescente simultáneamente, con diferentes grados de pertenencia μ_1 y μ_2 respectivamente. La variable independiente se denomina el *dominio difuso*.

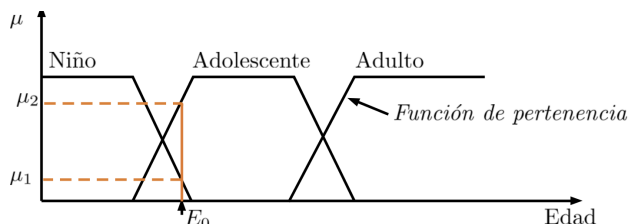


Figura 1: Ejemplo de Lógica Difusa.

II-B. Factores de influencia en la estimación del RQI

Para el caso del RQI, se han identificado tres factores de influencia relacionados con la peligrosidad de las sustancias existentes en la instalación y cuatro inherentes a los usuarios (personas) de las mismas [4].

En la Tabla I se resumen los factores identificados. Los parámetros TLV son caracterizados siempre en *partes por millón (PPM)* y se encuentran documentados en las hojas de seguridad de cada agente químico [5]. La hipersensibilidad es tratada con una escala de 0 a 5, siendo 5 el peor nivel de peligrosidad de exposición. El estado de salud es tratado de 0 a 100, siendo 100 el estado óptimo de salud de una persona [6]. La edad y los años de exposición a agentes químicos se tratan en el modelo de cálculo de manera difusa con categorías *Bajo, Medio y Alto*.

Factor	Naturaleza
TLV-STEL	Peligrosidad de la sustancia
TLV-TWA	Peligrosidad de la sustancia
TLV-CEIL	Peligrosidad de la sustancia
Hipersensibilidad	Persona usuaria
Edad	Persona usuaria
Años de exposición laboral	Persona usuaria
Estado de salud	Persona usuaria

Tabla I: Factores de influencia para el cálculo de RQI.

II-C. Modelo de cálculo difuso del RQI

Se utilizó una estimación de RQI basado en una dependencia del tiempo, dada la variabilidad de los factores de influencia en cada instante [7]. Se puede distinguir dos naturalezas distintas de la concentración de los agentes químicos. Una debido a las condiciones estables de la atmósfera de la instalación y otra debido a los procedimientos o eventos

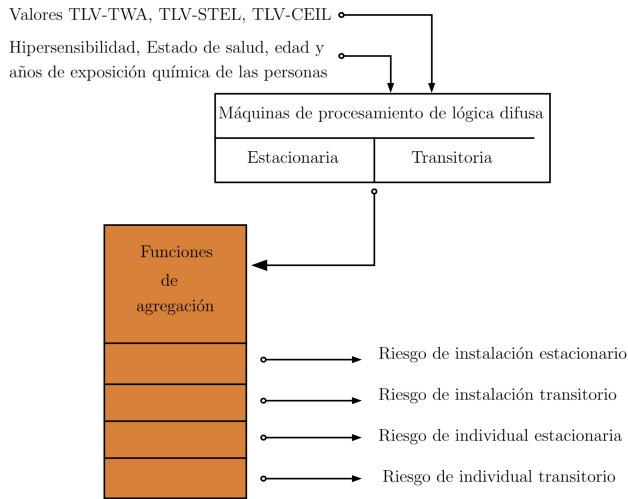


Figura 2: Modelo general.

(condiciones transitorias) de manipulación. El RQI se calculará en cuatro maneras distintas:

- Riesgo individual en condiciones estacionarias.
- Riesgo individual en condiciones transitorias.
- Riesgo de la instalación en condiciones estacionarias.
- Riesgo de la instalación en condiciones transitorias.

El modelo computacional global, para la obtención del RQI, se presenta en la Figura 2. El desarrollo del mismo es alimentado por diversas fuentes [8], [9], [10], [11], [12] y [13].

En el esquema se pueden distinguir los bloques funcionales de *máquinas de procesamiento de lógica difusa* y de *funciones de agregación*. De igual manera, se muestra las entradas y las salidas respectivas. A continuación se procede a exponer la función de cada uno de los componentes respectivos.

Máquina de procesamiento de lógica difusa de riesgo estacionario. Los valores límite *TLV-TWA* son utilizados para calcular el riesgo debido a condiciones estacionarias en el laboratorio. Las condiciones del lugar, manipulación constante y existencia en inventario crean una concentración de agentes en la atmósfera del sitio. En esta circunstancia, la exposición a agentes químicos, puede considerarse aproximadamente constante. De esta manera, el modelo contempla un aporte estacionario al riesgo químico.

Máquina de procesamiento de lógica difusa de riesgo transitorio. Los valores límite *TLV-STEL* son utilizados para calcular el riesgo en condiciones transitorias en el sitio. La mayoría de los distintos eventos (por ejemplo, prácticas de docencia o preparación de disoluciones), provocan la liberación de AQ al ambiente de una manera repentina. La concentración de los agentes respectivos cambia de manera drástica en el sitio de realización del evento. Así, se considera que las condiciones de riesgo en ese momento ocurren en un intervalo de tiempo limitado a la duración del procedimiento respectivo, por lo cual obedece a una condición transitoria. Los valores límite

TLV-STEL se refieren a la exposición en períodos cortos, por lo que se utiliza este parámetro para este caso.

Tanto la máquina de procesamiento estacionaria como la transitoria, siguen estas etapas de cálculo:

- Fuzzificación de límites TLV y concentraciones. En este cálculo se introdujo una generalización de modificación de dominio de las variables difusas a partir de parámetros de entrada *Hipersensibilidad* y *estado de salud*, la cual consiste en uno de los aportes de la investigación.
- Aplicación de reglas if-then. En este cálculo se toma en cuenta las variables difusas *Años de exposición* y *Edad* junto con el resultado del bloque anterior.
- Vector de pesos. Aquí se resumen la información obtenida para cada agente químico y cada persona.

Funciones de agregación individual y de la instalación.

Una operación de agregación para la obtención del cuantificador de RQI individual, y el de la instalación es realizada. En total son cuatro funciones de agregación las que son requeridas. La operación de agregación se realiza en distintas maneras, dependiendo del caso: mediante un vector de pesos ordenado basado en el riesgo, un valor máximo o un vector de pesos eurístico.

Finalmente, se destaca el hecho de que el procedimiento de cálculo se ejecuta para cada instante de tiempo en el que un evento de liberación de agentes químicos ocurra.

III. RESULTADOS

La investigación ha arrojado datos preliminares de cálculo que demuestran que es posible obtener una escala cuantificada del RQI. Esto representa una alternativa a las técnicas de observación cualitativa normalmente utilizadas [14].

III-A. Conjunto de datos de prueba

Los datos utilizados para experimentación y prueba del modelo planteado, provienen de [1]. Los datos son resumidos de esta manera:

- 10 Agentes químicos. Para cada uno de ellos se documenta el TLV-TWA, TLV-STEL y TLV-CEIL.
- Detalle de la concentración en atmósfera cerrada (laboratorio químico) de cada uno de los agentes contemplados.
- 5 eventos de manipulación de agentes. Cada evento tiene su propia duración y detalle de la cantidad liberada de los agentes químicos.
- Calendarización de los eventos a lo largo de un período de 15 semanas.
- 6 personas anónimas usuarias de la instalación.
- Detalle de la hipersensibilidad química y el estado general de salud de cada persona.
- Detalle de la edad, años de laborar con exposición a químicos de cada persona.

Los datos son tomados a partir de una condición real de operación de un laboratorio de investigación.

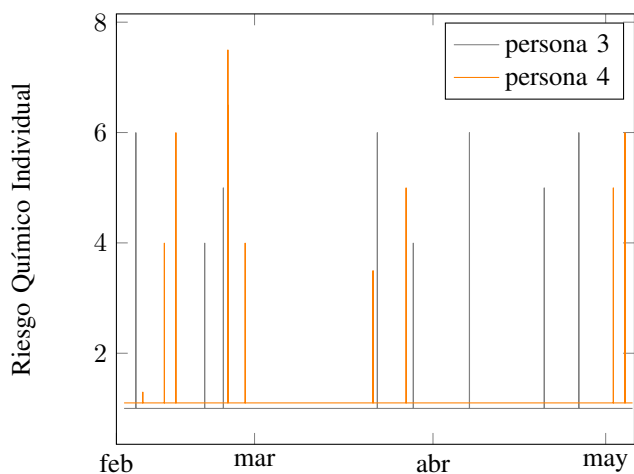


Figura 3: Comportamiento del RQI de las personas 3 y 4.

III-B. Estimación del RQI proyectado

La estimación del RQI es la salida del modelo de cálculo propuesto. Cada uno de los factores mencionados tiene un peso de importancia en distintos puntos del modelo. Cada agente es asociado a un conjunto de funciones de pertenencia difusas. Estas son modificadas mediante una transformación dependiente de la hipersensibilidad química y el estado de salud general de cada persona. Posteriormente son tomados en cuenta los factores de años de exposición laboral y edad.

El resultado es expresado en una escala desfuzzificada con un rango de 1 a 7, siendo 1 un riesgo mínimo y 7 el riesgo máximo. Los resultados son obtenidos en los instantes de tiempo en los que se ejecutan los eventos, tomando en cuenta tanto las condiciones estacionarias como las condiciones transitorias. En la Figura 3 se muestra el RQI de dos personas participantes del estudio. Por otra parte, el riesgo de la instalación es calculado mediante la obtención del RQI máximo en cada instante de tiempo.

III-C. Estimación reversa de los factores de influencia

Se implementó una técnica de cálculo reverso que permite determinar el peso que tiene cada factor en el cálculo de riesgo en un evento determinado. En la Figura 4 se muestra el cálculo para la persona 4, en el instante 2017/02/15 08 : 00, con un RQI de 6.5. Se puede observar que los factores 1, 2 y 3 tienen un mayor peso conjunto en el resultado final de 0,78, y de éste subtotal, el factor 1 tiene un peso de 0,41 y el 2 de 0,37. El usuario final podría tomar medidas correctivas como por ejemplo elegir una metodología de análisis alternativa (por la peligrosidad de la sustancia) o cambiar el usuario por alguien que tenga menor sensibilidad a los agentes correspondientes.

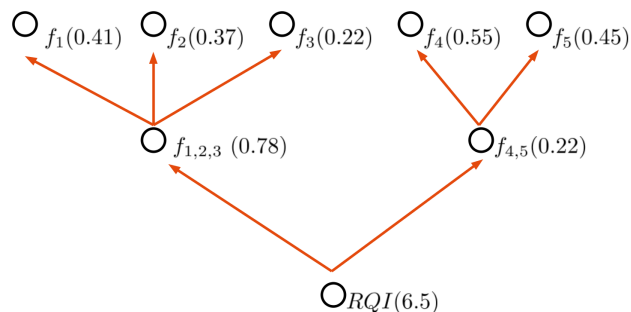


Figura 4: Estimación reversa de factores. f_1 : Peligrosidad f_2 : Hipersensibilidad f_3 : Estado salud f_4 : Edad f_5 : Años de exposición.

IV. VALIDACIÓN DEL MODELO

No existe documentación de una metodología semicuantitativa para el cálculo de RQI en la actualidad. De esta manera, no ha sido detectada una base de comparación para la validación del modelo propuesto. Se contó con la colaboración de tres expertos en el área de química, específicamente personas que por su actividad profesional, han estado relacionados con el tema de seguridad en laboratorios químicos. Se mostró el modelo y los resultados a estas personas y se procedió a solicitarles su retroalimentación mediante una encuesta. Los criterios evaluados son mostrados en la Tabla II. Asimismo, se le solicitó a los encuestados, que utilizaran una escala de 1 a 5 para calificar cada criterio, siendo 1 la escala de menor valoración (muy mal) y 5 la máxima (muy bien).

Criterio	Descripción
Relevancia	Importancia del tema y el modelo propuesto
Factibilidad práctica	Aplicación de la implementación de un sistema de software que implemente el modelo
Completitud	Valoración de las variables tomadas en cuenta en el modelo
Correctitud	Valoración de los resultados finales
Comentarios abiertos	Aspectos que el entrevistado desee agregar

Tabla II: Criterios evaluados en la validación del modelo.

IV-A. Resultados de la validación

Las valoraciones obtenidas en los criterios descritos se muestran en la Figura 5. Se presenta el promedio del puntaje obtenido en cada criterio. Asimismo, en la pregunta abierta se obtuvieron, entre otros, los siguientes aportes:

- Para los casos de agentes químicos sin TLV-STEL o TLV-CEIL documentado, la American Conference of Government Industrial Hygienist propone una extrapolación del TLV-TWA.
- Considerar para la depuración posterior del modelo, tanto la mezcla de sustancias como las interacciones entre ellas (sinergias, antagonismos y efectos aditivos).
- Tomar en cuenta el factor RSEN (sensibilizador respiratorio) y clasificación de carcinogenicidad de cada sustancia para proyectar problemas de salud.
- Afectación estacional (temperatura, humedad) de las concentraciones liberadas por los eventos.

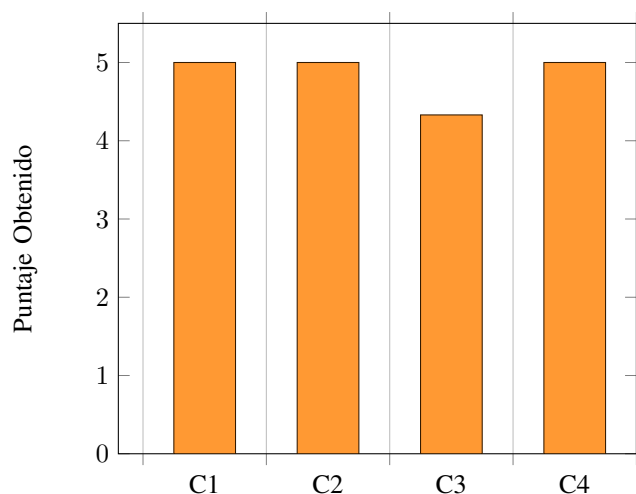


Figura 5: Resultado de la valoración. C1: Relevancia, C2: Factibilidad, C3: Compleitud, C4: Correctitud.

- En el análisis de las personas, tomar en cuenta factores hereditarios en enfermedades crónicas.
- Otras propuestas no relacionadas directamente con el RQI.

Se puede destacar el hecho de que la valoración de los expertos tiene una calificación positiva. Asimismo, se evidencia que existen varias alternativas de factores de influencia en el RQI, para la depuración futura del modelo y su puesta en práctica a mediano plazo.

V. CONCLUSIÓN

Se demostró la factibilidad técnica de la utilización de un modelo basado en lógica difusa para su uso en la estimación del riesgo químico por inhalación. Asimismo, la validación permite exponer positivamente la utilización de esta técnica semicuantitativa, como una alternativa de aplicación futura a las actuales técnicas de valoración.

En el modelo propuesto, los factores tomados en cuenta pueden ser tratados mediante transformación de dominio difuso (este es uno de los principales aportes de la investigación) o aplicación de reglas lógicas difusas.

El cálculo preciso en la ocurrencia de un evento de manipulación de agentes químicos permite la evaluación para la toma de decisiones en lo que se refiere a la acción correctiva necesaria, para disminuir los indicadores de riesgo resultantes. De esta manera, la ejecución de una simulación con antelación a los eventos, brindaría a los usuarios una herramienta valiosa en su tarea de gestión.

VI. INVESTIGACIÓN FUTURA

Primeramente, puede estudiarse la aplicación de una técnica estadística, en lugar de la lógica difusa, y realizar una comparación de resultados para ampliar los enfoques posibles de valoración de RQI en forma semicuantitativa.

El modelo puede ser ampliado, contemplando las variables propuestas por los encuestados y descritas en la sección de validación del modelo.

La implementación de un software formal para la manipulación de datos de RQI con el modelo propuesto, puede ser una herramienta para que las investigaciones sean ampliadas, desde el punto de vista de los especialistas en química o en seguridad e higiene ocupacional. Esto reforzaría la posibilidad de validar la propuesta en el futuro mediante la observación de datos masivos.

VII. AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer a Msc. Jose Carlos Mora (docente e investigador UNA), Msc. Ariel Alfaro (Regente Químico UCR) y B.Q. Wendy Umaña (Regente Químico UNA) por su participación en la validación mediante criterio experto de esta investigación y en sus aportes generales a lo largo de la misma.

REFERENCIAS

- [1] O. M. Obando, and C. Garita, "Towards a fuzzy logic model for chemical risk assessment by inhalation in laboratories," in *Proc. IEEE Central America and Panama Convention, (CONCAPAN'15)*, Tegucigalpa, Honduras, 2015.
- [2] A. S. Markowski and M. S. Mannan, "Fuzzy risk matrix," *Journal of Hazardous materials*, no. 159, pp. 152–157, 2008.
- [3] P. M. Duffus and J.H., *Evaluación de riesgos químicos. Riesgos humanos, riesgos ambientales y riesgos ecológicos*. Montevideo, Uruguay: Programa Internacional de Seguridad Química. Naciones Unidas, 1999.
- [4] L. Zeise, F. Bois, W. Chiu, D. Hattis, I. Rusyn, and K. Guyton, "Addressing human variability in next-generation human health risk assessments of environmental chemicals," *Environmental Health Perspectives*, no. 31, pp. 121–125, 2013.
- [5] M. E. Sousa, "Agentes químicos: evaluación cualitativa y simplificada del riesgo por inhalación," no. Guía Técnica 937, 2012.
- [6] M. Cantillano and K. Zapata. (2010) Cuestionario de salud autoaplicado. Internet gubernamental page. [Online]. Available: www.dgpbades.salud.gob.mx/Contenidos/CuestionarioSalud.pdf
- [7] E. R. Sirila and R. M. Maxwell, "A new perspective on human health risk assessment: Development of a time dependent methodology and the effect of varying exposure durations," *Science of the Total Environment*, no. 431, pp. 221–232, 2012.
- [8] I. A. Zadeh, "Fuzzy sets," *Information and Control*, no. 8, pp. 338–253, 1965.
- [9] D. A. Swayne, W. Yang, A. Rizzoli, and T. Filatova, "Modeling for uncertainty assessment in human health risk quantification: a fuzzy based approach," 2010.
- [10] W. Shi-Zhong, Z. Zhi-Hao, X. Bing, Q. Hao, J. Morel, and Q. Rong-Liang, "A fuzzy-based methodology for an aggregative environmental risk assessment of restored soil," *Pedosphere*, no. 24, pp. 220–231, 2014.
- [11] S. Bonvicini, P. Leonelli, and G. Spadoni, "Risk analysis of hazardous materials transportation: evaluating uncertainty by means of fuzzy logic," *Journal of Hazardous Materials*, no. 62, pp. 59–74, 1998.
- [12] A. Bardossy, I. Bogardi, and L. Duckstein, "Fuzzy set and probabilistic techniques for health-risk analysis," *Applied Mathematics and Computation*, no. 45, pp. 241–268, 1991.
- [13] K. Karimpour, R. Zarghami, M. Moosavian, and H. Bahmanyar, "New fuzzy model for risk assessment based on different types of consequences," *Oil and Gas Science and Technology*, 2014.
- [14] X. G. Solá, "Regulación ue sobre productos químicos. ii reglamento clp: Aspectos básicos," no. Guía Técnica 935, 2012.