



Centrum pro výzkum
toxických látek
v prostředí



Model rozložení citlivosti druhů (Species Sensitivity Distribution; SSD)

Soňa Smetanová

smetanova@recetox.muni.cz

Úvod do SSD

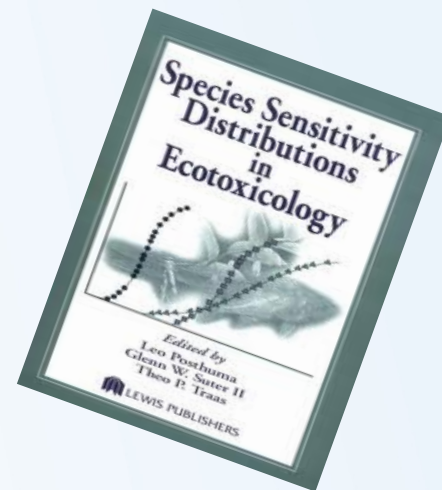
??? SSD – Species Sensitivity Distribution ???

→ v ČR pořád celkem neznámý a v pozadí zájmu

→ v Evropě čím dál více důležitý !

→ využití v hodnocení ekotoxikologických rizik
toxických látek a jejich účinků na ekosystémy

→ Co to tedy je???



Motivace – teoretický příklad praktického využití

U jedné továrny vyrábějící insekticid XY leží chráněné jezero, ve kterém žijí velmi vzácné druhy organismů.



Pro insekticid XY byl vytvořen **model SSD**, kterým byla stanovena bezpečná koncentrace nepoškozující ekosystém na 1,8 µg/l



Jednoho dne se v továrně stala nehoda, insekticid XY unikl do okolí a jeho koncentrace v jezeře byla 2 dny zvýšená na 9,6 µg/l. Poté začala klesat.



Podle již vytvořeného **SSD modelu** bylo nejen rychle zjištěno, že bezpečný limit látky XY byl překročen, ale dokonce i to, že tato koncentrace bude mít potenciálně negativní akutní vliv na 74% druhů žijících v jezeře a že je nutné začít neprodleně



Úvod do SSD

1. princip:

„Různé druhy organismů jsou různě citlivé k určité toxické látce“



Úvod do SSD

1. princip:

„Různé druhy organismů jsou různě citlivé k určité toxické látce“

| | | |
|---------------------------------|----------------|-------------|
| Pseudokirchneriella subcapitata | řasa | 7 µg/l |
| Chlorella vulgaris | řasa | 26 µg/l |
| Lemna minor | vyšší rostlina | 150 µg/l |
| Danio rerio | ryba | 1 750 µg/l |
| Lepomis macrochirus | ryba | 5 277 µg/l |
| Chironomus riparius | hmyz | 15 049 µg/l |
| Daphnia magna | korýš | 21 000 µg/l |

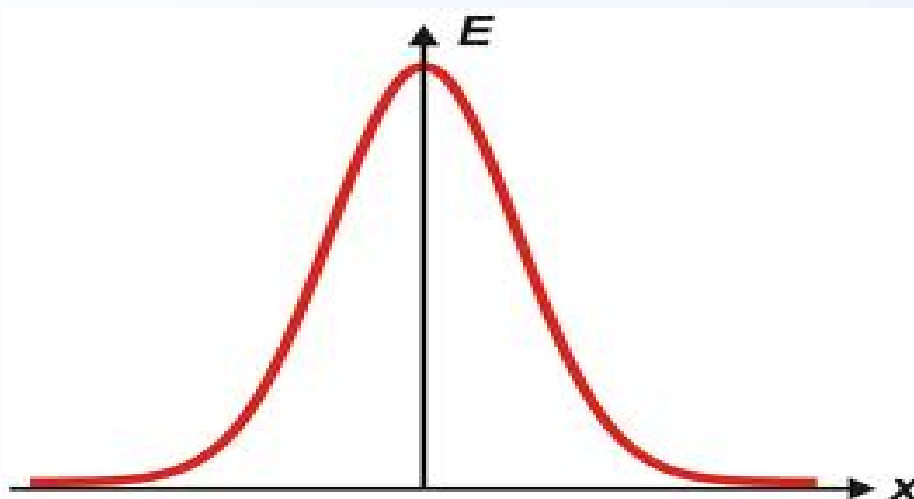
Akutní EC50 hodnoty pro herbicid alachlor



Úvod do SSD

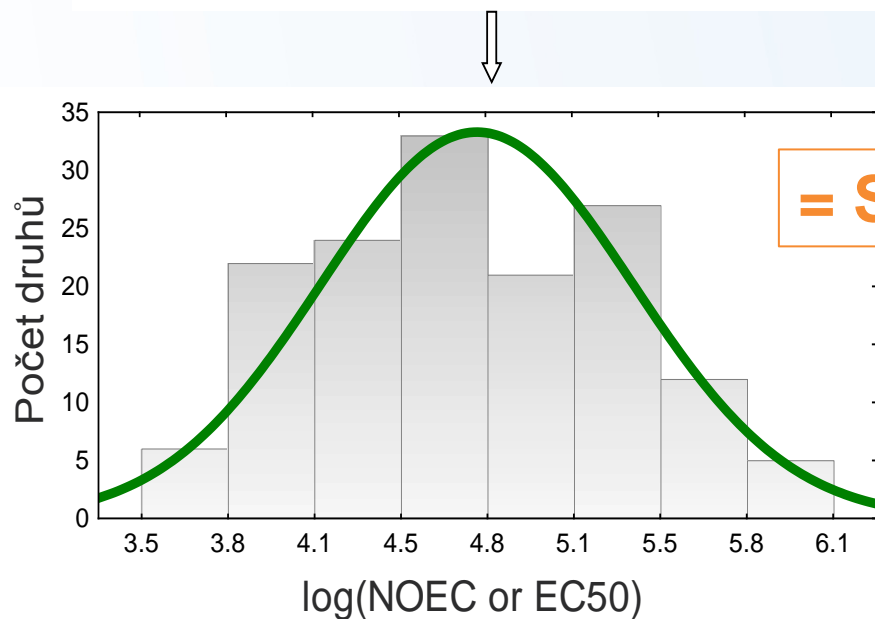
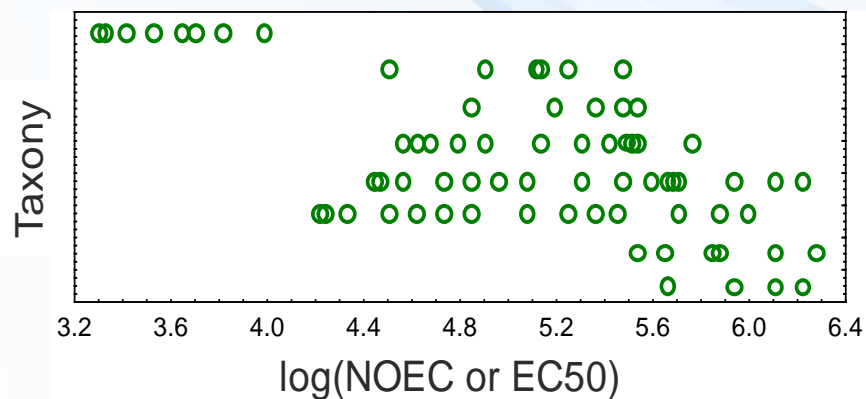
2. princip:

„Logaritmy citlivostí (log EC50 či log NOEC) všech druhů organismů z jednoho ekosystému mají normální (Gaussovo) rozložení“



Úvod do SSD

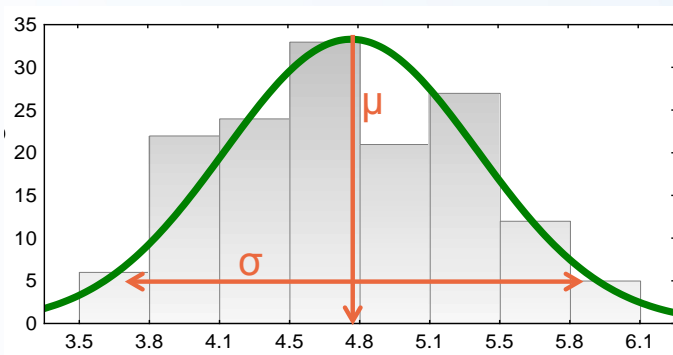
1. a 2. princip obrazem



Úvod do SSD

Výhoda normálního (Gaussova) rozložení

→ Pouze dva parametry: aritmetický průměr μ
 směrodatná odchylka σ



$$\mu = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

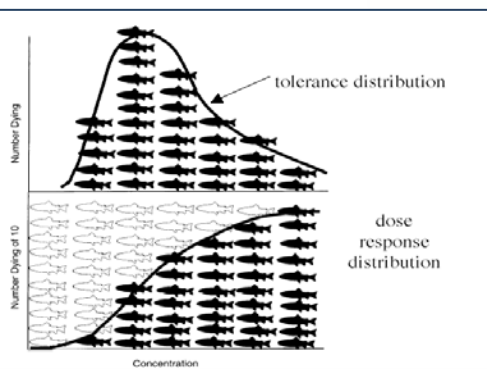
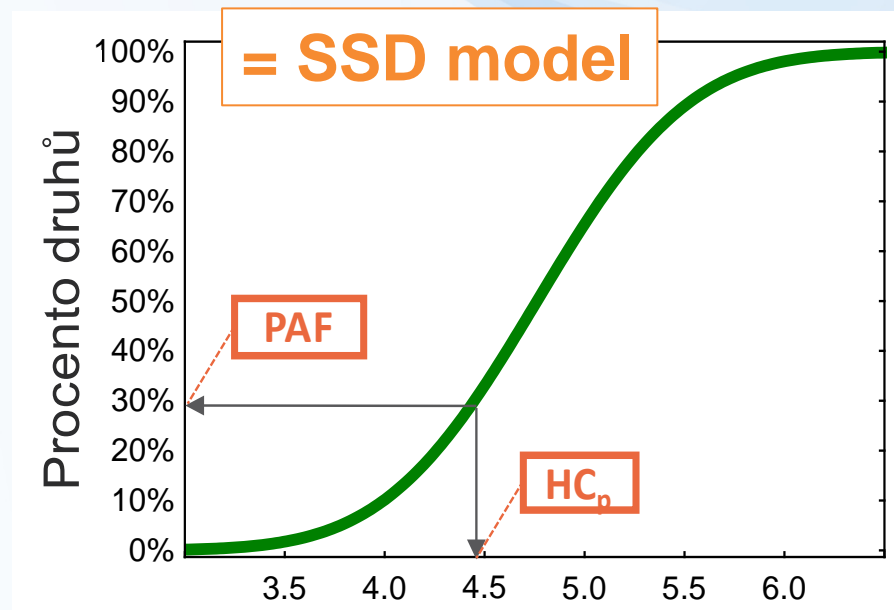
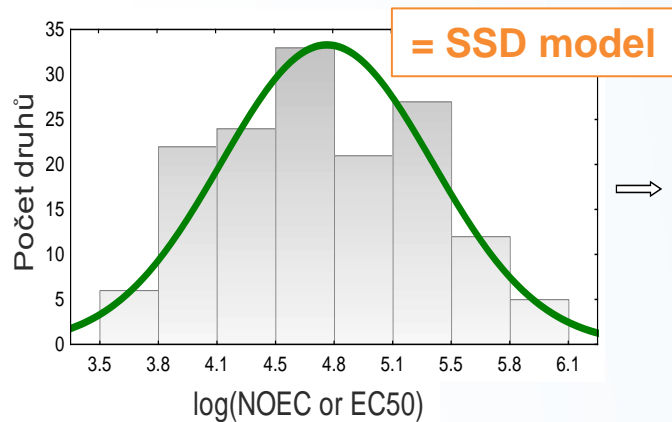
$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2}$$



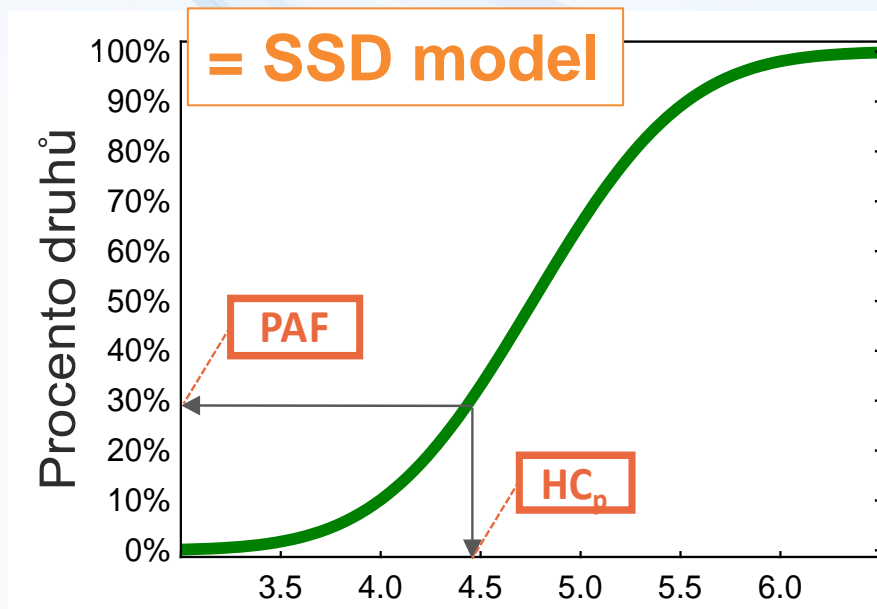
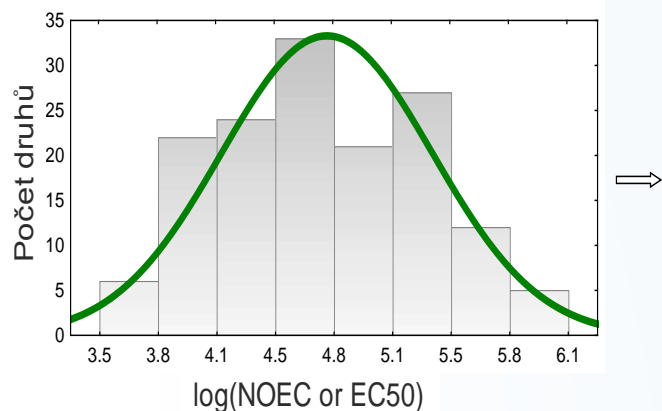
Úvod do SSD

K čemu použít Gaussovo rozložení?

→ Vyjádření pomocí kumulativní distribuční funkce a zjištění HC_p či PAF



K čemu použít Gaussovo rozložení?

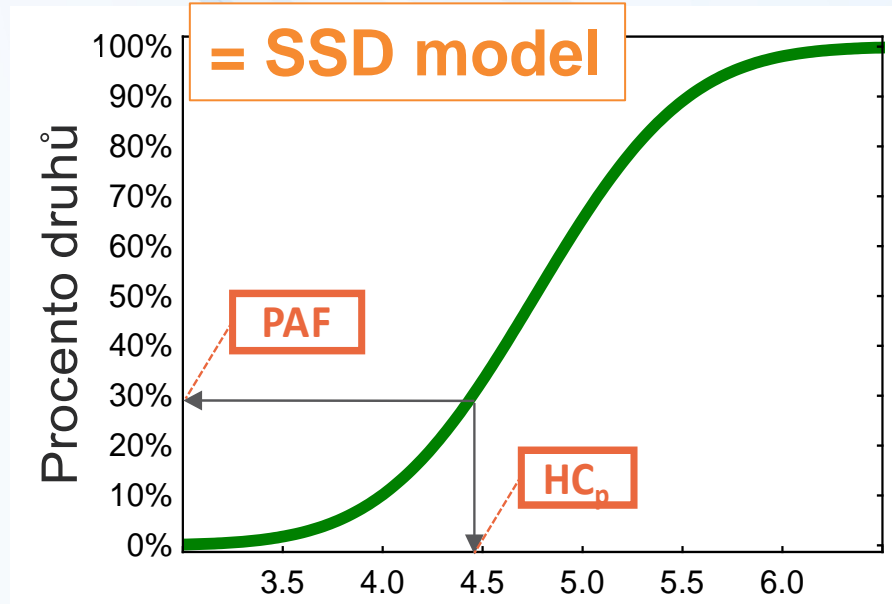
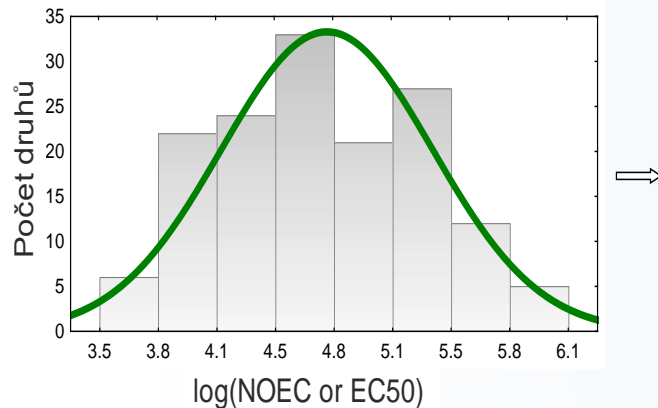


HC_p ... Hazard Concentration for p-percent of species

... „koncentrace toxické látky, která podle SSD modelu negativně ovlivní p-procent druhů organismů“



K čemu použít Gaussovo rozložení?



PAF ... Potentially Affected Fraction

... „frakce (procento) organismů, která bude negativně ovlivněna působením určité koncentrace dané toxické látky“



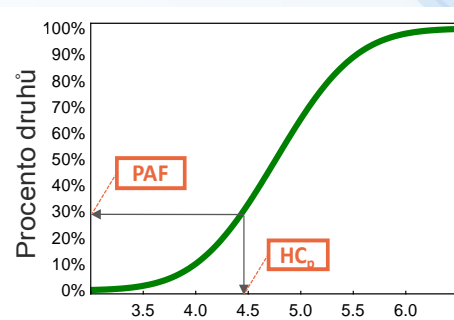
K čemu použít Gaussovo rozložení?

PAF

- kvantitativní zhodnocení ekotoxikologického stavu ekosystému

- (tj. retrospektivní analýza rizik)

! PAF = 6 % vs PAF = 62 % !



HCp

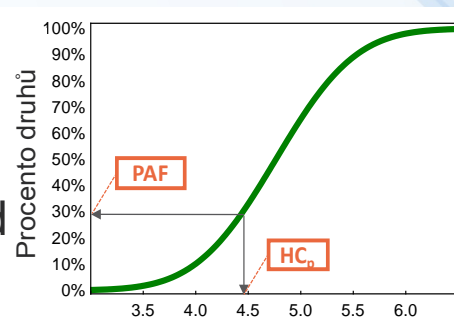
- stanovení PNEC (Predicted no-effect concentration) limitů
- (tj. prospektivní analýza rizik)
 - Evropa: HC₅ jako limit (~ taková koncentrace látky, která ještě nemá statisticky významný negativní účinek na společenství organismů v ekosystému)



Výhody PAF a HC_p oproti klasickým přístupům

PAF

- Kvantitativní zhodnocení negativních efektů (na rozdíl od běžně používaného přístupu „koncentrace látky v prostředí je pod/nad PNEC hodnotou“).



HC_p

- Menší nejistoty (limit odvozen z velkého množství taxonů a druhů, nejen ze tří standardních organismů, jak tomu je v případě klasických postupů)



Nízké faktory nejistoty
(Assessment factors)
aplikované na hodnoty HC₅ pro
zisk PNEC

Úvod do SSD

Výhody PAF a HCp oproti klasickým přístupům

| Available data | Assessment factor |
|--|--|
| At least one short-term L(E)C50 from each of three trophic levels (fish, invertebrates (preferred <i>Daphnia</i>) and algae) (i.e. base set) | 1000 ^{a)} |
| One long-term EC10 or NOEC (either fish or <i>Daphnia</i>) | 100 ^{b)} |
| Two long-term results (e.g. EC10 or NOECs) from species representing two trophic levels (fish and/or <i>Daphnia</i> and/or algae) | 50 ^{c)} |
| Long-term results (e.g. EC10 or NOECs) from at least three species (normally fish, <i>Daphnia</i> and algae) representing three trophic levels | 10 ^{d)} |
| Species sensitivity distribution (SSD) method | 5-1 (to be fully justified case by case) ^{e)} |
| Field data or model ecosystems | Reviewed on a case by case basis ^{f)} |

Faktory nejistoty pro získání PNEC hodnot; faktory se liší podle zvolené metody (Guidance Document EU CIS-WFD No. 27)



Tvorba SSD modelu – vstupní data

→ Online databáze

(např. US EPA ECOTOX: <http://cfpub.epa.gov/ecotox> či IUCLID Chemical Data Sheets: <http://esis.jrc.ec.europa.eu>)

- Chronické NOEC / akutní EC50 hodnoty ...

Pozor na odlišný význam SSD modelu

- Sladkovodní/slanovodní/suchozemské druhy

- Data z testování efektů s přímým vlivem na změnu abundance a složení společenství organismů (růst, biomasa, mortalita, imobilizace)



Tvorba SSD modelu – vstupní data

- Hodnoty EC50 (či NOEC) vzniklé testováním čistých látek (min. 90%)
- Kontrola a odstranění replikací a podezřelých údajů
- Převod všech hodnot na stejné jednotky ($\mu\text{g/l}$)



Tvorba SSD modelu – vstupní data

| A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L | M | N | O | P | Q | R | S | T | U | V | W | X | Y | Z | AA | AB | AC | AD | AE | AF | AG | AH | AI | AJ | AK | AL | AM | AN | AO | AP | AQ |
|-------|----------------------|----------------------|---------------|----------|--------|----------------|-------------------|--------------|--------------|----------------|---------------|-------|----------------|-------------|------------------|---------------|---------------|-------------------|---------------|-------------------|------------|------------|---------------|-----------|---------------------------|---------------------------------|-------------------|------------------|-----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| číslo | Species Scientific | Species Common | Species Group | Endpoint | Effect | Effect Measure | Exposure Duration | Min Duration | Max Duration | Duration Units | Exposure Type | Trend | Effect Percent | Conc 1 Type | Conc 1 Op (ug/L) | Conc 1 (ug/L) | Conc 1 Min Op | Conc Min 1 (ug/L) | Conc 1 Max Op | Conc 1 Max (ug/L) | Conc Units | Media Type | Test Location | Reference | Author | Title | Source | Publication Year | poz | | | | | | | | | | | | | |
| 536 | Palaeomonetes | Shrimp, Palaemonetes | Fans | LC50 | MOR | MORT | 1 | NR | NR | d | S | INC | NR | F | > | 5600 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 6797 | F.L.Jr., | Manual of Acute Toxicology | Resour.Publ.No.1 | 1986 | con | | | | | | | | | | | | | |
| 185 | Notropis atherino | Emerald Shiner | Fish | LC50 | MOR | MORT | 4 | NR | NR | d | S | NR | NR | F | > | 18000 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 344 | Office of Pesticide | Pesticide | Environmental | 2000 | con | | | | | | | | | | | | | |
| 175 | Carassius | Goldfish | Fish | LC50 | MOR | MORT | 4 | NR | NR | d | S | NR | NR | F | > | 32000 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 344 | Office of Pesticide | Pesticide | Environmental | 2000 | con | | | | | | | | | | | | | |
| 187 | Oncorhynchus | Rainbow Trout | Fish | LC50 | MOR | MORT | 4 | NR | NR | d | R | NR | NR | F | > | 82000 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 344 | Office of Pesticide | Pesticide | Environmental | 2000 | con | | | | | | | | | | | | | |
| 525 | Pseudokirchneriella | Green Algae | Moss, | EC50 | PHY | PSYN | 1 | NR | NR | d | S | | NR | A | | 2.24 | | 1.74 | | 2.90 | ug/L | FW | LAB | 11780 | Turbak, S.C., S.B. | Comparison of The Acta | Water Res. | 1986 | | | | | | | | | | | | | | |
| 617 | Spirulina platensis | Blue-Green Algae | Moss, | LC50 | POP | PGRT | 14 | NR | NR | d | S | DEC | NR | F | | 6 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 17259 | Bednarz, T. | The Effect of Hydrobio | Acta | 1981 | | | | | | | | | | | | | | |
| 611 | Chlorococcum sp. | Green Algae | Moss, | LC50 | POP | PGRT | 14 | NR | NR | d | S | DEC | NR | F | | 8 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 17259 | Bednarz, T. | The Effect of Hydrobio | Acta | 1981 | | | | | | | | | | | | | | |
| 614 | Oscillatoria sp. | Blue-Green Algae | Moss, | LC50 | POP | PGRT | 14 | NR | NR | d | S | DEC | NR | F | | 8.2 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 17259 | Bednarz, T. | The Effect of Hydrobio | Acta | 1981 | | | | | | | | | | | | | | |
| 158 | Anabaena | Blue-Green Algae | Moss, | EC50 | POP | ABND | 5 | NR | NR | d | S | NR | NR | F | | 36 | | 30 | | 42 | ug/L | FW | LAB | 344 | Office of Pesticide | Pesticide | Environmental | 2000 | | | | | | | | | | | | | | |
| 88 | Selenastrium sp. | Green Algae | Moss, | IC50 | POP | ABND | 3 | NR | NR | d | S | DEC | NR | F | | 48.6 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 84045 | Kamaya, Y., T. | Effect of Medium Aquat.Toxicol. | Bull.Environ.Cont | 2004 | | | | | | | | | | | | | | |
| 123 | Chlorella fusca | Green Algae | Moss, | EC50 | POP | PGRT | 1 | NR | NR | d | S | | NR | F | | 56.9 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 62304 | Faust, M., R. | Predicting the Acta | Hydrobio | 2001 | | | | | | | | | | | | | | |
| 89 | Selenastrium sp. | Green Algae | Moss, | IC50 | POP | ABND | 3 | NR | NR | d | S | DEC | NR | F | | 57.3 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 84045 | Kamaya, Y., T. | Effect of Medium Aquat.Toxicol. | Bull.Environ.Cont | 2004 | | | | | | | | | | | | | | |
| 616 | Scenedesmus | Green Algae | Moss, | LC50 | POP | PGRT | 14 | NR | NR | d | S | DEC | NR | F | | 65 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 17259 | Bednarz, T. | The Effect of Hydrobio | Acta | 1981 | | | | | | | | | | | | | | |
| 441 | Chlorella fusca | Green Algae | Moss, | EC50 | POP | GPOP | 1 | NR | NR | d | S | NR | NR | F | | 73 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 4332 | Faust, M., R. | Additive Effects of Environ. | Sci.Total | 1993 | | | | | | | | | | | | | | |
| 90 | Selenastrium sp. | Green Algae | Moss, | IC50 | POP | ABND | 3 | NR | NR | d | S | DEC | NR | F | | 73.6 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 84045 | Kamaya, Y., T. | Effect of Medium Aquat.Toxicol. | Bull.Environ.Cont | 2004 | | | | | | | | | | | | | | |
| 124 | Chlorella pyrenoides | Green Algae | Moss, | EC50 | POP | PGRT | 4 | NR | NR | d | S | DEC | NR | F | | 82 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 61983 | Ma, J., W. Liang. | Acute Toxicity The Acta | Bull.Environ.Cont | 2001 | | | | | | | | | | | | | | |
| 608 | Ankistrodesmus | Green Algae | Moss, | LC50 | POP | PGRT | 14 | NR | NR | d | S | DEC | NR | F | | 87 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 17259 | Bednarz, T. | The Effect of Hydrobio | Acta | 1981 | | | | | | | | | | | | | | |
| 160 | Navicula pelliculo | Algae, Diatom | Moss, | EC50 | POP | ABND | 5 | NR | NR | d | S | NR | NR | F | | 90 | | 80 | | 100 | ug/L | FW | LAB | 344 | Office of Pesticide | Pesticide | Environmental | 2000 | | | | | | | | | | | | | | |
| 773 | Perca sp. | Perch | Fish | LC50 | MOR | MORT | 4 | NR | NR | d | S | | NR | F | | 90 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 7199 | Bathe, R., K. | The Evaluati Soc.Toxic | Proc.Eur. | 1975 | | | | | | | | | | | | | | |
| 613 | Hormidium | Algae | Moss, | LC50 | POP | PGRT | 14 | NR | NR | d | S | DEC | NR | F | | 90 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 17259 | Bednarz, T. | The Effect of Hydrobio | Acta | 1981 | | | | | | | | | | | | | | |
| 499 | Pseudokirchneriella | Green Algae | Moss, | EC50 | POP | ABND | 4 | NR | NR | d | NR | DEC | NR | A | | 100 | | 85 | | 107 | ug/L | FW | LAB | 17639 | Versteeg, D.J. | Comparison of W.Wang, | In: Environ | 1990 | exp | | | | | | | | | | | | | |
| 162 | Pseudokirchneriella | Green Algae | Moss, | EC50 | POP | ABND | 5 | NR | NR | d | S | NR | NR | F | | 100 | | 90 | | 110 | ug/L | FW | LAB | 344 | Office of Pesticide | Pesticide | Environmental | 2000 | | | | | | | | | | | | | | |
| 527 | Algae | Algae | Moss, | LC50 | POP | BMAS | 42 | NR | NR | d | E | | NR | F | | 100 | | NR | | NR | ug/L | FW | FIELDA | 12264 | Goldsborough, Bednarz, T. | Changes in Acta | Hydrobio | 1986 | | | | | | | | | | | | | | |
| 609 | Chlorella pyrenoides | Green Algae | Moss, | LC50 | POP | PGRT | 14 | NR | NR | d | S | DEC | NR | F | | 100 | | NR | | NR | ug/L | FW | LAB | 17259 | Bednarz, T. | The Effect of Hydrobio | Acta | 1981 | | | | | | | | | | | | | | |

Tvorba SSD modelu – vstupní data

| A | D | E | F | G | H | I | M | O | Q | R | S | T | V | AA | AB | AL | AO | AP | AS | AT | AR | AL | AM | AN | AO | AP | AL | AM | AN | AO | AP | AL | |
|-------|----------------------|------------------|---------------|----------|--------|----------------|-------------------|--------------|--------------|----------------|---------------|-------|----------------|-------------|------------------|---------------|---------------|-------------------|---------------|-------------------|------------|------------|---------------|-----------------------------|------------------------|----------------------|---------------------|------------------|-----|----|----|----|------|
| číslo | Species Scientific | Species Common | Species Group | Endpoint | Effect | Effect Measure | Exposure Duration | Min Duration | Max Duration | Duration Units | Exposure Type | Trend | Effect Percent | Conc 1 Type | Conc 1 Op (ug/L) | Conc 1 (ug/L) | Conc 1 Min Op | Conc Min 1 (ug/L) | Conc 1 Max Op | Conc 1 Max (ug/L) | Conc Units | Media Type | Test Location | Reference | Author | Title | Source | Publication Year | poz | | | | |
| 536 | netes | Shrimp, F | ans | LC50 | MOR | MORT | 1 | NR | NR | d | S | INC | NR | F | > | 5600 | | NR | NR | NR | ug/L | FW | LAB | 6797 | F.L.Jr., | Manual of Acute | Resour.P | 1986 | con | | | | |
| 185 | Notropis atherino | Emerald Shiner | Fish | LC50 | MOR | MORT | 4 | NR | NR | d | S | NR | NR | F | > | 18000 | | NR | NR | NR | ug/L | FW | LAB | 344 | Office of Pesticide | Pesticide | Environmental | 2000 | con | | | | |
| 175 | s | Goldfish | Fish | LC50 | MOR | MORT | 4 | NR | NR | d | S | NR | NR | F | > | 32000 | | NR | NR | NR | ug/L | FW | LAB | 344 | Office of Pesticide | Pesticide | Environmental | 2000 | con | | | | |
| 187 | Oncorhynchus | Rainbow Trout | Fish | LC50 | MOR | MORT | 4 | NR | NR | d | R | NR | NR | F | > | 82000 | | NR | NR | NR | ug/L | FW | LAB | 344 | Office of Pesticide | Pesticide | Environmental | 2000 | con | | | | |
| 52 | Pseudokirchneriella | Green Algae | Moss, | EC50 | PHY | PSYN | 1 | NR | NR | d | S | | NR | A | | 2.24 | | 1.74 | 2.90 | ug/L | FW | LAB | 11780 | Turbak, S.C., S.B. Bednarz, | Comparison of The | Water Res. Acta | 1986 | | | | | | |
| 617 | Spirulina platensis | Blue-Green Algae | Moss, | LC50 | POP | PGRT | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | 1981 |
| 611 | Chlorococcum sp. | Green Algae | Moss, | LC50 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | 1981 |
| 614 | Oscillatoria sp. | Blue-Green Algae | Moss, | LC50 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | 1981 |
| 158 | Anabaena | Blue-Green Algae | Moss, | EC50 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | 2000 |
| 88 | Selenastrium sp. | Green Algae | Moss, | IC50 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | 2004 |
| 123 | Chlorella fusca | Green Algae | Moss, | EC50 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | 2001 |
| 88 | Selenastrium sp. | Green Algae | Moss, | IC50 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | 2004 |
| 616 | Scenedesmus | Green Algae | Moss, | LC50 | POP | PGRT | 14 | NR | NR | d | S | DEC | NR | F | | 65 | | NR | NR | NR | ug/L | FW | LAB | 17259 | T. Faust, | Effect of Additive | Hydrobio Sci.Total | 1981 | | | | | |
| 441 | Chlorella fusca | Green Algae | Moss, | EC50 | POP | GPOP | 1 | NR | NR | d | S | NR | NR | F | | 73 | | NR | NR | NR | ug/L | FW | LAB | 4332 | M., R. Kamaya, | Effects of Effect of | Environ. Bull. Envi | 1993 | | | | | |
| 90 | Selenastrium sp. | Green Algae | Moss, | IC50 | POP | ABND | 3 | NR | NR | d | S | DEC | NR | F | | 73.6 | | NR | NR | NR | ug/L | FW | LAB | 84045 | Y., T. Ma, J., | Medium Acute | ron.Cont Bull. Envi | 2004 | | | | | |
| 124 | Chlorella pyrenoides | Green Algae | Moss, | EC50 | POP | PGRT | 4 | NR | NR | d | S | DEC | NR | F | | 82 | | NR | NR | NR | ug/L | FW | LAB | 61983 | W. Liang, Bednarz, | Toxicity The | ron.Cont Acta | 2001 | | | | | |
| 608 | Chlorella desmosum | Green Algae | Moss, | LC50 | POP | PGRT | 14 | NR | NR | d | S | DEC | NR | F | | 87 | | NR | NR | NR | ug/L | FW | LAB | 17259 | T. Bednarz, | Effect of Pesticide | Hydrobio Environ | 1981 | | | | | |
| 160 | Navicula pelliculosa | Diatom | Moss, | EC50 | POP | ABND | 5 | NR | NR | d | S | NR | NR | F | | 90 | 80 | | 100 | ug/L | FW | LAB | 344 | Office of Pesticide | Pesticide | Environmental | 2000 | | | | | | |
| 773 | Perca sp. | Perch | Fish | LC50 | MOR | MORT | 4 | NR | NR | d | S | | NR | F | | 90 | | NR | NR | NR | ug/L | FW | LAB | 7199 | R., K. Bednarz, | Evaluati The | Soc.Toxic Acta | 1975 | | | | | |
| 613 | Hormidium | Green Algae | Moss, | LC50 | POP | PGRT | 14 | NR | NR | d | S | DEC | NR | F | | 90 | | NR | NR | NR | ug/L | FW | LAB | 17259 | T. Versteeg, | Effect of Compari | Hydrobio In: | 1981 | | | | | |
| 499 | Pseudokirchneriella | Green Algae | Moss, | EC50 | POP | ABND | 4 | NR | NR | d | NR | DEC | NR | A | | 100 | | 85 | 107 | ug/L | FW | LAB | 17639 | , D.J. Office of Pesticide | son of Environ | W.Wang, | 1990 | exp | | | | | |
| 18 | Pseudokirchneriella | Green Algae | Moss, | EC50 | POP | ABND | 5 | NR | NR | d | S | NR | NR | F | | 100 | | 90 | 110 | ug/L | FW | LAB | 344 | Office of Pesticide | Pesticide | Environmental | 2000 | | | | | | |
| 527 | Chlorella pyrenoides | Green Algae | Moss, | LC50 | POP | BMAS | 42 | NR | NR | d | E | | NR | F | | 100 | | NR | NR | NR | ug/L | FW | FIELDA | 12264 | Goldsborough, Bednarz, | Changes in The | Hydrobio Acta | 1986 | | | | | |
| 609 | Chlorella pyrenoides | Green Algae | Moss, | LC50 | POP | PGRT | 14 | NR | NR | d | S | DEC | NR | F | | 100 | | NR | NR | NR | ug/L | FW | LAB | 17259 | T. Bednarz, | Effect of | Hydrobio | 1981 | | | | | |

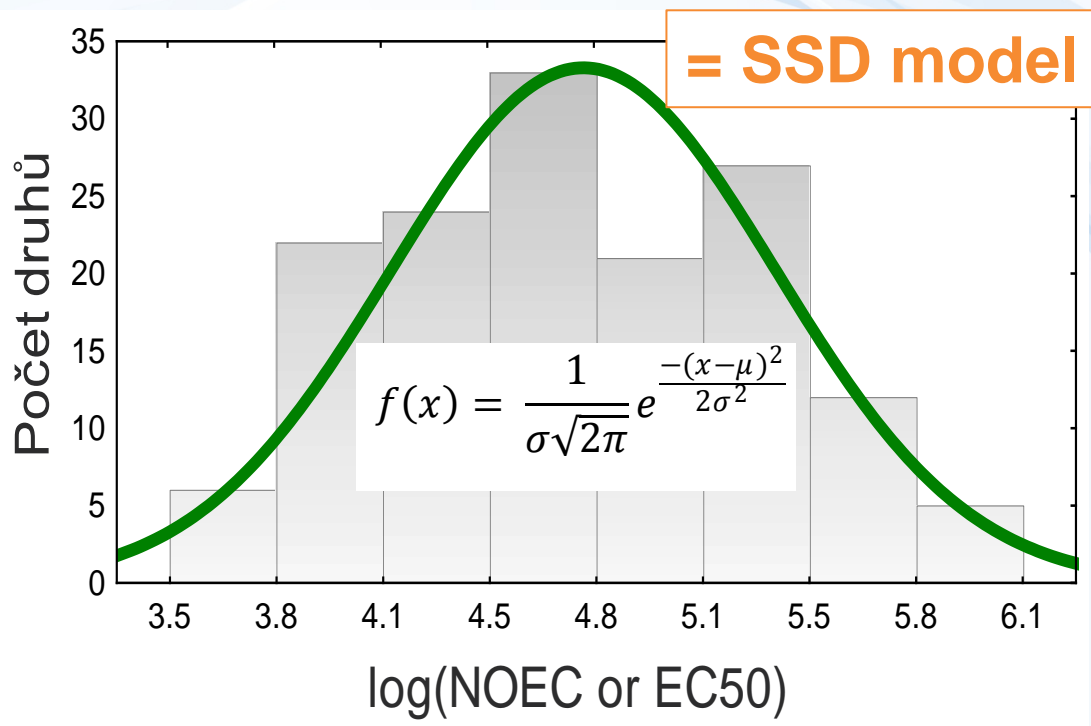
• do SSD vždy pouze jedna EC50 (NOEC) hodnota pro jeden druh



a) Druhová EC50 s nejnižší hodnotou

b) průměr všech EC50 hodnot pro tento druh

Tvorba SSD modelu – aproximace Gaussovou distribucí



μ ... aritmetický průměr
 σ ... směrodatná odchylka
 x ... hodnota na ose x
(hodnota log(EC50) z databáze), pro kterou funkce vypočítá hustotu pravděpodobnosti $f(x)$

→ ETX 2.0 software / Statistica software



Tvorba SSD modelu – ověření normality

a) Testy normality

(Anderson-Darling nebo Kolmogorov-Smirnov test)

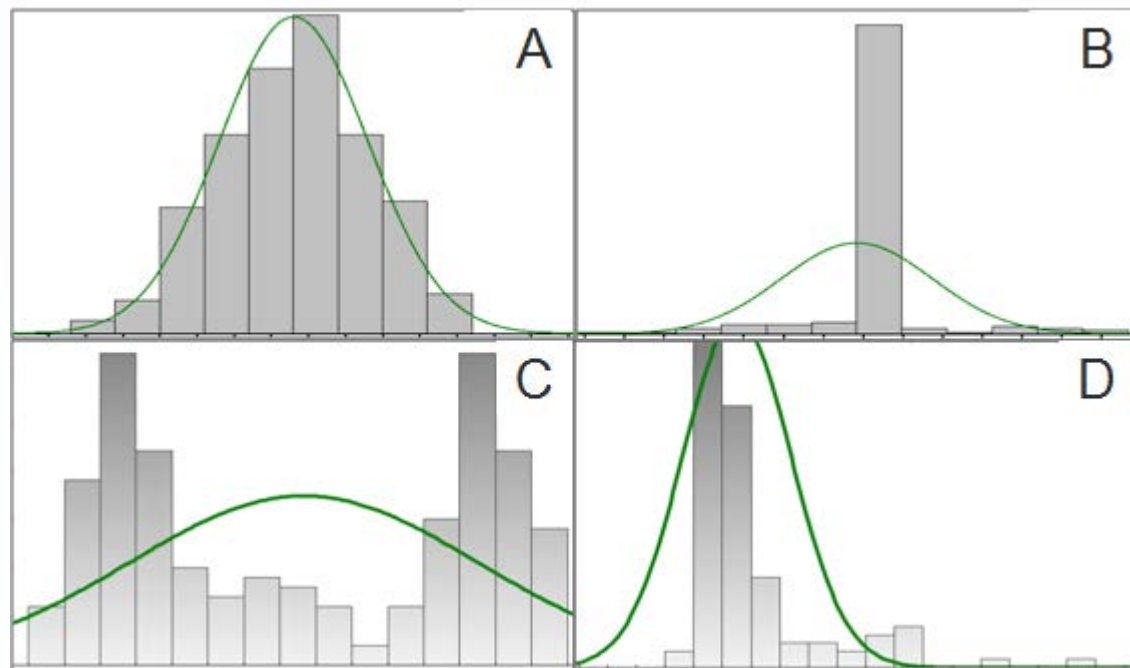
- $p \geq 0,05 \rightarrow$ použitá data logEC50 (či logNOEC) splňují normalitu a aproximace Gaussovou (normální) distribucí je adekvátní
- $p < 0,05 \rightarrow$???

b) Optické posouzení



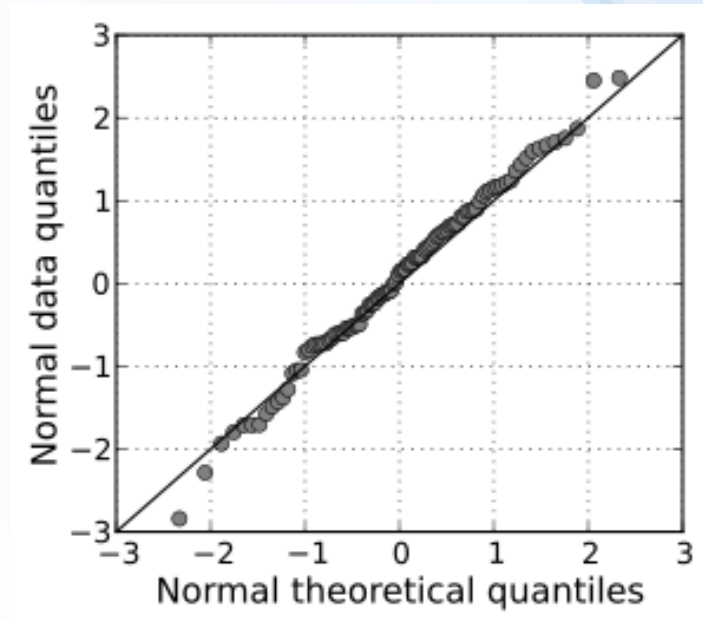
Tvorba SSD modelu – ověření normality

b) Optické posouzení – z histogramu



Tvorba SSD modelu – ověření normality

b) Optické posouzení – z P-P plotu či Q-Q plotu



Q-Q plot

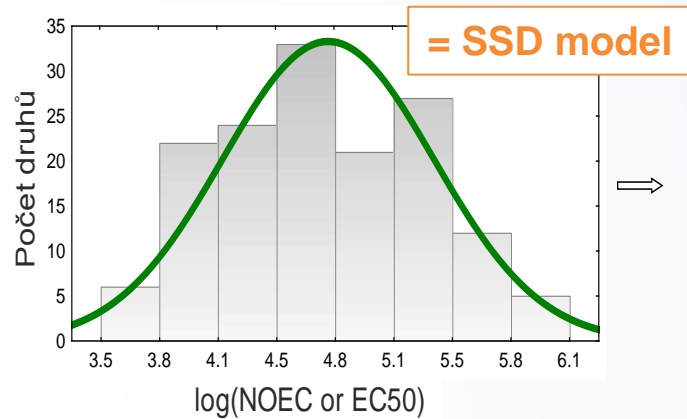


Tvorba SSD modelu – výpočet HCp a PAF

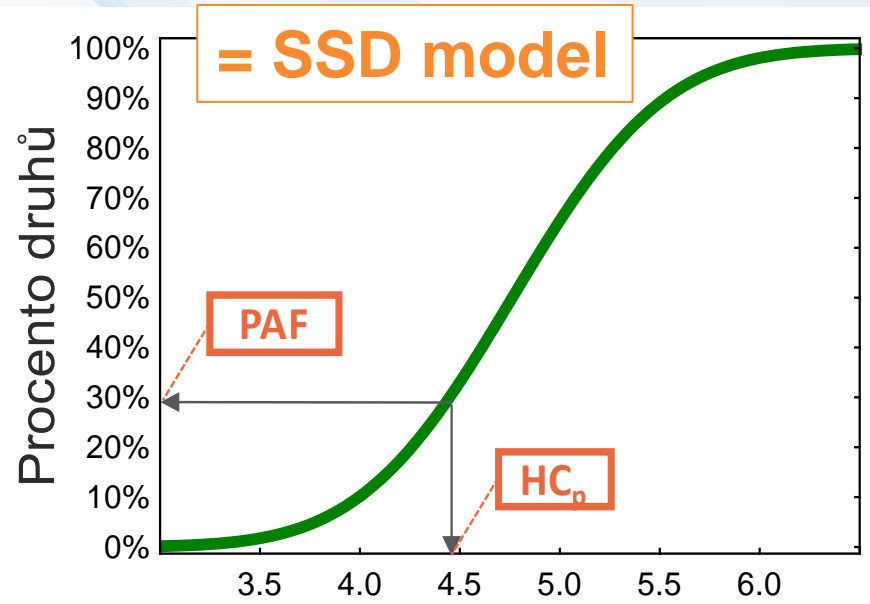
Hustotní funkce



Kumulativní distribuční funkce



$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$



$$F(x) = \int_{-\infty}^x \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} dx$$

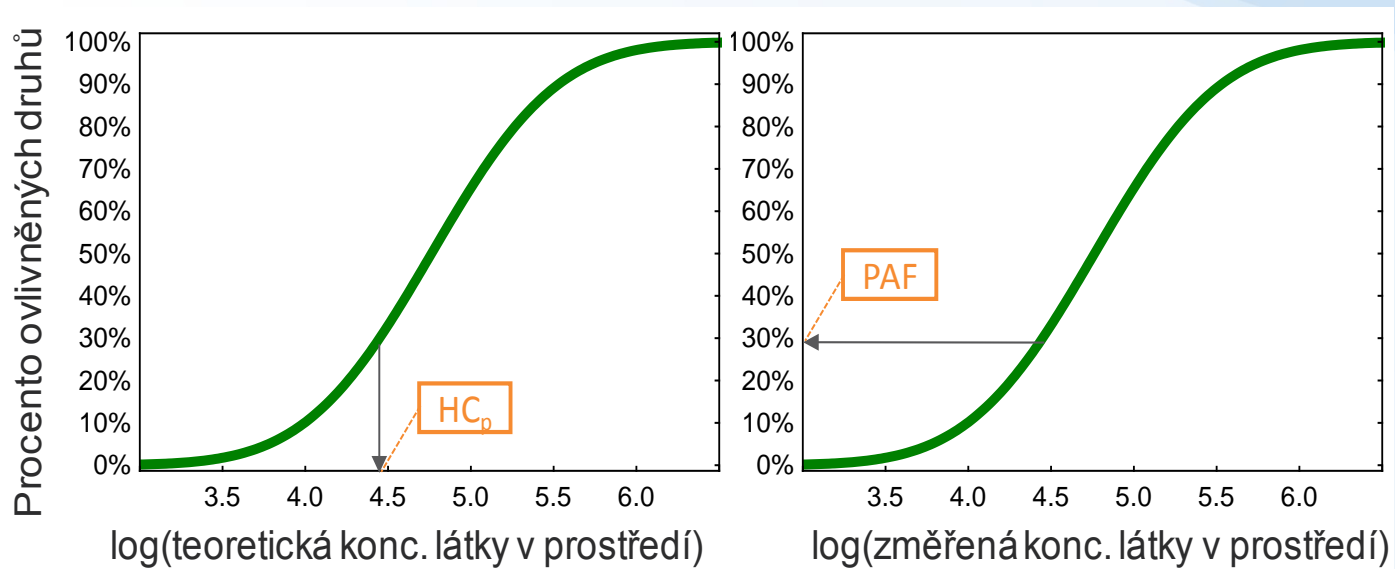


Tvorba SSD modelu – výpočet HCp a PAF

$$F(x) = \int_{-\infty}^x \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} dx$$

○ ... známé parametry modelu

!! Změna významu osy x (už ne logEC50 či logNOEC) !!



Tvorba SSD modelu – výpočet HCp a PAF

$$F(x) = \int_{-\infty}^x \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} dx$$

Výpočet PAF (tj. $F(x)$) a HCp (tj. 10^x) ne úplně triviální



ETX 2.0

Excel (funkce NORMDIST a NORMINV)



Modifikace SSD modelu

- Aproximace rozložení $\log(\text{EC50})$ či $\log(\text{NOEC})$ hodnot jinou než Gaussovou (normální) distribucí : logistická, triangulární, ...
- Použití neparametrických technik či Bayesovské statistiky pro tvorbu SSD modelu
 - Použití pouze vybraných taxonomických skupin (např. primárních producentů v případě tvorby SSD modelu pro herbicid)



Limitace SSD modelu

- Je HC₅ opravdu dostatečný limit ?
- Jaké je minimální množství druhových dat sensitivity (např. hodnot logEC50), aby z nich vytvořený SSD model nebyl výrazně zkreslený?
(EU doporučuje minimálně 10 hodnot z různých taxonomických skupin)
- Jsou splněny základní předpoklady SSD metody?
(resp. Vadí jejich nesplnění?)



Limitace SSD modelu

Základní předpoklady SSD metody

- Hodnoty EC50 (či NOEC) v databázi pro SSD popisují citlivost náhodného a reprezentativního výběru společenstva organismů
 - Laboratorní sensitivita odpovídá reálné
 - Neexistují „důležitější“ druhy
 - Neexistují interakce mezi druhy
 - Neexistují další environmentální faktory ovlivňující sensitivitu



Limitace SSD modelu

„Všechny modely jsou špatně.
Některé ale mohou být užitečné.“

George E. P. Box

... A model Species Sensitivity Distribution se užitečným být zdá...



Závěr – návrat k teoretickému příkladu

U jedné továrny vyrábějící insekticid XY leží chráněné jezero, ve kterém žijí velmi vzácné druhy organismů.



Byla vytvořena databáze vhodných akutních EC50 hodnot látky XY pro různé sladkovodní druhy a z logaritmů těchto hodnot byl vytvořen model SSD, kterým byla stanovena bezpečná koncentrace nepoškozující ekosystém **neboli HC₅ (XY)**

na 1,8 µg/l



Jednoho dne se v továrně stala nehoda, insekticid XY unikl do okolí a jeho koncentrace v jezeře byla 1 den zvýšená na 9,6 µg/l. Poté začala klesat.



Podle již vytvořeného SSD modelu bylo nejen rychle zjištěno, že bezpečný limit látky XY byl překročen, ale dokonce i to, že tato koncentrace bude mít potenciálně **negativní akutní vliv na 74% druhů žijících v jezeře (PAF = 74%)**

