

DOI: 10.18372/2310-5461.42.13753

УДК 574.64

О. В. Безвербна, аспірант
Національний авіаційний університет
<https://orcid.org/0000-0003-0199-138X>
e-mail: elena.chumanova@gmail.com

ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ МЕТОДІВ ЕКСТРАПОЛЯЦІЇ ЛАБОРАТОРНИХ ДАНИХ НА РІВЕНЬ ЕКОСИСТЕМИ У ВОДНІЙ ЕКОТОКСИКОЛОГІЇ

Вступ

На практиці неможливо провести лабораторні та польові дослідження для всіх видів організмів, які входять до складу біоценозу, а також точно відтворити в лабораторному експерименті всі комбінації умов і факторів впливу. Саме тому виникає необхідність пошуку найбільш чіткої моделі екстраполяції даних з лабораторних умов на рівень екосистеми.

Екстраполяцією називається використання реально наявної інформації для передбачення або прогнозу подій в іншій ситуації, яка за своїми біологічними характеристиками, тимчасовими параметрами або просторовим розташуванням відрізняється від умов, у яких були отримані вихідні дані [1]. Екстраполяція даних застосовується для оцінки екологічних ефектів під час визначення ризику та встановлення екологічних критеріїв якості навколишнього середовища. Окремою складовою комплексної системи оцінки екологічного ризику є лабораторні токсикологічні експерименти — біотести — спрямовані на визначення ефекту від впливу шкідливих факторів на тест-організми, адаптовані до контрольованих стандартних умов проживання [2; 3].

Екстраполяція токсикологічних даних з біотестів на екосистему проводиться шляхом визначення прогнозованої безпечної концентрації PNEC (Predicted No-Effect Concentration), яка розраховується методом коефіцієнтів безпеки або методом емпіричних статистичних моделей.

Метод коефіцієнтів безпеки базується на відношенні найменшого значення $LC(EC)_{50}$ з профілю токсичності до відповідного коефіцієнту безпеки, який залежить від кількості і якості даних у даному профілі токсичності і не включає статистичну оцінку результатів біотестування:

$$CC = \frac{LC(EC)_{50}}{SF}, \quad (1)$$

де CC — безпечна концентрація токсиканта; $LC(EC)_{50}$ — найменше значення у профілі токсичності напівлетальної (або напівмаксимальної ефективної) концентрації токсиканта; SF — коефіцієнт безпеки, який залежить від кількості досліджених трофічних рівнів, наявності даних щодо концентрацій, які не викликають ефекту — NOEC (no observed effect concentration), а також результатів досліджень хронічної токсичності.

Аналіз останніх досліджень і публікацій

Використання коефіцієнтів безпеки для розрахунку PNEC, а отже, і для екстраполяції даних з лабораторних умов на екосистему, широко критикується в літературі [4]. Оскільки більшість екстраполяцій виконується без наявності реальних даних, одним з найважливіших завдань статистичного аналізу стає обґрунтування міри невизначеності, яка задає необхідний «запас міцності» при охороні особливо значущих видів організмів. Неможливість кількісного визначення вірогідності при застосуванні цього методу призвела до пошуку методів, які ґрунтуються на розподілі чутливості видів, тобто емпіричних статистичних моделях.

Ці моделі припускають, що значення $\log LC(EC)_{50}$, $\ln LC(LC)_{50}$, $\log NOEC$ або $\ln NOEC$, отримані в результаті біотестування на окремих видах, є незалежними випадковими величинами з певним статистичним розподілом для видів, які заселяють водойму. Досліджувані в лабораторії види являють собою одну незалежну вибірку, яка описує чутливість до дії токсиканта. При наявності декількох таких оцінок можна визначити загальний діапазон чутливості для всіх видів. На сьогодні найбільш розповсюдженими є метод Коуймана, Ван Страалена і Деннемана, Локке і Вагнера, Алденберга і Слоба, Заленської-Раджівілл, Стефана, Алденберга і Яворської, а також Ван дер Хоевена.

Метод Коуймана заснований на припущенні, що $LC(EC)_{50}$ найбільш чутливих видів не повинна бути перевищена. У розрахунках враховується середнє арифметичне зі значень $\ln LC(EC)_{50}$, отримане для декількох біоіндикаторів, поділене на коефіцієнт безпеки [5]. Розраховується так звана ризикова концентрація для чутливих видів організмів HCS (англ. *Hazardous Concentration For Sensitive Species*), яка повинна бути нижчою, ніж значення $LC(EC)_{50}$ для видів, присутніх у досліджуваному середовищі. Для розрахунку HCS Коуйман використовує таку формулу:

$$HCS = \frac{1}{T} \exp(\mu), \quad (2)$$

де μ — середнє арифметичне число x_i , яке відповідає $\ln LC(EC)_{50}$ для i -го виду; T — коефіцієнт придатності, який розраховується за формулами

$$T = \exp\left[\frac{3d_m S_m C_n}{\pi^2}\right]; \quad (3)$$

$$C_n = \ln \frac{(1 - \delta_1)^{1/n}}{1 - (1 - \delta_1)^{1/n}}, \quad (4)$$

де n — кількість видів, що заселяє екосистему; m — кількість досліджуваних видів; S_m — стандартне відхилення значень x_i для m досліджуваних видів; δ_1 — імовірність того, що $LC(EC)_{50}$ найбільш чутливого виду буде нижчим, ніж HCS; δ_2 — імовірність перевищення значення HCS (зазвичай приймається $\delta_1 = \delta_2 = 0,05$); d_m — квантиль порядку $1 - \delta_2$ розподілу випадкової величини S_m .

Метод Ван Страалена і Деннемана ґрунтується на процедурі Коуймана, проте вихідними даними в цьому випадку є значення $\ln NOEC$ [6]. Метод дозволяє розрахувати концентрацію, небезпечну для p % видів у водоймі — HCS_p (англ. *Hazardous Concentration for p percent of species in a community*).

Значення p приймається як 5 — HCS_5 , тобто концентрація токсиканта, яка дозволяє «ушкодити» 5 % видів, які заселяють середовище. Інакше кажучи, значення HCS_5 може бути вищим за $NOEC$ лише для 5 % видів живих організмів у водоймі. Згідно з даним методом небезпечна концентрація розраховується за формулами 5–7:

$$HCS_p = \frac{1}{T} \exp(\mu); \quad (5)$$

$$T = \exp\left[\frac{3d_m S_m C_1}{\pi^2}\right]; \quad (6)$$

$$C_1 = \ln \frac{1 - \delta_1}{\delta_1}, \quad (7)$$

де p — процент видів, що не охороняється небезпечною концентрацією HCS_p ; T — коефіцієнт придатності; x_i — значення $\ln(NOEC)$ i -го виду; μ — середнє арифметичне число x_i ; m — кількість досліджуваних видів; S_m — стандартне відхилення значень x_i для m досліджуваних видів; δ_1 — імовірність перевищення значення HCS_p (зазвичай приймається $\delta_1 = p = 0,05$); d_m — квантиль порядку $1 - \delta_1$ розподілу випадкової величини S_m .

Алденберг і Слоба [7], а також Вагнер і Локке [8] модифікували метод Ван Страалена та Деннемана. Алденберг і Слоба представили нові сталі екстраполяції для 95 і 50 % рівня довіри, отримавши їх шляхом комп'ютерного моделювання. Автори припустили, що визначена цим методом безпечна концентрація HCS_5 може бути вища 5 % видів у водоймі. В той час, як більшість емпіричних статистичних моделей ґрунтуються на логарифмічно-логістичному розподілі, Вагнер та Локке припустили, що логарифмічно-нормальний розподіл, застосований до моделі визначення безпечних концентрацій на основі значень $NOEC$, є більш доцільним.

Алденберг та Яворска прийшли до висновку, що недостатньо статистичних інструментів для розмежування різних розподілів при роботі з малими вибірками. Вони запропонували свої власні коефіцієнти в залежності від розміру вибірки, рівня довіри та кількості видів, які знаходяться під загрозою [9].

Метод Стефана передбачає логарифмічно-трикутний розподіл видових середніх хронічних значень GMCV (англ. *Genus Mean Chronic Value*) і дозволяє розрахувати остаточне хронічне значення концентрації токсиканта FCV (ang. *Final Chronic Value*), яке є безпечним для 95 % видів в досліджуваній екосистемі. Складність даного методу полягає в тому, що для розрахунку необхідно мати інформацію про токсичність досліджуваної сполуки для визначених автором певних видів живих організмів [10].

Методи Заленської-Радживілл та Ван-дер-Хоевена можуть застосовуватися тоді, коли дані, отримані в результаті біотестування, не підлягають статистичному розподілу, який використовується для їх аналізу. Вони базуються на обчисленні значення PNEC, де найменшою мірою передбачається розподіл чутливості видів [11; 12; 13].

Як зазначалось вище, в основі всіх охарактеризованих методів екстраполяції лабораторних

даних на рівень екосистеми лежать дані біотестування. Проте для визначення екологічного ризику в Україні часто відсутні відповідні гідробіологічні дані внаслідок ряду недоліків системи моніторингу довкілля. Тому О. О. Дем'яновою та О. В. Рибаловою було запропоновано методикою оцінювання екологічного ризику погіршення стану водних об'єктів, яка може використовуватись за відсутності даних біотестування і базується на даних гідрохімічних спостережень [14].

Мета статті (постановка завдання)

Метою статті є порівняння різних методів екстраполяції лабораторних токсикологічних даних на рівень екосистеми на прикладі розрахунку токсичності фенолу для водних екосистем.

Виклад основного матеріалу

Згідно з методикою дослідження проведено такі види біотестів з представниками різних

трофічних рівнів: тест на виживання ракоподібних *Daphnia magna Straus*, ензиматичний тест з організмами *Daphnia magna Straus*, тест на виживання личинок комах *Chironomus sp.*, ензиматичний тест з люмінесцентними бактеріями *Vibrio fischeri*, тест на виживання типу Toxkit на ракоподібних *Artemia salina*, тест на розмноження водоростей *Desmodesmus cenodinium* та тест на розмноження бактерій *Pseudomonas fluorescens*.

Результати біотестування представлено у вигляді напівлетальних (напівмаксимальних ефективних) концентрацій $LC(EC)_{50}$, на основі яких отримано профіль токсичності фенолу (табл. 1).

За допомогою профілю токсичності проведено розрахунок безпечної концентрації даного токсиканту методами коефіцієнтів безпеки та емпіричних статистичних моделей (методом Коуїмана та методом Ван Страалена і Деннемана).

Таблиця 1

Профіль токсичності фенолу

№ з.п	Тест-об'єкт	Вид тесту	Час тесту, [год]	$LC(EC)_{50}$, [мг/л]	NOEC
1	<i>Daphnia magna</i>	Виживання	48	10	1,000
2	<i>Chironomus sp.</i>	Виживання	48	15	1,500
3	<i>Daphnia magna</i>	Ензиматичний	1	22	2,200
4	<i>Desmodesmus cenodinium</i>	Розмноження	168	23	2,300
5	<i>Vibrio fischeri</i>	Ензиматичний	0,5	41	4,100
6	<i>Artemia salina</i>	Виживання	24	154	15,400
7	<i>Pseudomonas fluorescens</i>	Розмноження	16	914	91,400

Визначення безпечної концентрації фенолу за допомогою коефіцієнтів безпеки проводилось за формулою (1). Прийнято, що $SF = 1000$, оскільки відомо якнайменше по одному $LC(EC)_{50}$ для кожного з трьох трофічних рівнів тест-об'єктів. Для обчислення використано найменше значення $LC(EC)_{50}$ з профілю токсичності.

Для визначення безпечної концентрації фенолу за методом Коуїмана використано формули (2)–(4). HCS розраховано для різних за біорізноманітністю екосистем, а саме для 100 та 1000 видів живих організмів, що заселяють водойму, а також для різної кількості лабораторних досліджень: для 6 та 7 тест-об'єктів.

Визначення безпечних концентрацій фенолу методом Ван Страалена і Деннемана відбувалось за формулами 5-7. Значення NOEC розраховано

шляхом екстраполяції на основі даних $LC(EC)_{50}$, використовуючи коефіцієнт відношення гострої токсичності до хронічної $ACR = 10$, відповідно до формули:

$$NOEC = \frac{LC(EC)_{50}}{ACR}, \quad (8)$$

Профіль токсичності фенолу дає змогу оцінити, що найбільш чутливими організмами є *Daphnia magna* і *Chironomus sp.*, а найменш чутливими — *Artemia salina* і *Pseudomonas fluorescens*.

Ураховуючи низьку чутливість до фенолу бактерій *Pseudomonas fluorescens* при обчисленні безпечної концентрації за допомогою емпіричних статистичних моделей, цей результат не враховується в розрахунках при $m = 6$.

Результати розрахунку безпечної концентрації фенолу шляхом екстраполяції даних з лабораторних досліджень на рівень екосистеми представлено в табл. 2.

Таблиця 2

Значення безпечної концентрації фенолу для водної екосистеми залежно від методу екстраполяції, кількості видів живих організмів, які заселяють екосистему (n), та кількості тест-об'єктів (m), (мг/л)

Кількість тест-об'єктів	Метод коефіцієнтів безпеки	Метод Коуймана		Метод Ван Страалена і Деннемана
		за кількістю видів, що заселяє екосистему $n = 100$	за кількістю видів, що заселяє екосистему $n = 1000$	
$m = 7$	0,01	0,002	0,0001	0,08
$m = 6$		0,043	0,006	0,23

Відповідно до методу обов'язкових коефіцієнтів безпеки безпечна концентрація фенолу становить 0,01 мг/л. Це значення залежить від кількості і якості даних з профілю токсичності і не включає в себе оцінку ймовірності, а також середнє значення $LC(EC)_{50}$. Проте це швидкий та простий метод.

За методом Коуймана значення HCS сильно залежить від кількості видів, що заселяють водну екосистему, а також кількості досліджених тест-об'єктів. Чим більше результатів біотестів використовується для розрахунку ризикової концентрації, тим нижче її значення. Зі збільшенням кількості видів живих організмів в екосистемі зменшується значення ризикової концентрації. Цей метод є дуже точним і розрахована концентрація значно занижена в порівнянні з результатами інших методів (особливо у випадках, де розглядається занадто висока EC_{50} *Pseudomonas fluorescens*). Це може викликати труднощі в ухваленні управлінських рішень, оскільки підтримка таких низьких концентрацій токсичних речовин практично нереальна.

На відміну від методу Коуймана метод Ван Страалена і Деннемана не враховує кількість видів, що заселяє навколишнє середовище, а вихідними даними є $\ln NOEC$, а не $\ln LC(EC)_{50}$. Тому на точність розрахунку в цьому випадку може вплинути похибка, що виникає в результаті екстраполяції результатів гострої токсичності для розрахунку $NOEC$.

Висновки

Значення безпечної концентрації фенолу для водних екосистем, розрахованої за допомогою трьох різних методів, іноді відрізняються в 1000 разів. Зависокі відсталі значення $LC(EC)_{50}$ істотно занижують результат при використанні методів емпіричних статистичних моделей. Комплексний розрахунок, представлений в даній роботі, дозволяє оцінити, що найбільш достовірна безпечна концентрація становить близько 0,043–0,08 мг/л.

Отже, при обчисленнях рекомендовано не враховувати занадто відсталі значення $LC(EC)_{50}$ найменш чутливих тест-об'єктів при розрахунку безпечної концентрації забруднювача Методом Коуймана і враховувати всі значення з ряду обчислень $LC(EC)_{50}$ при використанні методу Ван Страалена і Деннемана. Впевнитись, чи дійсно розрахована концентрація безпечна для водного середовища, можна за допомогою верифікації безпечної концентрації в штучних екосистемах.

Перевагами такої перевірки є те, що вона враховує вплив деградації навколишнього середовища, міграції, біотрансформації та взаємодії токсичних речовин, що не передбачено вищерозглянутими методами.

Розрахунок безпечної концентрації токсиканта є невід'ємною частиною екстраполяції лабораторних даних на рівень екосистеми і застосовується для оцінки екологічних ефектів під час визначення ризику та встановлення екологічних критеріїв якості навколишнього середовища, а також є важливим інструментом для розробки ефективної стратегії управління водними ресурсами при вирішенні питання щодо першочерговості впровадження природоохоронних заходів з метою мінімізації негативних наслідків антропогенного впливу на стан водних екосистем.

ЛІТЕРАТУРА

1. **Extrapolation** practice for ecotoxicological effect characterization of chemicals / K. R. Solomon, T. C. M. Brock, D. De Zwart et al. — Boca Raton: CRC Press, 2008. — 408 p., doi:10.1002/ieam.5630050225.
2. **Поромов А. А.**, Терехова В. А., Шитиков В. К. Проблемы использования экстраполяции при оценке риска загрязнения природной среды. *Biodiagnostics and assessment of environmental quality: approaches, methods, criteria and reference standards in ecotoxicology*. Book of Abstracts of the International Symposium, October 25–28, 2016, Moscow, Russia, GEOS, 2016. 434 p. GEOS, 2016. С. 180–189.

3. **Бойченко С. В.**, Черняк Л. М., Радомська М. М., Бондарук А. В. Проблема очищення природних водойм, забруднених стічними водами об'єктів сфери нафтопродуктозабезпечення. *Наукоємні технології*. 2015. № 4 (28), С. 353–357. doi:10.18372/2310-5461.28.9682
4. **Forbes V. E.**, Calow, P. Species sensitivity distributions revisited: A critical appraisal. *Human and Ecological Risk Assessment*. 2002. no. 8 (3). 473–492. doi:10.1080/10807030290879781.
5. **Kooijman S. A. L. M.** A safety factor for LC50 values allowing for differences in sensitivity among species. *Water Research*. 1987. no. 21. 269–276. doi:10.1016/0043-1354(87)90205-3.
6. **Van Leeuwen, K.** Van Leeuwen. Ecotoxicological effects assessment in The Netherlands; Recent development. *Environmental Management*. 1990. no. 14. 779-792. doi:10.1007/BF02394172.
7. **Aldenberg Tom & Slob, Wout.** Confidence Limits for Hazardous Concentrations Based on Logistically Distributed NOEC Toxicity Data. *Ecotoxicology and environmental safety*. 1993, no. 25, 48-63, doi:10.1006/eesa.1993.1006.
8. **Wagner, C.**, Løkke H. Estimation of ecotoxicological protection levels from NOEC toxicity data. *Water Research*. 1991. no. 25 (10). 1237–1242. doi:10.1016/0043-1354(91)90062-U.
9. **Aldenberg T.**, Jaworska J. Uncertainty of the Hazardous Concentration and Fraction Affected for Normal Species Sensitivity Distributions. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 2000, no. 46, 1–18, doi:10.1006/eesa.1999.1869.
10. **Stephan C. E.**, Mount D. J. Hanse, Gentile J. H., Chapman, G. A. and Brungs W. A. Guidelines for Deriving Numerical National Water Quality Criteria for the Protection Of Aquatic Organisms and Their Uses. U.S. EPA report. 1985.
11. **Załęska-Radziwiłł M.** Wyznaczanie bezpiecznych stężeń zanieczyszczeń w wodach powierzchniowych na podstawie testów toksykologicznych. *Ochrona Środowiska i Zasobów Naturalnych*. 1999. №18. С. 491–501.
12. **Van der Hoeven, N.** Estimating the 5-Percentile of the Species Sensitivity Distributions Without Any Assumptions about the Distribution. *Ecotoxicology*. 2001. no. 10 (1). 25–34. doi:10.1023/A:1008998405241.
13. **Załęska-Radziwiłł M.** Badania ekotoksikologiczne w procesie ekologicznej oceny ryzyka w środowisku wodnym. Warszawa, 2007. 196 s.
14. **Дем'янова О. М.**, Рибалова О. В. Новий підхід до оцінювання екологічного ризику погіршення стану басейну річки Інгулець в Херсонській області. *Восточно-Европейский журнал передовых технологий*. 2013. № 1, С. 45–49.

Безвербна О. В.

ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ МЕТОДІВ ЕКСТРАПОЛЯЦІЇ ЛАБОРАТОРНИХ ДАНИХ НА РІВЕНЬ ЕКОСИСТЕМИ У ВОДНІЙ ЕКОТОКСИКОЛОГІЇ

Для оцінки екологічних ефектів під час визначення ризику на практиці неможливо провести лабораторні та польові дослідження для всіх видів організмів, які входять до складу біоценозу, а також точно відтворити в лабораторному експерименті всі комбінації умов і факторів впливу. Саме тому виникає необхідність пошуку найбільш чіткої моделі екстраполяції даних з лабораторних токсикологічних експериментів — біотестів — на рівень водної екосистеми. Не залежно від методу обчислення, всі такі моделі засновані на визначенні прогнозованої безпечної концентрації забруднювача для живих організмів, які заселяють водоїму.

В роботі порівняно різні методи екстраполяції лабораторних токсикологічних даних на рівень екосистеми на прикладі визначення токсичності фенолу для водних об'єктів. Розрахунок проведено на основі результатів біотестування методами коефіцієнтів безпеки та емпіричних статистичних моделей (методом Коуймана та методом Ван Страалена і Деннемана).

Метод коефіцієнтів безпеки є найбільш простим та швидким, проте його результат сильно залежить від кількості і якості даних з профілю токсичності і не включає в себе оцінку ймовірності. Значення безпечної концентрації, обчислені методом Ван Страалена і Деннемана, є найвищими. На точність розрахунку в даному випадку впливає похибка, що виникає при розрахунку NOEC на основі значень $LC(EC)_{50}$. Метод Коуймана, натомість, є занадто точним. Розрахована згідно нього безпечна концентрація значно занижена в порівнянні з результатами інших методів, оскільки вона сильно залежить від кількості видів, що заселяють водну екосистему, а також кількості досліджених тест-об'єктів.

З'ясовано, що при застосуванні методу Коуймана високі відсталі значення $LC(EC)_{50}$ найменш чутливих тест-об'єктів істотно занижують безпечну концентрацію токсиканта, що може викликати труднощі в ухваленні управлінських рішень. Задля отримання найбільш достовірних результатів рекомендовано не враховувати занадто відсталі значення $LC(EC)_{50}$ при розрахунку безпечної концентрації забруднювача методом Коуймана і враховувати всі значення з ряду обчислень $LC(EC)_{50}$ при застосуванні методу Ван Страалена і Деннемана.

Ключові слова: екстраполяція даних; біотестування; безпечна концентрація; фенол; водна екосистема; метод коефіцієнтів безпеки; емпіричні статистичні моделі; метод Коуймана; метод Ван Страалена і Деннемана.

Bezverbna O.

COMPARATIVE ANALYSIS OF EXTRAPOLATION METHODS OF LABORATORY DATA TO THE ECOSYSTEM LEVEL IN AQUATIC ECOTOXICOLOGY

In order to assess the environmental effects during risk assessment, in practice it is impossible to conduct laboratory and field studies for all types of organisms in the biocenosis, as well as accurately reproduce in a laboratory experiment all combinations of conditions and factors of influence. That is why it is necessary to find the most precise model of data extrapolation from laboratory toxicological experiments - bioassays - to the level of aquatic ecosystem. Regardless of the calculation method, all such models are based on determining the predicted no-effect concentration of the pollutant for living organisms that populate the reservoir.

Different methods of extrapolation of laboratory toxicity data to ecosystem level are compared by the example of determining the toxicity of phenol to water bodies. Calculation is based on bioassay results and carried out by methods of safety factors and empirical statistical models (Kooijman's method and method of Van Straalen and Denneman).

The method of safety factor is the simplest and fastest, but its outcome strongly depends on the quantity and quality of the toxicity profile data and does not include the probability estimation. The safe concentration value, calculated by the method of Van Straalen and Denneman, is the highest. The error occurring during estimation of NOEC on the basis of $LC(EC)_{50}$ values affects on the calculation in this case. Instead, the Kooijman method is very precise. The safe concentration calculated according to this method is significantly understated in comparison with the results of other methods, because it strongly depends on the number of species inhabiting the aquatic ecosystem and the number of investigated test objects.

It has been found that when using the Kooijman's method too high backward $LC(EC)_{50}$ values of the least sensitive test objects significantly reduce the safe concentration of a pollutant. These may cause difficulties in decision-making process. In order to obtain the most reliable results, it is recommended not to consider too backward $LC(EC)_{50}$ values using Kooijman's method for calculation of safe concentration of the pollutant and to take into consideration all values from $LC(EC)_{50}$ calculation line using the method of Van Straalen and Denneman.

Keywords: extrapolation of data; bioassay; safe concentration; phenol; aquatic ecosystem; method of safety factors; empirical statistical models; method of Kooijman; method of Van Straalen and Denneman.

Безвербная Е. В.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ ЭКСТРАПОЛЯЦИИ ЛАБОРАТОРНЫХ ДАННЫХ НА УРОВЕНЬ ЭКОСИСТЕМЫ В ВОДНОЙ ЭКОТОКСИКОЛОГИИ

Для оценки экологических эффектов при определении риска на практике невозможно провести лабораторные и полевые исследования для всех видов организмов, которые входят в состав биоценоза, а также точно воспроизвести в лабораторном эксперименте все комбинации условий и факторов влияния. Именно поэтому возникает необходимость поиска наиболее четкой модели экстраполяции данных с лабораторных токсикологических экспериментов - биотестов - на уровень водной экосистемы. Независимо от метода вычисления, все такие модели основаны на определении прогнозируемой безопасной концентрации загрязнителя для живых организмов, заселяющих водоём. В работе сравниваются разные методы экстраполяции лабораторных токсикологических данных на уровень экосистемы на примере определения токсичности фенола для водных объектов. Расчет проведен на основе результатов биотестирования методами коэффициентов безопасности и эмпирических статистических моделей (методом Коуймана и методом Ван Страалена и Деннемана).

Метод коэффициентов безопасности является наиболее простым и быстрым, однако его результат сильно зависит от количества и качества данных из профиля токсичности и не включает в себя оценку вероятности. Значения безопасной концентрации, вычисленные методом Ван Страалена и Деннемана, являются самыми высокими. На точность расчета в данном случае влияет погрешность, возникающая при вычислении NOEC на основе значений $LC(EC)_{50}$. Метод Коуймана является слишком точным. Рассчитанная согласно нему безопасная концентрация значительно занижена по сравнению с результатами других методов, поскольку она сильно зависит от количества видов, заселяющих водную экосистему, а также количества исследованных тест-объектов. Установлено, что при применении метода Коуймана слишком высокие отстающие значение $LC(EC)_{50}$ наименее чувствительных тест-объектов существенно занижают безопасную концентрацию токсиканта, что может вызвать трудности в принятии управленческих решений. Для получения наиболее достоверных результатов рекомендуется не учитывать слишком отстающие значение $LC(EC)_{50}$ при расчете безопасной концентрации загрязнителя методом Коуймана и учитывать все значения из ряда вычислений $LC(EC)_{50}$ при применении метода Ван Страалена и Деннемана.

Ключевые слова: экстраполяция данных; биотестирование; безопасная концентрация; фенол; водная экосистема; метод коэффициентов безопасности; эмпирические статистические модели; метод Коуймана; метод Ван Страалена и Деннемана.

Стаття надійшла до редакції 14.03.2019 р.

Прийнято до друку 12.06.2019 р.