

SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA V BRATISLAVE  
FAKULTA CHEMICKEJ A POTRAVINÁRSKEJ TECHNOLOGIE  
Ústav informatizácie, automatizácie a matematiky



NORMAN Database System: zber a  
vyhodnocovanie údajov o „emerging substances“  
v životnom prostredí

Habilitačná práca

2023

Luboš Čirka

# Podakovanie

Touto cestou sa chcem poďakovať všetkým, vďaka ktorým táto práca vznikla. Najväčšie podakovanie však patrí prof. Ing. Miroslavovi Fikarovi, DrSc., ktorý mi vytváral priestor na odborný aj osobnostný rast od prvého momentu našej spolupráce. V druhom rade patrí podakovanie vedúcemu oddelenia doc. Ing. MSc. Martinovi Klaučovi, PhD. Do tretice sa chcem veľmi pekne poďakovať Ing. Martinovi Kalúzovi, PhD. za jeho podporu a rady.

Luboš Čírka, Bratislava, 2023

Mojej mame.

# Obsah

|  |           |
|--|-----------|
| <b>Poďakovanie</b>                           | <b>i</b>  |
| <b>1 Úvod</b>                                | <b>1</b>  |
| 1.1 Prínosy práce . . . . .                  | 2         |
| <b>2 NORMAN Database System</b>              | <b>3</b>  |
| 2.1 Architektúra NDS . . . . .               | 5         |
| 2.1.1 Návrh databázy . . . . .               | 6         |
| 2.1.2 Vkladanie údajov do databázy . . . . . | 7         |
| 2.2 Modul Suspect List Exchange . . . . .    | 8         |
| 2.3 Modul Substance Database . . . . .       | 8         |
| 2.4 Modul Chemical Occurrence Data . . . . . | 8         |
| 2.5 Modul Ecotoxicology . . . . .            | 9         |
| 2.6 Modul SARS-CoV-2 in Sewage . . . . .     | 14        |
| <b>3 Prioritizácia</b>                       | <b>15</b> |
| <b>4 Záver</b>                               | <b>20</b> |
| <b>A Originálne práce autora</b>             | <b>23</b> |

# Kapitola 1

## Úvod

Zber, spracovanie a analýza environmentálnych zlúčenín sú dôležité činnosti pri skúmaní a monitorovaní znečistenia a kvality životného prostredia. Tieto procesy umožňujú identifikovať prítomnosť a koncentráciu rôznych chemických zlúčenín v životnom prostredí, čo je dôležité pre ochranu verejného zdravia a ekosystémov. Stanovenie priorít v oblasti chemických znečisťujúcich zlúčenín je hlavnou výzvou pre environmentálnych manažérov a tých, ktorí prijímajú rozhodnutia, ale je nevyhnutné zamerať sa na zdroje, ktoré sú k dispozícii na zmierňujúce opatrenia.

Zoznam chemických zlúčenín, ktoré sú v literatúre často diskutované ako „emerging substances“, neustále rastie, pričom niektoré už sú v pokročilom štádiu hodnotenia a môžu sa čoskoro stať regulovanými. Je dôležité sa zaoberať aj zlúčeninami, o ktorých máme obmedzené informácie, a existujú aj neidentifikované novovznikajúce zlúčeniny, ktoré nie sú súčasťou monitorovacích programov. Nie je možné zaoberať sa všetkými týmito zlúčeninami rovnako podrobne. Musia sa identifikovať zlúčeniny s vysokou prioritou pre monitorovanie a/alebo hodnotenie rizika. Ak sú však použité konvenčné metodiky stanovenia priorít, veľká časť týchto nových zlúčenín by sa vyhodila alebo ponechala v pohotovostnom režime pre nedostatok údajov. Je preto dôležité rozhodnúť, ako by sa malo s týmito jednotlivými zlúčeninami zaobchádzať, pokiaľ ide o opatrenia, ktoré sa majú prijať na vyplnenie súčasných medzier. V roku 2010 bola preto zriadená pracovná skupina NORMAN pre stanovovanie priorít vznikajúcich zlúčenín s cieľom vypracovať schému stanovovania priorít pre nové zlúčeniny, v ktorej sú chemikálie uprednostňované podľa potreby, pričom sa zohľadňujú súčasné medzery v poznatkoch (Dulio a von der Ohe (2013)).

NORMAN začala svoju činnosť v roku 2005 s finančnou podporou Európskej komisie (projekt NORMAN). V roku 2009 sa asociácia NORMAN stala stálou samostatne fungujúcou sieťou referenčných laboratórií, výskumných centier a súvisiacich organizácií pre monitorovanie nových environmentálnych zlúčenín. Bola zriadená ako neziskové združenie všetkých zainteresovaných strán zaoberajúcich sa vznikajúcimi environmentálnymi

zlúčeninami. V súčasnosti má viac ako 90 členov. Slovensko v tejto organizácii zastupuje Environmental Institute a Výskumný ústav vodného hospodárstva.

## 1.1 Prínosy práce

Predkladaná habilitačná práca má za cieľ vytvoriť metodiku a implementáciu databázového systému, ktorý poskytuje komplexné informácie o zlúčeninách. Ide najmä o chemické zlúčeniny, ktorých prítomnosť ohrozuje ekosystém a životné prostredie. Vytvorené automatizované databázové riešenie zároveň tvorí základný stavebný kameň na ďalšie inovatívne aplikácie na posúdenie potenciálnej nebezpečnosti a rizík daných zlúčenín v životnom prostredí. Medzi tieto ďalšie aplikácie radíme:

- nasadenie umelej inteligencie (napr. formou strojového učenia) na spracovanie, vyhľadávanie a verifikáciu obrovského množstva údajov o chemických zlúčeninách z rôznych zdrojov,
- vytvorenie univerzálneho API (Application Programming Interface) rozhrania na prepojenie s inými databázovými systémami a ďalšie pokročilé spracovanie údajov.

Prínosy a ciele sumarizované v tejto habilitačnej práci môžeme formulovať nasledovne:

1. Vytvoriť centralizované riešenie na uchovávanie a výmenu informácií o chemických zlúčeninách, ktoré ovplyvňujú životné prostredie.
2. Vytvoriť databázové riešenie napojené na užívateľské rozhranie, ktoré poskytne užívateľom prístup k informáciám na celosvetovom poli, pričom má byť dodržaný princíp *FAIR* – (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable).
3. Zabezpečiť po technickej stránke dlhodobú udržateľnosť databázového riešenia (napr. dbať na normálovú architektúru databázy, integritu vstupných údajov atď.)

Habilitačná práca je podložená 4 časopiseckými publikáciami, pričom publikácia [Taha a kol. \(2022\)](#) opisuje práve potrebu vytvorenia centralizovaného riešenia (Cieľ 1). V publikáciách [Dulio a kol. \(2020\)](#); [Lundy a kol. \(2021\)](#) je databázový systém opísaný ako platforma na rýchle zdieľanie údajov s otvoreným prístupom (Cieľ 2). Databázový systém pozostáva z rozsiahleho počtu vzájomne prepojených tabuliek, pričom objem informácií v ňom neustále narastá ([Dulio a kol. \(2020\)](#); [Taha a kol. \(2022\)](#)). Návrh celého databázového systému je opísaný v tejto habilitačnej práci (Cieľ 3). Údaje z NDS (moduly Chemical Occurrence Data a Ecotoxicology) boli použité pri zostavovaní publikácie [Ng a kol. \(2023\)](#).

## Kapitola 2

# NORMAN Database System

Jedným z prínosov práce je vytvorenie databázového systému NORMAN (NDS – NORMAN Database System) ako referenčnej databázy, ktorá v jednej platforme zhromažďuje veľmi odlišné údaje z monitorovania chemických zlúčenín získané rôznymi technikami a v rôznych ekosystémoch, čím sa zabezpečí harmonizovaný prístup k zhromažďovaniu, ukladaniu, kontrole kvality, uchovávaníu a výmene údajov medzi členmi siete NORMAN. Vývoj systému sa riadi zásadami FAIR (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable).

NDS spolupracuje s informačným systémom pre monitorovanie chemických zlúčenín (IPCHEM<sup>1</sup>) pri zhromažďovaní údajov o monitorovaní chemických cieľov a zároveň pripravuje pôdu pre rozvoj novej európskej infraštruktúry na spracovanie údajov pochádzajúcich z inovatívnych metód, ako je napríklad necieľový skrínig (NTS – Non-Target Screening) a metódy založené na účinkoch (EBM – Effect-Based Methods).

Aktuálne NDS<sup>2</sup> pozostáva z 13 modulov (obr. 2.1):

- **Substance Database** – databáza „emerging substances“,
- **Suspect List Exchange** – platforma na zdieľanie zoznamov zlúčenín potenciálne zodpovedných za vznikajúce riziká pre ekosystémy a ľudské zdravie,
- **Chemical Occurrence Data** – databáza, v ktorej sú uložené údaje monitorovania z rôznych zdrojov, zhromaždených v štandardnom formáte s cieľom uľahčiť porovnateľnosť a využívanie údajov v Európe a mimo nej,
- **Ecotoxicology** – databáza pre odvodenie noriem kvality životného prostredia,
- **SARS-CoV-2 in sewage** – databáza SARS-CoV-2 v odpadových vodách,
- **Substance Factsheets** – databáza súhrnných informácií o všetkých zlúčeninách zo Substance Database,

---

<sup>1</sup>Information Platform for Chemical Monitoring

<sup>2</sup><https://www.norman-network.com/nds/>

**norman**

## NORMAN Database System

NORMAN organises the development and maintenance of various web-based databases for the collection & evaluation of data / information on emerging substances in the environment

**SEARCH All Databases**

Searching for individual substance or group(s) of substances in all databases

**Note:** Click on a link below to go to an individual database home page

**SARS-CoV-2 in sewage**

A database with the latest information on SARS-CoV-2 in sewage across Europe and internationally; including a common protocol for sample collection, storage, extraction, analysis and data sharing to support the development of an international comparable data set.

**Substance Database**

A merged list of NORMAN substances; Central Database to access various lists of substances for suspect screening and prioritisation

**Chemical Occurrence Data**

A database of geo-referenced monitoring data on emerging substances

**Ecotoxicology**

A platform for systematic collection and evaluation of ecotoxicity studies for harmonised derivation of environmental quality standards

**Suspect List Exchange**

Central Database to access various lists of substances for suspect screening and prioritisation

**Antibiotic Resistance Bacteria/Genes**

A database of ARBs/ARGs in environmental matrices

**MassBank Europe**

A database of mass spectra of emerging substances to support identification of unknown substances

**Digital Sample Freezing Platform**

A database of mass chromatograms obtained by LC-HR-MS for retrospective screening of environmental samples

**Indoor Environment**

A database of data in indoor environment matrices

**Passive Sampling**

A database of data obtained with passive samplers

**Substance Factsheets**

A summary information on individual substances from all NORMAN Database System modules

**Prioritisation**

Results of prioritisation of NORMAN substances using the NORMAN Prioritisation Framework

**Bioassays Monitoring Data**

A database of data obtained by analysis of environmental samples with bioassays

**Obr. 2.1:** Uživatelské rozhranie pre NORMAN Database System

- **Prioritisation** – výsledky stanovenia priorít NORMAN zlúčenín,
- **Antibiotic Resistance Bacteria/Genes** – databáza baktérií a génov rezistentných voči antibiotikám,
- **Indoor Environment** – databáza údajov vo vnútornom prostredí,
- **Bioassays Monitoring Data** – databáza údajov získaných analýzou vzoriek životného prostredia pomocou biologických testov,
- **Passive Sampling** – databáza údajov získaných pomocou pasívnych vzorkovačov,
- **Digital Sample Freezing Platform** – platforma digitálneho zmrazovania vzoriek bola vytvorená na zdieľanie údajov hmotnostnej spektrometrie s vysokým rozlíšením,
- **MassBank Europe** – databáza hmotnostných chromatogramov.



## 2.1 Architektúra NDS

Tvorba architektúry databázového systému predstavuje zložitý proces, ktorý vyžaduje dôkladnú analýzu a plánovanie, aby sa zabezpečilo, že bude efektívne spĺňať potreby webovej aplikácie. Tento proces návrhu sme rozdelili do niekoľkých krokov.

Na začiatku projektu sme vykonávali analýzu s cieľom stanoviť, aké informácie budú zaznamenané a akým spôsobom bude systém ukladať a spracovávať tieto údaje. Našou hlavnou prioritou bola rýchlosť čítania a spracovania údajov, a to s ohľadom na obmedzenie hosťujúceho servera. V závislosti na metóde spracovania, analýzy a vizualizácie údajov sme vybrali dva rôzne spôsoby ukladania údajov (Tabuľka 2.1).

Moduly, ktoré sa nachádzajú v prvom riadku Tabuľky 2.1, majú veľký objem údajov. Dáta sú dobre štruktúrované a vzájomne prepojené. Pre takýto typ údajov je najvhodnejšie použiť databázu, ktorá umožňuje efektívne ukladanie, organizáciu a spracovanie údajov. Na prácu s databázou a tvorbu webových stránok s dynamickým obsahom sme použili programovací jazyk PHP, ktorý je jedným z najbežnejšie používaných programovacích jazykov pre vývoj webových aplikácií. Pre štatistické analýzy a výpočty sme zvolili jazyk R.

Jazyk R je použitý aj v moduloch z druhého riadku Tabuľky 2.1. Túto vetvu modulov vyvíja iná pracovná skupina v asociácii NORMAN. Moduly pracujú s väčším množstvom malých súborov.

**Tabuľka 2.1:** Spôsob uloženia údajov v moduloch

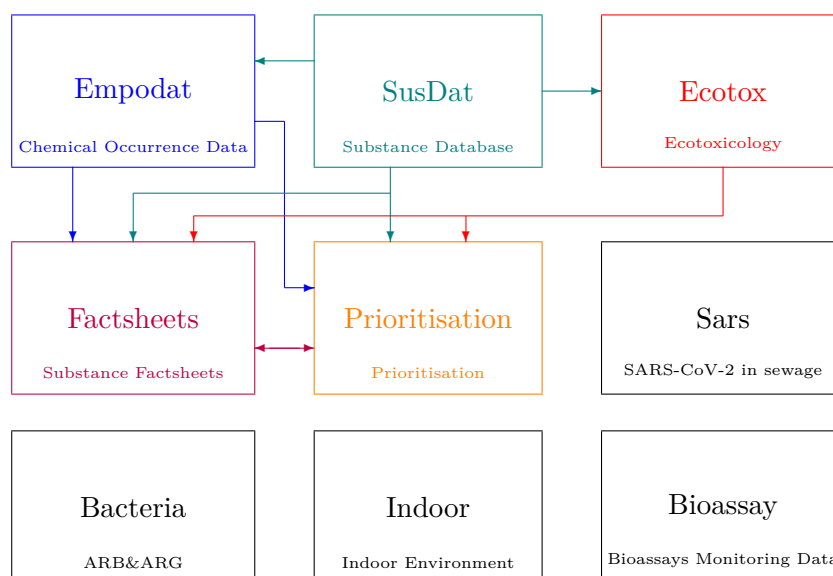
| Modul   | Typ úložiska |
|---|--------------|
| Substance Database<br>Chemical Occurrence Data<br>Ecotoxicology<br>SARS-CoV-2 in sewage<br>Substance Factsheets<br>Prioritisation<br>Antibiotic Resistance Bacteria/Genes<br>Indoor Environment<br>Bioassays Monitoring Data<br>MassBank Europe | databáza     |
| Passive Sampling<br>Digital Sample Freezing Platform<br>Suspect List Exchange   | súbor        |

Pracovná skupina, ktorá vyvíja databázový systém, je tvorená zamestnancami Environmental Institute. Mojou úlohou je správa celého systému a vývoj 9 modulov (Substance Database, Chemical Occurrence Data, Ecotoxicology, SARS-CoV-2 in sewage, Substance Factsheets, Prioritisation, Antibiotic Resistance Bacteria/Genes, Indoor Environment, Bioassays Monitoring Data). Pri vývoji každého modulu aktívne spolupracujem s odborníkom z asociácie NORMAN, ktorý je expertom v príslušnej oblasti.

Vo zvyšnej časti práci sa budeme venovať iba modulom, ktoré priamo vyvíjame a spravujeme.

### 2.1.1 Návrh databázy

Navrhovanie databázového systému zahrňovalo niekoľko fáz. V prvej fáze sme vytvorili konceptuálny model databázy, ktorý opisuje entity (databázy, tabuľky), vzťahy medzi nimi a ich atribúty. Základná štruktúra databázy je reprezentovaná pomocou entitno-relačného diagramu (ERD), ktorý je zobrazený na Obr. 2.2. Tento obrázok reprezentuje iba pohľad na databázy, pretože celý systém obsahuje veľké množstvo tabuliek, ktoré nie je možné zobraziť. Ich počty sú uvedené v Tabuľke 2.2.



Obr. 2.2: ERD databázového systému NDS

Na základe konceptuálneho modelu sme vytvorili logický model databázy. Zdefinovali sme štruktúru tabuliek vrátane stĺpcov, primárnych a cudzích kľúčov a vzájomných vzťahov medzi nimi. V tejto fáze návrhu sme uplatnili normalizáciu s cieľom dosiahnuť 3. normálnu formu (3NF) pre tabuľky.

**Tabuľka 2.2:** Počet tabuliek v jednotlivých databázach

| Modul  | Databáza       | Počet tabuliek |
|--|----------------|----------------|
| Substance Database                             | SusDat         | 26             |
| Chemical Occurrence Data                       | Empodat        | 109            |
| Ecotoxicology                                  | Ecotox         | 42             |
| SARS-CoV-2 in sewage                           | Sars           | 1              |
| Substance Factsheets                           | Factsheets     | 25             |
| Prioritisation                                 | Prioritisation | 4              |
| Antibiotic Resistance Bacteria/Genes (ARB&ARG) | Bacteria       | 42             |
| Indoor Environment                             | Indoor         | 46             |
| Bioassays Monitoring Data                      | Bioassay       | 42             |
| Spolu  |                | 337            |

Ako platformu na ukladanie dát sme sa rozhodli použiť relačný databázový systém MySQL. Fáza fyzického návrhu databázy pre MySQL zahrňovala definíciu tabuliek, kľúčov a obmedzení, indexáciu (pre zrýchlenie vyhľadávania), práva prístupu, zabezpečenie, atď.

### 2.1.2 Vkladanie údajov do databázy

Zhromažďovanie údajov o meraniach chemických zlúčenín si vyžaduje starostlivé plánovanie a pozornosť venovanú detailom, aby boli údaje správne zaznamenané a neskôr ľahko analyzovateľné. Z toho dôvodu bola vytvorená séria predpripravených súborov – DCT šablón (Data Collection Templates) v tabuľkovom procesore Microsoft Excel. Tieto dokumenty obsahujú určitú štruktúru a formátovanie, aby uľahčili vkladanie údajov. Štruktúra tabuliek vychádza z fyzického modelu databázy. Šablóny je možné získať zo stránky [DCT Download](#), ktorá sa nachádza v každom module databázového systému.

Každý pracovný hárok pozostáva z textových buniek a z buniek s rozbaľovacími zoznamami. Rozbaľovacie zoznamy sú použité, pretože obmedzujú hodnoty, ktoré môžu byť zadane do bunky. Tým sa minimalizuje riziko chýb pri vstupe údajov a zabezpečuje sa konzistentnosť dát. Jednotlivé zoznamy na nachádzajú v samostatnom pracovnom hárku s názvom **Drop-down lists**.

Veľké súbory údajov, ktoré sú k dispozícii v inom formáte ako MS Excel, je možné nahrať po komunikácii s tímom NORMAN. V tomto prípade sa jedná o čisto ručné spracovanie údajov, pretože zvyčajne nie je dodržaný formát údajov. Sú to údaje priamo exportované z lokálnych databáz, najčastejšie vo formáte CSV alebo MS Access.

Asociácia NORMAN od začiatku vyvíja veľké úsilie na zabezpečenie toho, aby sa údaje zhromažďovali v štandardnom formáte s cieľom uľahčiť porovnatelnosť a využívanie

údajov v celej Európe i mimo nej. Šablóny sú vypracované pre každý ekosystém a obsahujú informácie umožňujúce automatizované posúdenie kvality údajov (podrobnejšie detaily sú uvedené v našej práci [Dulio a kol. \(2020\)](#)).

## 2.2 Modul Suspect List Exchange

**Suspect List Exchange**<sup>3</sup> (SLE) obsahuje 109 samostatných zbierok zoznamov podozrivých zlúčenín od viac ako 70 prispievateľov z celého sveta s celkovým počtom viac ako 100 000 jedinečných zlúčenín. Triedy zlúčenín zahŕňajú per- a polyfluóralkylové zlúčeniny, liečivá, pesticídy, prírodné toxíny, zlúčeniny s vysokým objemom výroby, na ktoré sa vzťahuje európske nariadenie REACH (ES: 1272/2008), prioritné kontaminanty vzbudzujúce obavy a regulačné zoznamy od partnerov asociácie NORMAN. Niekoľko zoznamov sa zameriava na produkty transformácie a komplexné prvky zistené v životnom prostredí s rôznymi úrovňami informácií o pôvode a štruktúre. Každý zoznam je k dispozícii na samostatné stiahnutie. Zlúčená zbierka je k dispozícii aj ako databáza zlúčenín NORMAN (Substance Database). Obsah SLE sa postupne integruje do veľkých otvorených chemických databáz, ako je PubChem<sup>4</sup> a CompTox Chemicals Dashboard<sup>5</sup>, čo umožňuje ďalší prístup k týmto zoznamom spolu s ďalšími funkciami a vlastnosťami, ktoré tieto zdroje ponúkajú.

## 2.3 Modul Substance Database

Modul **Substance Database**<sup>6</sup> (SusDat) predstavuje zoznam „emerging substances“. Je výsledkom zlúčenia všetkých zoznamov environmentálne relevantných zlúčenín pravidelne prispievaných partnermi NORMAN a aktivít spojených s NORMAN v rámci iniciatívy SLE. Pred konečnou integráciou do databázy zlúčenín SusDat sa systematicky spájajú a upravujú do vhodnej formy na import do databázy. Podrobnejšie je táto problematika vysvetlená v našej publikácii [Taha a kol. \(2022\)](#).

Od roku 2016 sa SusDat používa na prepojenie všetkých databáz NORMAN medzi sebou, ako aj NDS s hlavnými externými databázami.

## 2.4 Modul Chemical Occurrence Data

Modul **Chemical Occurrence Data**<sup>7</sup> (Empodat) poskytuje prehľad referenčných hodnôt výskytu „emerging substances“ v celej Európe, ktoré sú zhromaždené v štandardnom

<sup>3</sup><https://www.norman-network.com/nds/SLE/>

<sup>4</sup><https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

<sup>5</sup><https://comptox.epa.gov/dashboard/>

<sup>6</sup><https://www.norman-network.com/nds/susdat/>

<sup>7</sup><https://www.norman-network.com/nds/empodat/>

**Tabuľka 2.3:** Prehľad počtu záznamov v databáze Empodat

| Ekosystém                      | Percentuálny podiel | Počet údajov |
|--------------------------------|---------------------|--------------|
| Vzduch                         | 0,00 %              | 147          |
| Biota                          | 0,58 %              | 559 875      |
| Sedimenty                      | 0,33 %              | 311 794      |
| Kal z čističiek odpadových vôd | 0,00 %              | 2 837        |
| Pôda                           | 0,00 %              | 358          |
| Suspendované látky             | 0,02 %              | 22 548       |
| Voda                           | 99,06 %             | 94 823 196   |

formáte, aby sa uľahčila porovnateľnosť a využívanie údajov v celej Európe. V Empodat je k dispozícii viac ako 95 miliónov záznamov pre viac ako 4 500 zlúčenín (Tabuľka 2.3). Údaje pochádzajú najmä z vodného prostredia (sladká voda, odpadová voda, morská voda, podzemná voda, sediment a biota), ale vynakladá sa úsilie na zlepšenie pokrytia iných zložiek, najmä pôdy, ovzdušia a vnútorného prostredia.

Prostredníctvom modulu databázy Empodat združenie NORMAN nadviazalo spoluprácu s IPCHEM, oficiálnym európskym úložiskom monitorovacích údajov produkovaných národnými monitorovacími programami a výskumnými projektmi financovanými EÚ vo všetkých ekosystémoch. Na základe tejto spolupráce IPCHEMu pravidelne (na ročnej báze) poskytujeme údaje z databázy Empodat.

## 2.5 Modul Ecotoxicology

Modul **Ecotoxicology**<sup>8</sup> (Ecotox) je určený na systematický zber a hodnotenie experimentálnych štúdií ekotoxicity, ako aj zostavenie existujúcich environmentálnych prahových hodnôt, ktoré sa tiež označujú ako „najnižšie“ predpovedané koncentrácie, ktoré nevykazujú toxický účinok (Lowest PNEC). Takmer všetky zlúčeniny SusDat sa poskytujú s predpokladanými hodnotami PNEC<sup>9</sup> a/alebo experimentálne založenými hodnotami účinku (ak sú k dispozícii) na výpočet rizík na podporu stanovenia priorít týchto zlúčenín.

V rámci tohto modulu sme tiež vyvinuli sériu online nástrojov:

**PNEC Derivation** – nástroj na odvodenie „cieľových hodnôt kvality“ (Quality Targets)

**Search Quality Target** – nástroj na výber jedinej spoločnej hodnoty PNEC (Lowest PNEC),

<sup>8</sup><https://www.norman-network.com/nds/ecotox/>

<sup>9</sup>PNEC – Predicted No-Effect Concentrations

NORMAN Ecotoxicology Database — PNEC derivation Luboš Činka

[Other compound](#)

PNEC derivation for: Simetryn

PNEC<sub>fw</sub> acute

| BiocetID  | Compartment  | Taxonomic group | Test endpoint                                | Effect / Effect measurement | Test type           | Exposure                    | Op. | Effect value [µg/L] | Measured or nominal        | Reliability | Reference | Select studies for this PNEC | #2 |
|-----------|--------------|-----------------|--|-----------------------------|---------------------|-----------------------------|-----|---------------------|----------------------------|-------------|-----------|------------------------------|----|
| EPA117892 | freshwater   | Crustaceans     | Moina macrocopa LC50 (48 h)                  | Mortality                   | experimental result | static   pH n.r.            |     | 32000               | nominal                    | 5           | EPA984    | <input type="checkbox"/>     | 1  |
| EPA117893 | freshwater   | Crustaceans     | Daphnia magna LC50 (48 h)                    | Mortality                   | experimental result | static   pH n.r.            |     | 50000               | nominal                    | 5           | EPA984    | <input type="checkbox"/>     | 1  |
| EPA118280 | freshwater   | Algae           | Pseudokirchneriella subcapitata EC50 (72 h)  | Population                  | experimental result | static   pH n.r.            |     | 6.6                 | measured (not specified)   | 5           | EPA9322   | <input type="checkbox"/>     | 1  |
| EPA142446 | marine water | Crustaceans     | Artemia salina EC50 (24 h)                   | Intoxication                | experimental result | static   pH n.r.            |     | 57000               | nominal                    | 5           | EPA15077  | <input type="checkbox"/>     | 1  |
| EPA156671 | freshwater   | Crustaceans     | Paratya compressa ssp. improvisa LC50 (48 h) | Mortality                   | experimental result | static   pH n.r.            |     | 14700               | nominal                    | 5           | EPA984    | <input type="checkbox"/>     | 1  |
| EPA183511 | freshwater   | Algae           | Gonium sp. EC50 (96 h)                       | Population                  | experimental result | static   pH 7.5 (-)         |     | 8.8                 | nominal                    | 5           | EPA668    | <input type="checkbox"/>     | 1  |
| EPA183516 | freshwater   | Algae           | Pandora morum EC50 (96 h)                    | Population                  | experimental result | static   pH 7.5 (-)         |     | 6.2                 | nominal                    | 5           | EPA668    | <input type="checkbox"/>     | 3  |
| EPA183565 | freshwater   | Algae           | Anabaena flos-aquae EC50 (7 d)               | Population                  | experimental result | static   pH 9.0 (-)         |     | 9.8                 | nominal                    | 5           | EPA668    | <input type="checkbox"/>     | 1  |
| EPA223585 | freshwater   | Insects         | Citison dipiterum LD50 (24 h)                | Mortality                   | experimental result | n.r.   pH n.r.              |     | > 40000             | nominal                    | 5           | EPA654    | <input type="checkbox"/>     | 1  |
| EPA223586 | freshwater   | Insects         | Citison dipiterum LD50 (48 h)                | Mortality                   | experimental result | n.r.   pH n.r.              |     | 22000               | nominal                    | 5           | EPA654    | <input type="checkbox"/>     | 1  |
| EPA235649 | freshwater   | Amphibians      | Silurana tropicalis LC50 (96 h)              | Mortality                   | experimental result | renewal   pH (6.8 - 7.6)    |     | 3700                | chemical analysis reported | 5           | EPA172886 | <input type="checkbox"/>     | 1  |
| EPA256908 | freshwater   | Algae           | Chlorella flosco var. vaucolata EC50 (24 h)  | Population                  | experimental result | static   pH 6.7 (-)         |     | 10.2                | measured (not specified)   | 5           | EPA82304  | <input type="checkbox"/>     | 1  |
| EPA256913 | freshwater   | Fish            | Ictaluridae LC50 (96 h)                      | Mortality                   | experimental result | static   pH (6.8 - 7.6)     |     | 8000                | nominal                    | 5           | EPA546    | <input type="checkbox"/>     | 1  |
| EPA49347  | freshwater   | Fish            | Oncorhynchus mykiss LC50 (96 h)              | Mortality                   | experimental result | static   pH (6.8 - 7.6)     |     | 7000                | nominal                    | 5           | EPA546    | <input type="checkbox"/>     | 2  |
| EPA49348  | freshwater   | Fish            | Carassius carassius LC50 (96 h)              | Mortality                   | experimental result | static   pH (6.8 - 7.6)     |     | 27000               | nominal                    | 5           | EPA546    | <input type="checkbox"/>     | 1  |
| EPA49349  | freshwater   | Fish            | Lepomis macrochirus LC50 (96 h)              | Mortality                   | experimental result | static   pH (6.8 - 7.6)     |     | 25000               | nominal                    | 5           | EPA546    | <input type="checkbox"/>     | 1  |
| EPA49722  | freshwater   | Fish            | Oncorhynchus mykiss LC50 (96 h)              | Mortality                   | experimental result | static   pH 7.0 (6.8 - 7.6) |     | 7000                | nominal                    | 5           | EPA7199   | <input type="checkbox"/>     | 1  |

Showing 17 entries [Define PNEC](#)

| #  | PNEC type                   | Test endpoint                             | Effect value [µg/L] | PNEC derivation Method | AF   | Justification   | PNEC value | Editor | Date                 |
|----|-----------------------------|---|---------------------|------------------------|------|---|------------|--------|----------------------|
| #1 | PNEC <sub>fw</sub> acute    | Pseudokirchneriella subcapitata@C50(72 h) | 6.6                 | deterministic          | 10   | At least one short-term L(E)C50 from each of three trophic levels (i.e. base seq) | 6.61       | MJ     | 01-12-2020 09:37 PDF |
| #2 | PNEC <sub>fw</sub> LT acute | Pandora morum@EC50(96 h)                  | 6.2                 | deterministic          | 100  | At least one short-term L(E)C50 from each of three trophic levels (i.e. base seq) | 6.062      | PvO    | 01-12-2020 10:27 PDF |
| #3 | PNEC <sub>fw</sub> LT acute | Pandora morum@EC50(96 h)                  | 6.2                 | deterministic          | 1000 | At least one short-term L(E)C50 from each of three trophic levels (i.e. base seq) | 6.0662     | PvO    | 01-12-2020 11:48 PDF |

PNEC<sub>fw</sub> chronic

PNEC<sub>marine</sub> acute

Obr. 2.3: Formulár PNEC Derivation

**CRED Evaluation** – nástroj na identifikáciu spoľahlivých štúdií ekotoxicity na základe klasifikačného systému CRED.

Prístup k týmto nástrojom je obmedzený iba pre odborníkov asociácie NORMAN, ktorí sa špecializujú na ekotoxicitu.

## PNEC Derivation

Nástroj **PNEC Derivation** (Obr. 2.3) umožňuje odvodiť Quality Targets z vybraných „spoľahlivých“ štúdií ekotoxicity. Základnou podmienkou je, že musia byť zvolené minimálne tri štúdie. K dispozícii je formulár, v ktorom môžu odborníci pridelať body 1, 2 a 3 jednotlivým štúdiám. Body 2 a 3 môžu byť priradené iba raz, pričom 3 bodmi by mala byť označená kľúčová štúdia. Na základe bodovania sa automaticky navrhnu metódy odvodenia PNEC a príslušný faktor hodnotenia AF. Hodnota PNEC je získaná ako podiel Effect value a AF. Aktívne odvodenia Quality Targets (riadky so zeleným pozadím) vstupujú do nástroja Search Quality Target, v ktorom sa nachádzajú aj údaje z iných zdrojov (napr. portál REACH, databáza ETOX, predpovede QSAR, ...).

NORMAN Ecotoxicology Database – Search Quality Target Luboš Čírka

[Other compound](#)

Search Quality Target for: Triclosan

**PNEC<sub>freshwater</sub>**

Search:

| PNEC ID*                        | PNEC type   | PNEC type country | Institution  | Scientific name<br>Endpoint Duration Effect                  | Derivation method | AF   | Justification   | PNEC value | Remarks                           | Editor | Biotest ID | Vote                     | Σ | GF | PDF                 |
|---------------------------------|-------------|-------------------|--|--|-------------------|------|---|------------|-----------------------------------|--------|------------|--------------------------|---|----|---------------------|
| <a href="#">PNEC-ID-0039003</a> | P-PNEC pred |                   | NORMAN   | <i>Tetrahymena pyriformis</i><br>IC50 48 h growth rate       | Deterministic     | 1000 | One predicted short-term L(E)C50 from each of three trophic levels (i.e. base set)  | 2.78       | n.a.                              | n.r.   |            | <input type="checkbox"/> |   |    | <a href="#">PDF</a> |
| <a href="#">PNEC-ID-0039004</a> | P-PNEC pred |                   | NORMAN   | <i>Daphnia magna</i><br>LC50 48 h mortality                  | Deterministic     | 1000 | One predicted short-term L(E)C50 from each of three trophic levels (i.e. base set)  | 0.49       | n.a.                              | n.r.   |            | <input type="checkbox"/> |   |    | <a href="#">PDF</a> |
| <a href="#">PNEC-ID-0039005</a> | P-PNEC pred |                   | NORMAN   | <i>Selenastrum capricornutum</i><br>EC50 72 h immobilisation | Deterministic     | 1000 | One predicted short-term L(E)C50 from each of three trophic levels (i.e. base set)  | 0.28       | n.a.                              | n.r.   |            | <input type="checkbox"/> |   |    | <a href="#">PDF</a> |
| <a href="#">PNEC-ID-0039006</a> | P-PNEC pred |                   | NORMAN   | <i>Pimephales promelas</i><br>LC50 96 h mortality            | Deterministic     | 1000 | One predicted short-term L(E)C50 from each of three trophic levels (i.e. base set)  | 0.23       | n.a.                              | n.r.   |            | <input type="checkbox"/> | 1 |    | <a href="#">PDF</a> |
| <a href="#">PNEC-ID-0257586</a> | PNECfw It   | JD-UQN            | EPA_US   | <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i><br>n.r. n.r. n.r.     | Deterministic     | 10   | Long-term results (e.g. EC10 or NOECs) from at least three species (normally fish, Daphnia and algae) representing three trophic levels | 0.02       | UBA (2016) Oberflächengewässer VO | PvO    | n.r.       | <input type="checkbox"/> | 2 |    | <a href="#">PDF</a> |
| <a href="#">PNEC-ID-0344539</a> | PNECfw It   | CQC               | Schweizerisches Zentrum für angewandte Oekotoxikologie | n.r.<br>n.r. n.r. n.r.                                       | n.r.              | n.r. | n.r.  | 0.11       | n.r.                              | n.r.   |            | <input type="checkbox"/> | 3 | 3  | <a href="#">PDF</a> |

Showing 6 entries [Save](#)

| #  | PNEC type   | PNEC type country | Institution  | Scientific name<br>Endpoint Duration Effect               | AF   | PNEC value | Editor | PNEC ID                         | Date             |
|----|-------------|-------------------|--|---|------|------------|--------|---------------------------------|------------------|
| #1 | P-PNEC pred |                   | NORMAN   |   | 1000 | 0.23       | PvO    | <a href="#">PNEC-ID-0039006</a> | 26.03.2018 00:00 |
| #2 | PNECfw It   | JD-UQN            | EPA_US   | <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i><br> n.r. n.r. n.r. | 10   | 0.02       | PvO    | <a href="#">PNEC-ID-0257586</a> | 03.10.2018 00:00 |
| #3 | PNECfw It   | CQC               | Schweizerisches Zentrum für angewandte Oekotoxikologie | n.r.<br> n.r. n.r. n.r.                                   | n.r. | 0.11       | GF     | <a href="#">PNEC-ID-0344539</a> | 27.11.2022 00:00 |

Obr. 2.4: Nástroj na hľadanie Lowest PNEC

### Search Quality Target

Podobne, ako pri **PNEC Derivation**, aj v tomto prípade je k dispozícii formulár, v ktorom môžu odborníci pridelať body 0, 1, 2 a 3 existujúcim Quality Targets. Body 1, 2 a 3 môžu byť priradené iba raz (1 – najnižšia priorita, 3 – najvyššia priorita). Na Obr. 2.4 je zobrazený formulár na voľbu Lowest PNEC pre zlúčeninu Triclosan. Hodnota PNEC, ktorá má v súčte najvyšší počet bodov (stĺpec Σ), sa stáva najmenšou hodnotou PNEC (Lowest PNEC). V druhej tabuľke na Obr. 2.4 môžeme vidieť ako sa menila hodnota Lowest PNEC pre zlúčeninu Triclosan. Na začiatku boli k dispozícii iba predbežné hodnoty PNEC (P-PNEC pred). Z nich si odborník PvO zvolil najmenšiu hodnotu (3/2018). Neskôr pribudli dve nové kolekcie hodnôt PNEC (10/2018 a 11/2022). Po každej kolekci prebehla nová voľba Lowest PNEC. Aktuálna hodnota Lowest PNEC je v riadku so zeleným pozadím.

Zoznam hodnôt Lowest PNEC pre všetky zlúčeniny je voľne dostupný na stránke

**Tabuľka 2.4:** Odvodenie hodnôt Lowest PNEC pre rôzne ekosystémy

| Ekosystém              | Lowest PNEC  |
|------------------------|--|
| Morská voda            | Lowest PNEC <sub>fw</sub> /10                      |
| Sedimenty              | Lowest PNEC <sub>fw</sub> *2.6*(0.615 + 0.019*Koc) |
| Biota (ryby)           | Lowest PNEC <sub>fw</sub> *BCF                     |
| Morská biota (ryby)    | Lowest PNEC <sub>fw</sub> *BCF/10                  |
| Biota (mäkkýše)        | Lowest PNEC <sub>fw</sub> *BCF/4                   |
| Morská biota (mäkkýše) | Lowest PNEC <sub>fw</sub> *BCF/10/4                |

**Tabuľka 2.5:** Priradenie kategórie na základe výsledku testu

| Skóre  | Kategória |
|--------|-----------|
| > 75 % | 1         |
| > 65 % | 2         |
| > 35 % | 3         |
| ≤ 35 % | 4         |

**LOWEST PNECS**<sup>10</sup>. Väčšina hodnôt Lowest PNEC je odvodená pre sladkú vodu (Lowest PNEC<sub>fw</sub>). Pokiaľ neexistuje experimentálna hodnota, na odvodenie hodnôt Lowest PNEC sa používajú výpočty uvedené v Tabuľke 2.4, kde BCF je biokoncentračný faktor a Koc je koeficient adsorpcie v pôde. Parametre BCF a Koc sa nachádzajú v databáze Factsheets.

### CRED Evaluation

Pri odvodzovaní PNEC je potrebné vyhodnotiť spoľahlivosť štúdií ekotoxicity. Nástroj CRED Evaluation (Obr. 2.5) využíva metódu hodnotenia CRED (Criteria for Reporting and Evaluating Ecotoxicity Data), ktorá zahŕňa 20 kritérií spoľahlivosti (Moermond a kol. (2016)).

Metóda hodnotenia CRED používa 4 kategórie spoľahlivosti: spoľahlivé (1 – reliable), spoľahlivé s obmedzeniami (2 – reliable with restrictions), nespoľahlivé (3 – not reliable) a nepriraditeľné (4 – not assignable). Podrobnejší opis týchto kategórií je uvedený v Moermond a kol. (2016). Podľa výsledkov testu sa štúdia zaradí do kategórie spoľahlivosti podľa Tabuľky 2.5.

<sup>10</sup><https://www.norman-network.com/nds/ecotox/lowestPnecsIndex.php>



CRED evaluation for: Triclosan

Biotest ID: EPA2050440

| Number  | Question   | Parameter               | Value                                  | Edit      | Screening score     | Max score        | Final comment/comment                        | Evaluation          | Score |        |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |
|---|--|-------------------------|--|-----------|---------------------|------------------|--|---------------------|-------|--------|------------|-------------|-------|-----------|---------|------|-----|-----|----------|--------|-------|-------|---------------------|------------------|-----|
| 1   | Is a guideline method (e.g., OECD/ISO) or modified guideline used?*  |                         |  |           | 3.00                | 3                |  | fulfilled           | 3     |        |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |
| 2   | Is the test performed under GLP conditions?*   |                         |  |           | 0.00                | 3                |  | partially fulfilled | 1.5   |        |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |
| 3   | If applicable, are validity criteria fulfilled (e.g. control survival, growth)?  |                         |  |           | 27.50               | 30               |  | not fulfilled       | 15    |        |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |
| 4   | Are appropriate controls performed (e.g. solvent control, negative and positive control)?  |                         |  |           | 8.00                | 9                |  | partially fulfilled | 4.5   |        |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |
| 5   | Is the test substance identified clearly with name or CAS-number? Are test results reported for the appropriate compound?                                      |                         |  |           | 3.00                | 3                | The compound is not clearly identified (i.e. | partially fulfilled | 1.5   |        |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |
| 5a  | Is the test substance identified clearly with name or CAS-number and are test results reported for the appropriate compound?                                   | Substance name          | 5-Chloro-2-(2,4-dichlorophenoxy)phenol |           | 0.75                | 3                |  | partially fulfilled | 1.5   |        |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |
|   |  | CAS Number              | 3380345                                |           | 0.75                |                  |  |                     |       |        |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |
|   |  | EC Number               | n.a.                                   |           | 0.75                |                  |  |                     |       |        |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |
|   |  | Radio labeled substance | n.r.                                   |           | 0.75                |                  |  |                     |       |        |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |
| ...   |  |                         |  |           |                     |                  |  |                     |       |        |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |
| 19  | Is a concentration-response curve observed? Is the response statistically significant?   |                         |  |           | 6.00                | 6                |  | partially fulfilled | 3     |        |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |
| 20  | Are sufficient data available to check the calculation of endpoints and (if applicable) validity criteria (e.g., control data, concentration-response curves)? |                         |  |           | 1.50                | 3                |  | partially fulfilled | 1.5   |        |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |
|   |  |                         |  |           | Total score:        | 143.5            | 145  |                     |       | 95.5   |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |
|   |  |                         |  |           | Total score [%]:    | 98.97            |  |                     |       | 65.86  |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |
| Summary evaluation: <span>reliable</span> Summary final comment: <span>This is just a test</span> <span>Save</span>   |  |                         |  |           |                     |                  |  |                     |       |        |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |
| <table border="1"> <thead> <tr> <th>Expert</th> <th>Evaluation</th> <th>Total Score</th> <th>Score</th> <th>Score [%]</th> <th>Comment</th> <th>Date</th> <th>PDF</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>PVO</td> <td>reliable</td> <td>145.00</td> <td>97.00</td> <td>66.90</td> <td>This is just a test</td> <td>20.04.2023 09:27</td> <td>PDF</td> </tr> </tbody> </table> |  |                         |  |           |                     |                  |  |                     |       | Expert | Evaluation | Total Score | Score | Score [%] | Comment | Date | PDF | PVO | reliable | 145.00 | 97.00 | 66.90 | This is just a test | 20.04.2023 09:27 | PDF |
| Expert  | Evaluation   | Total Score             | Score                                  | Score [%] | Comment             | Date             | PDF  |                     |       |        |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |
| PVO   | reliable   | 145.00                  | 97.00                                  | 66.90     | This is just a test | 20.04.2023 09:27 | PDF  |                     |       |        |            |             |       |           |         |      |     |     |          |        |       |       |                     |                  |     |

Obr. 2.5: Formulár CRED Evaluation

**Tabuľka 2.6:** Prehľad počtu súborov údajov v databáze Sars podľa krajín.

| Krajina         | Počet súborov |
|-----------------|---------------|
| Česká republika | 23            |
| Cyprus          | 91            |
| Fínsko          | 9             |
| Grécko          | 758           |
| Luxembursko     | 2             |
| Rakúsko         | 59            |
| Saudská Arábia  | 12            |
| Slovensko       | 87            |
| Španielsko      | 119           |
| Švédsko         | 10            |
| Taliansko       | 18            |

## 2.6 Modul SARS-CoV-2 in Sewage

Od vypuknutia pandémie Covid19 skupiny zaoberajúce sa výskumom odpadových vôd na celom svete zbierajú vzorky odpadových vôd na testovanie prítomnosti vírusovej RNA SARS-CoV-2. Modul **SARS-CoV-2 in sewage**<sup>11</sup> (Sars) je databáza, ktorá bola vytvorená na harmonizáciu metodík merania ľudských biomarkerov v odpadových vodách na hodnotenie životného štýlu, zdravia a expozície na úrovni komunity. Vznikla spoluprácou dvoch medzinárodných sietí NORMAN a SCORE<sup>12</sup>. Štruktúra databázy Sars umožňuje používateľom voľný prístup k údajom na úrovni ČOV, ako aj nahrávanie nových údajov prostredníctvom prispôbenej šablóny na zber údajov (DCT), ktorá uľahčuje ich automatické nahrávanie do systému. Pri prístupe do databázy môžu používatelia vyhľadávať podľa krajiny a/alebo ČOV alebo si prezerať celý súbor údajov (v rámci databázy alebo ho možno exportovať do programu MS Excel) bez akýchkoľvek obmedzení. Údaje zobrazené na webovej stránke obsahujú dátum odberu vzoriek, kópiu génu (počet kópií/ml a/alebo ng RNA/ml), prahovú hodnotu cyklu (Ct), názov ČOV a krajiny, obsluhovanú populáciu a počet osôb, ktoré boli v deň odberu vzoriek hlásené ako pozitívne na SARS-CoV-2 v spádovej oblasti kanalizácie. Detailnejšie informácie prinášame v publikácii Lundy a kol. (2021).

Databáza Sars k dnešnému dňu obsahuje 1188 súborov údajov z jedenástich rôznych krajín (Tabuľka 2.6).

<sup>11</sup>[https://www.norman-network.com/nds/sars\\_cov\\_2](https://www.norman-network.com/nds/sars_cov_2)

<sup>12</sup><https://score-cost.eu>

## Kapitola 3

# Prioritizácia

Stanovenie priorít v oblasti chemických zlúčenín je jednou z úloh pre odborníkov na ochranu životného prostredia a úradov s rozhodovacími právomocami, a to z hľadiska

- definovania prioritných opatrení na prevenciu a kontrolu znečistenia,
- pridelovania zdrojov na riešenie existujúcich nedostatkov v poznatkoch nákladovo efektívnym spôsobom.

V tejto súvislosti by sa údaje z monitorovania chemických zlúčenín mohli systematickejšie a efektívnejšie využívať na účely množstva právnych predpisov EÚ týkajúcich sa chemických zlúčenín. V prípade veľkej väčšiny zlúčenín prítomných alebo predpokladaných v životnom prostredí však väčšina údajov potrebných na podporu rozhodovacieho procesu chýba alebo má nízku kvalitu. Nedostatočné údaje sú jednou z hlavných príčin nedostatočne účinných opatrení na reguláciu kontaminantov vzbudzujúcich obavy (Dulio a kol. (2020)). Nedostatok poznatkov o expozícii ľudí a životného prostredia chemickým látkam uznáva Komisia a členské štáty vo viacerých politických dokumentoch a opatreniach (Carusi a kol. (2022)). Európska komisia prijala v októbri 2020 stratégiu EÚ pre udržateľnosť chemických zlúčenín smerom k životnému prostrediu bez toxických zlúčenín (European Commission: Chemicals Strategy for Sustainability Towards a Toxic-Free Environment, 2020) ako súčasť implementácie „Zelenej dohody“. Navrhuje sa v nej jasný plán a časový harmonogram na riešenie súčasných nedostatkov v znalostiach a účinnejšie a efektívnejšie fungovanie právnych predpisov o chemických zlúčeninách v záujme bezpečného a udržateľného používania chemických zlúčenín. Jedna z obzvlášť dôležitých oblastí súvisí s inovatívnym využívaním údajov z monitorovania chemických zlúčenín a údajov o nebezpečenstve, aby sa rozhodovacím orgánom poskytlo viacero dôkazov na identifikáciu skupín chemických zlúčenín, koncových bodov a zdrojov, ktoré sa musia prioritne riešiť.

Do modulu s názvom **Prioritisation** sme integrovali aplikáciu **Customized Statistics**. Vývoj aplikácie bol postavený na publikáciách Dulio a Slobodnik (2015); Dulio a von der Ohe (2013); von der Ohe a kol. (2011). Tento modul poskytuje odborníkom

na ochranu životného prostredia prehľad o stave poznatkov a medzier v poznatkoch pre správne posúdenie rizika znečisťujúcich zlúčenín vzbudzujúcich obavy v životnom prostredí.

Pôvodne sme aplikáciu Customized Statistics vytvorili v programovacom jazyku PHP s cieľom zabezpečiť istú kompatibilitu s NDS. Neskôr sme zistili, že má veľké obmedzenie v porovnaní s pokročilejšími nástrojmi na analýzu dát, najmä pokiaľ sa pracuje s veľkými a zložitými súborami dát. V takýchto prípadoch je vhodné zvážiť použitie špecializovaných nástrojov na analýzu a správu dát, ako je napríklad Python alebo jazyk R s knižnicami na analýzu dát. Aby sme zabezpečili kompatibilitu s inými vyvíjanými modulmi NDS (Passive Sampling a Digital Sample Freezing Platform), rozhodli sme sa pre jazyk R.

Výstupy z našej vedeckej práce boli rozpracované aj na študentskej úrovni. V diplomovej práci (Nosko, 2019) sme implementáciu aplikácie Customized Statistics previedli z jazyka PHP do jazyka R. Aplikácia prechádza pravidelne testovaním a pridávaním nových funkcionalít na zabezpečenie efektívnosti spracovania údajov a užívateľského komfortu.

Koncepcia prioritizácie zahŕňa dvojstupňový prístup, v ktorom sa látky najprv zaradia do hlavných kategórií opatrení na základe zistených nedostatkov v poznatkoch a opatrení potrebných na ich riešenie. Priorita v rámci každej kategórie sa potom hodnotí na základe špecifického výskytu, nebezpečnosti (perzistencia, bioakumulácia, mobilita, potenciál endokrinných porúch atď.) a ukazovateľov rizika, ako sú frekvencia prekročenia (FoE) a rozsah prekročenia (EoE) najnižších hodnôt PNEC (Lowest PNEC) (Dulio a kol. (2020)).

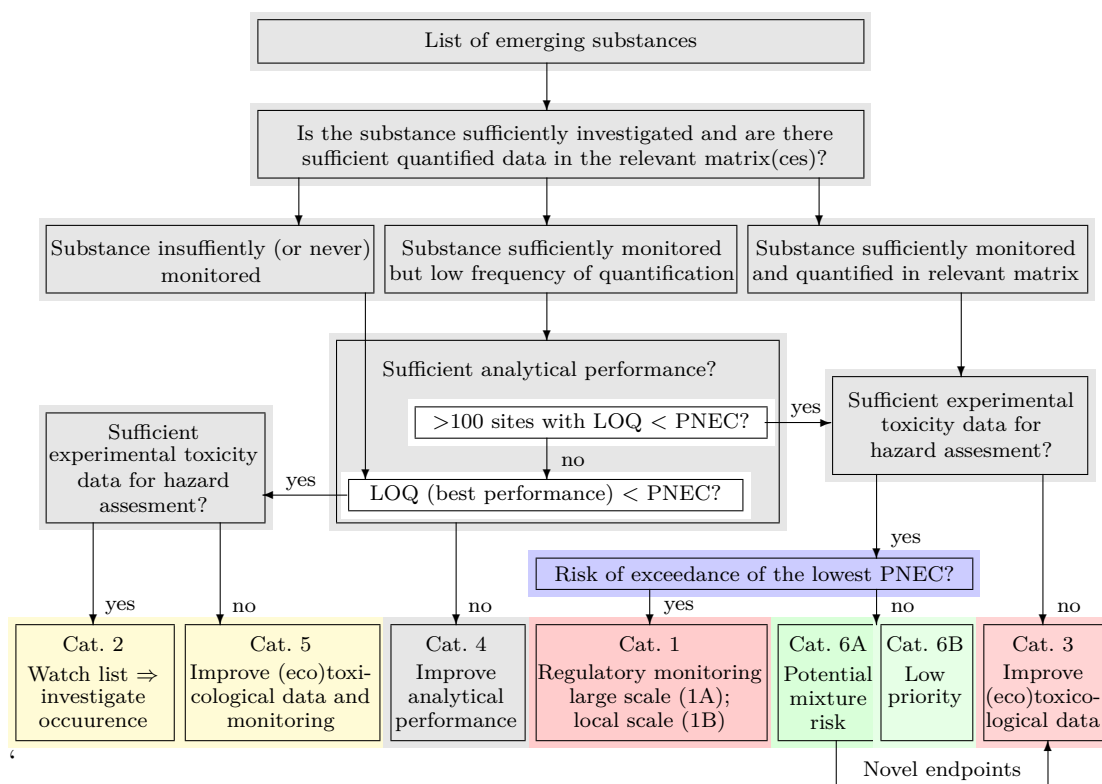
Experti z asociácie NORMAN identifikovali šesť hlavných kategórií na základe najčastejšie identifikovaných nedostatkov v poznatkoch (Dulio a von der Ohe (2013) – Tabuľka 3.1):

Aplikácia Customized Statistics kategorizuje jednotlivé zlúčeniny na základe vývojového diagramu na Obr. 3.1. Užívatelia môžu prostredníctvom formulára na Obr. 3.2 zadať vstupné údaje do procesu kategorizácie. Aplikácia využíva údaje získané automaticky z NDS, vrátane kandidátskych zlúčenín na stanovenie priorít (databáza SuSdat), georeferenčných údajov z monitorovania zlúčenín (databáza Empodat), údajov o ekotoxikologických účinkoch (databáza Ecotox), fyzikálno-chemických a iných vlastností záujmových zlúčenín (databáza Factsheets). Výsledkom celého procesu je rozsiahla tabuľka na Obr. 3.3. Kvôli lepšiemu zobrazeniu bola rozdelená do 4 riadkov. Zobrazenie tabuľky sa da rozšíriť o ďalších 36 stĺpcov s pomocnými údajmi.

Je dôležité zdôrazniť, že proces kategorizácie zlúčenín a určovania priorít je iteračný proces, ktorý zahŕňa pravidelnú revíziu prioritných zlúčenín v každej kategórii vždy, keď sa získajú nové informácie a/alebo spoľahlivejšie údaje alebo keď je k dispozícii spätná väzba z uplatňovaných opatrení na zníženie emisií (Dulio a von der Ohe (2013)).

**Tabuľka 3.1:** Zoznam kategórií prioritných opatrení

| <b>Kat.</b> | <b>Súčasná situácia / medzery v poznatkoch</b>  | <b>Kategórie opatrení / činnosti potrebné na riešenie nedostatkov v poznatkoch</b>   |
|-------------|---|--|
| 1           | Dostatočné dôkazy o vystavení a prekročení spoľahlivých prahových hodnôt, ktoré nie sú nebezpečné (normy kvality)   | Požadované kontrolné a zmierňujúce opatrenia / začlenenie do bežného monitorovania a odvodenie právne záväzných noriem kvality |
| 2           | Hodnotenie nebezpečnosti je založené na experimentálnych údajoch, ale na malom množstve údajov z monitorovania  | Pozorovací zoznam: skrínigové štúdie potrebné na získanie informácií o súčasných úrovniach vystavenia a priestorovom rozložení |
| 3           | Dôkaz o expozícii, ale hodnotenie nebezpečnosti je založené na predpokladaných údajoch o (eko)toxícite (P-PNEC)   | Pred prijatím konečného záveru o riziku je potrebné spoľahlivé posúdenie nebezpečenstva  |
| 4           | Analytické možnosti zatiaľ nie sú uspokojivé  | Hodnotenie nebezpečenstva je založené na experimentálnych údajoch, ale analytické výsledky ešte nie sú uspokojivé              |
| 5           | Žiadne alebo len málo údajov z monitorovania a hodnotenie nebezpečnosti je založené na predpokladaných údajoch o (eko)toxícite (P-PNEC)                   | Potrebné sú skrínigové štúdie a spoľahlivé hodnotenie nebezpečenstva   |
| 6           | Dostatočné dôkazy o expozícii a ne prekročení spoľahlivých prahových hodnôt, ktoré nie sú nebezpečné (normy kvality) a ktoré sú vyššie ako analytická LOQ | Monitorovanie týchto zlúčenín by sa mohlo znížiť, ale mali by sa kontrolovať riziká zmesi pre často zistené zlúčeniny          |



**Obr. 3.1:** Pracovní postup NORMAN na kategorizáciu nových zlúčenín (Dulio a von der Ohe (2013))

**norman** NORMAN WEBSITE | NORMAN DATABASE SYSTEM | HOME

STATISTICS ▾ MAPS

### NORMAN Database System<sup>®</sup> Customized Statistics

Substances (list of NORMAN SUSDAT IDs separated by a comma)

Substance:

Country:  >= X countries with analysis:

Matrix:

From year:  To year:  >= X sites with analysis:

Fractions:

Waste water:  >= X sites with conc > LoQ:

River Basin / Sea region:

Dilution factor waste water \*:  >= X sites with LOQmin < lowest PNEC:

Source (list of data files):

Ground water PNECs:

Marine biota PNECs:

Obr. 3.2: Customized Statistics – formulár

Column visibility Show 100 entries

| Substance | SusDat ID  | CAS no.            | Lowest PNEC | Matrix     | No. of Analyses | No. of Analyses with conc > LoQ | No. of Basins |
|-----------|------------|--------------------|-------------|------------|-----------------|---------------------------------|---------------|
| All       | All        | All                | All         | All        | All             | All                             | All           |
| Ibuprofen | NS00000214 | CAS_RN: 15687-27-1 | 0.011       | Freshwater | 536             | 346                             | 66            |
| Triclosan | NS00010282 | CAS_RN: 3380-34-5  | 0.11        | Freshwater | 618             | 191                             | 43            |
| Cocaine   | NS00000403 | CAS_RN: 50-36-2    | 2.46        | Freshwater | 72              | 0                               | 6             |

| Substance | No. of Countries | No. of Sites | No. of Years | Category | FoE score | EoE score | Final RISK score |
|-----------|------------------|--------------|--------------|----------|-----------|-----------|------------------|
| All       | All              | All          | All          | All      | All       | All       | All              |
| Ibuprofen | 12               | 142          | 3            | 1A       | 0.5       | 0.25      | 0.75             |
| Triclosan | 12               | 127          | 3            | 6A       | 0.0079    | 0         | 0.0079           |
| Cocaine   | 12               | 71           | 2            | 5A       | 0         | 0         | 0                |

| Substance | Final HAZARD score | Final EXPOSURE score | Final score | EXPOSURE score KEMI | HAZARD score KEMI | P score | B score |
|-----------|--------------------|----------------------|-------------|---------------------|-------------------|---------|---------|
| All       | All                | All                  | All         | All                 | All               | All     | All     |
| Ibuprofen | 0.52               | 0.64                 | 1.9         |                     |                   | 0.333   | 0       |
| Triclosan | 0.94               | 0.38                 | 1.3         | 0.65                | 0.29              | 1       | 0.5     |
| Cocaine   | 0.21               | 0                    | 0.21        | 0.17                | 0.18              | 0.571   | 0       |

| Substance | M score | T score | PBT score | PB score |
|-----------|---------|---------|-----------|----------|
| All       | All     | All     | All       | All      |
| Ibuprofen | 1       | 0.449   | 0         | 0        |
| Triclosan | 0.75    | 1       |           |          |
| Cocaine   | 0.75    | 0.5     | 0         | 0        |

Obr. 3.3: Customized Statistics – výsledok

# Kapitola 4

## Záver

Predložená práca sa sústreďuje na metodiku návrhu, tvorbu a implementáciu databázového systému, ktorý obsahuje rozsiahle informácie o chemických zlúčeninách, ktoré predstavujú riziko pre životné prostredie a ekosystémy. Toto automatizované databázové riešenie je základom pre budúce inovatívne aplikácie na posudzovanie potenciálnych rizík a nebezpečenstva spojeného s týmito zlúčeninami v životnom prostredí. Aktuálne databázový systém poskytuje nástroje na usmernenie expertov pri:

- identifikácii spoľahlivých štúdií ekotoxicity na základe klasifikačného systému CRED (Moermond a kol. (2016)),
- výbere jedinej spoločnej hodnoty PNEC (Lowest PNEC) dohodnutej ako výsledok celoeurópskych konzultácií expertov.

Do databázového systému sme integrovali aplikáciu, ktorá poskytuje odborníkom na ochranu životného prostredia prehľad o stave poznatkov a medzier v poznatkoch pre správne posúdenie rizika znečisťujúcich zlúčenín vzbudzujúcich obavy v životnom prostredí.

Budúci rozvoj databázového systému by sa mal zamerať na:

- vytvorenie univerzálneho API rozhrania na lepšiu výmenu informácií (v súčasnosti existujú iba rozhrania API, ktoré boli prispôsobené potrebám niekoľkých konkrétnych organizácií),
- nasadenie umelej inteligencie (napr. formou strojového učenia) na spracovanie, vyhľadávanie a verifikáciu obrovského množstva údajov o chemických zlúčeninách z rôznych zdrojov.



# Literatúra

- A. Carusi, C. Wittwehr, M. Whelan a E. C. J. R. Centre. *Addressing Evidence Needs in Chemicals Policy and Regulation*. EUR (Luxembourg. Online). Publications Office of the European Union, 2022. ISBN 9789276458890.
- V. Dulio, J. Koschorreck, B. van Bavel, P. van den Brink, J. Hollender, J. Munthe, M. Schlabach, R. Aalizadeh, M. Agerstrand, L. Ahrens, I. Allan, N. Alygizakis, D. Barcelo, P. Bohlin-Nizzetto, S. Boutroup, W. Brack, A. Bressy, J. H. Christensen, L. Čirka, A. Covaci, A. Derksen, G. Deviller, M. M. L. Dingemans, M. Engwall, D. Fatta-Kassinos, P. Gago-Ferrero, F. Hernandez, D. Herzke, K. Hilscherova, H. Hollert, M. Junghans, B. Kasprzyk-Hordern, S. Keiter, S. A. E. Kools, A. Kruve, D. Lambropoulou, M. H. Lamoree, P. Leonards, B. Lopez, M. L. de Alda, L. Lundy, J. Makovinska, I. Marigomez, J. W. Martin, B. McHugh, C. Mieke, S. O'Toole, N. Perkola, S. Polesello, L. Posthuma, S. Rodriguez-Mozaz, I. Roessink, P. Rostkowski, H. Ruedel, S. Samanipour, T. Schulze, E. L. Schymanski, M. Sengl, P. Tarabek, D. T. Hulscher, N. S. Thomaidis, A. Togola, S. Valsecchi, S. van Leeuwen, P. C. von der Ohe, K. Vorkamp, B. Vrana a J. Slobodník. The norman association and the european partnership for chemicals risk assessment (parc): let's cooperate! *Environmental Sciences Europe*, 32(1), 2020.
- V. Dulio a J. Slobodnik. In response: The norman perspectives on prioritization of emerging pollutants. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 34(10):2181–2187, 2015. ISSN 0730-7268.
- V. Dulio a P. C. von der Ohe. Norman prioritisation framework for emerging substances. [https://www.norman-network.net/sites/default/files/norman\\_prioritisation\\_manual\\_15%20April2013\\_final\\_for\\_website.pdf](https://www.norman-network.net/sites/default/files/norman_prioritisation_manual_15%20April2013_final_for_website.pdf), 2013. Dostupné: 31.8.2023.
- F. Freeling, N. Alygizakis, P. C. von der Ohe, J. Slobodník, P. Oswald, R. Aalizadeh, L. Čirka, N. S. Thomaidis a M. Scheurer. Occurrence and potential environmental risk of surfactants and their transformation products discharged by wastewater treatment plants. *Science of The Total Environment*, 681:475–487, 2019.
- L. Lundy, D. Fatta-Kassinos, J. Slobodník, P. Karaolia, L. Čirka, N. Kreuzinger, S. Castiglioni, L. Bijlsma, V. Dulio, G. Deviller, F. Y. Lai, N. Alygizakis, M. Barneo, J. A. Baz-Lomba, F. Béen, M. Cíhová, K. Conde-Pérez, A. Covaci, E. Donner, A. Ficek, F. Hassard, A. Hedström, F. Hernandez, V. Janská, K. Jellison, J. Hofman, K. Hill, P. Hong, B. Kasprzyk-Hordern, S. Kolarević, J. Krahulec, D. Lambropoulou, R. de Llanos, T. Mackulak, L. Martinez-García, F. Martínez, G. Medema, A. Micsinai, M. Myrmel, M. Nasser, H. Niederstätter, L. Nozal, H. Oberacher, V. Očenášková, L. Ogorzaly, D. Papadopoulos, B. Peinado, T. Pitkänen, M. Poza,

- S. Rumbo-Feal, M. B. Sánchez, A. J. Székely, A. Soltysova, N. S. Thomaidis, J. Vallejo, A. van Nuijs, V. Ware a M. Viklander. Making waves: Collaboration in the time of sars-cov-2 - rapid development of an international co-operation and wastewater surveillance database to support public health decision-making. *Water Research*, 199(1):1–7, 2021.
- C. T. Moermond, R. Kase, M. Korkaric a M. Ågerstrand. Cred: Criteria for reporting and evaluating ecotoxicity data. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 35(5):1297–1309, 2016.
- K. Ng, N. Alygizakis, M. Nika, A. Galani, P. Oswald, M. Oswaldova, L. Čirka, U. Kunkel, A. Macherius, M. Sengl, G. Mariani, S. Tavazzi, H. Skejo, B. M. Gawlik, N. S. Thomaidis a J. Slobodník. Wide-scope target screening characterization of legacy and emerging contaminants in the danube river basin by liquid and gas chromatography coupled with high-resolution mass spectrometry. *Water Research*, 230(119539), 2023.
- J. Nosko. *Štatistická analýza dát v programovacom jazyku R*. Diplomová práca, ÚIAM FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, 2019.
- H. M. Taha, R. Aalizadeh, N. Alygizakis, J. Antignac, H. P. H. Arp, R. Bade, N. Baker, L. Belova, L. Bijlsma, E. E. Bolton, W. Brack, A. Celma, W. Chen, T. Cheng, P. Chirsir, L. Čirka, L. A. D'Agostino, Y. D. Feunang, V. Dulio, S. Fischer, P. Gago-Ferrero, A. Galani, B. Geueke, N. Glowacka, J. Glüge, K. Groh, S. Grosse, P. Haglund, P. J. Hakkinen, S. E. Hale, F. Hernandez, E. M. Janssen, T. Jonkers, K. Kiefer, M. Kirchner, J. Koschorreck, M. Krauss, J. Krier, M. H. Lamoree, M. Letzel, T. Letzel, Q. Li, J. Little, Y. Liu, D. M. Lunderberg, J. W. Martin, A. D. McEachran, J. A. McLean, C. Meier, J. Meijer, F. Menger, C. Merino, J. Muncke, M. Muschket, M. Neumann, V. Neveu, K. Ng, H. Oberacher, J. O'Brien, P. Oswald, M. Oswaldova, J. A. Picache, C. Postigo, N. Ramirez, T. Reemtsma, J. Renaud, P. Rostkowski, H. Rüdell, R. M. Salek, S. Samanipour, M. Scheringer, I. Schliebner, W. Schulz, T. Schulze, M. Sengl, B. A. Shoemaker, K. Sims, H. Singer, R. R. Singh, M. Sumarah, P. A. Thiessen, K. V. Thomas, S. Torres, X. Trier, A. P. v. Wezel, R. C. H. Vermeulen, J. J. Vlaanderen, P. C. von der Ohe, Z. Wang, A. J. Williams, E. L. Willighagen, D. S. Wishart, J. Zhang, N. S. Thomaidis, J. Hollender, J. Slobodník a E. L. Schymanski. The norman suspect list exchange (norman-sle): facilitating european and worldwide collaboration on suspect screening in high resolution mass spectrometry. *Environmental Sciences Europe*, 34, 2022.
- P. C. von der Ohe, V. Dulio, J. Slobodnik, E. De Deckere, R. Kuehne, R.-U. Ebert, A. Ginebreda, W. De Cooman, G. Schueuermann a W. Brack. A new risk assessment approach for the prioritization of 500 classical and emerging organic microcontaminants as potential river basin specific pollutants under the European Water Framework Directive. *Science of the Total Environment*, 409(11):2064–2077, 2011. ISSN 0048-9697.

# Dodatok A

## Originálne práce autora

Nižšie uvedené časopisecké vedecké práce tvoria základné piliere habilitačnej práce autora:

1. F. Freeling, N. Alygizakis, P. C. von der Ohe, J. Slobodník, P. Oswald, R. Aalizadeh, **E. Čirka**, N. S. Thomaidis, and M. Scheurer. Occurrence and potential environmental risk of surfactants and their transformation products discharged by wastewater treatment plants. *Science of The Total Environment*, 681:475–487, 2019.
2. V. Dulio, J. Koschorreck, B. van Bavel, P. van den Brink, J. Hollender, J. Munthe, M. Schlabach, R. Aalizadeh, M. Agerstrand, L. Ahrens, I. Allan, N. Alygizakis, D. Barcelo, P. Bohlin-Nizzetto, S. Boutroup, W. Brack, A. Bressy, J. H. Christensen, **E. Čirka**, A. Covaci, A. Derksen, G. Deviller, M. M. L. Dingemans, M. Engwall, D. Fatta-Kassinos, P. Gago-Ferrero, F. Hernandez, D. Herzke, K. Hilscherova, H. Hollert, M. Junghans, B. Kasprzyk-Hordern, S. Keiter, S. A. E. Kools, A. Krueve, D. Lambropoulou, M. H. Lamoree, P. Leonards, B. Lopez, M. L. de Alda, L. Lundy, J. Makovinska, I. Marigomez, J. W. Martin, B. McHugh, C. Mieke, S. O’Toole, N. Perkola, S. Polesello, L. Posthuma, S. Rodriguez-Mozaz, I. Roessink, P. Rostkowski, H. Ruedel, S. Samanipour, T. Schulze, E. L. Schymanski, M. Sengl, P. Tarabek, D. Ten Hulscher, N. S. Thomaidis, A. Togola, S. Valsecchi, S. van Leeuwen, P. C. von der Ohe, K. Vorkamp, B. Vrana, and J. Slobodník. The norman association and the european partnership for chemicals risk assessment (parc): let’s cooperate! *Environmental Sciences Europe*, 32(1), 2020.
3. L. Lundy, D. Fatta-Kassinos, J. Slobodník, P. Karaolia, **E. Čirka**, N. Kreuzinger, S. Castiglioni, L. Bijlsma, V. Dulio, G. Deviller, F. Y. Lai, N. Alygizakis, M. Barneo, J. A. Baz-Lomba, F. Béen, M. Cíhová, K. Conde-Pérez, A. Covaci, E. Donner, A. Ficek, F. Hassard, A. Hedström, F. Hernandez, V. Janská, K. Jellison, J. Hofman, K. Hill, P. Hong, B. Kasprzyk-Hordern, S. Kolarević, J. Krahulec, D. Lambropoulou, R. de Llanos, T. Macculak, L. Martinez-García, F. Martínez, G. Medema, A. Micsinai, M. Myrmel, M. Nasser, H. Niederstätter, L. Nozal, H. Oberacher, V. Očenášková, L. Ogorzaly, D. Papadopoulos, B. Peinado, T. Pitkänen, M. Poza, S. Rumbo-Feal, M. B. Sánchez, A. J. Székely, A. Soltysova, N. S. Thomaidis, J. Vallejo, A. van Nuijs, V. Ware, and M. Viklander. Making waves: Collaboration in the time of sars-cov-2 - rapid development of an international co-operation and wastewater surveillance database to support public health decision-making. *Water Research*, 199(1):1–7, 2021.

4. H. M. Taha, R. Aalizadeh, N. Alygizakis, J. Antignac, H. P. H. Arp, R. Bade, N. Baker, L. Belova, L. Bijlsma, E. E. Bolton, W. Brack, A. Celma, W. Chen, T. Cheng, P. Chirsir, **E. Čirka**, L. A. D'Agostino, Y. D. Feunang, V. Dulio, S. Fischer, P. Gago-Ferrero, A. Galani, B. Geueke, N. Glowacka, J. Glüge, K. Groh, S. Grosse, P. Haglund, P. J. Hakkinen, S. E. Hale, F. Hernandez, E. M. Janssen, T. Jonkers, K. Kiefer, M. Kirchner, J. Koschorreck, M. Krauss, J. Krier, M. H. Lamoree, M. Letzel, T. Letzel, Q. Li, J. Little, Y. Liu, D. M. Lunderberg, J. W. Martin, A. D. McEachran, J. A. McLean, C. Meier, J. Meijer, F. Menger, C. Merino, J. Muncke, M. Muschket, M. Neumann, V. Neveu, K. Ng, H. Oberacher, J. O'Brien, P. Oswald, M. Oswaldova, J. A. Picache, C. Postigo, N. Ramirez, T. Reemtsma, J. Renaud, P. Rostkowski, H. Rüdél, R. M. Salek, S. Samanipour, M. Scheringer, I. Schliebner, W. Schulz, T. Schulze, M. Sengl, B. A. Shoemaker, K. Sims, H. Singer, R. R. Singh, M. Sumarah, P. A. Thiessen, K. V. Thomas, S. Torres, X. Trier, A. P. v. Wezel, R. C. H. Vermeulen, J. J. Vlaanderen, P. C. von der Ohe, Z. Wang, A. J. Williams, E. L. Willighagen, D. S. Wishart, J. Zhang, N. S. Thomaidis, J. Hollender, J. Slobodník, and E. L. Schymanski. The norman suspect list exchange (norman-sle): facilitating european and worldwide collaboration on suspect screening in high resolution mass spectrometry. *Environmental Sciences Europe*, 34, 2022.
5. K. Ng, N. Alygizakis, M. Nika, A. Galani, P. Oswald, M. Oswaldova, **E. Čirka**, U. Kunkel, A. Macherius, M. Sengl, G. Mariani, S. Tavazzi, H. Skejo, B. M. Gawlik, N. S. Thomaidis, and J. Slobodník. Wide-scope target screening characterization of legacy and emerging contaminants in the danube river basin by liquid and gas chromatography coupled with high-resolution mass spectrometry. *Water Research*, 230(119539), 2023.

Autor počas svojho vedeckého bádania spolupracoval aj na témach ako „Virtuálne a vzdialené laboratóriá“ alebo „riadenie procesov“, v ktorých bol spoluautorom na ďalších **4 CC článkov**.

Celkový publikačný profil autora sa nachádza na webových sídlach:

- Domovská stránka: <https://www.uiam.sk/~cirka/>
- Web of Science profil: <https://www.webofscience.com/wos/author/record/AAZ-3573-2020>
- Google Scholar profil: <https://scholar.google.com/citations?hl=sk&user=x0C1ZxsAAAAJ>
- ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9351-6855>