

# Prüfung und Validierung von Software zur kinetischen Auswertung von Abbaudaten

Stefan Meinecke\*, Johannes Ranke\*\*, Marita Winkler\*\*\*

\*Umweltbundesamt (UBA), Schichauweg 58, 12307 Berlin, stefan.meinecke@uba.de

\*\*PD Dr. Johannes Ranke Wissenschaftlicher Berater (jrwb), Kronacher Str. 8, 79639 Grenzach-Wyhlen; johannes.ranke@jrwb.de

\*\*\*Umweltbundesamt (UBA); Wörlitzer Platz 1, 06844 Dessau-Roßlau; marita.winkler@uba.de

Zur Bewertung des Abbau- und Verteilungsverhaltens von Stoffen in der Umwelt werden die Messwerte z.B. aus Abbaustudien im Boden oder im Wasser-Sediment-System auf der Basis von nichtlinearen Modellen entsprechend den Empfehlungen in FOCUS [1] ausgewertet.

Die Modellparameter, die zur besten Übereinstimmung zwischen kinetischem Modell und experimentellen Daten führen, werden zur Berechnung von Halbwertszeiten herangezogen. Die Halbwertszeiten wiederum werden entweder als Persistenz-/Triggerkriterium oder als Input-Parameter für die Expositionsrechnung im Zulassungsprozess von Umweltchemikalien verwendet.

Für die Optimierung der Parameter wurde im Umweltbundesamt (UBA) hauptsächlich die Software ModelMaker 4.0 eingesetzt, die aber seit vielen Jahren nicht mehr weiterentwickelt wird. Inzwischen ist eine ganze Reihe an alternativen Softwarepaketen verfügbar, die mehr oder weniger gut für diese Aufgabe einsetzbar sind.

In einem vom UBA initiierten Projekt sollen in einem mehrstufigen Verfahren für verschiedene Nutzergruppen alternative Softwarepakete auf Eignung für den Routineeinsatz in der Stoffbewertung geprüft werden. Hierzu werden eine Reihe von Bewertungskriterien wie Funktionalität, Benutzeroberfläche, Dokumentation, Anwenderfreundlichkeit herangezogen und abschließend die rechnerische Eignung überprüft. Bestandteil dieses Verfahrens ist die Etablierung von Testdatensätzen, die auch für zukünftige Validierungen eingesetzt werden können. In diesem Beitrag wird das Konzept zu Auswahl und Validierung der Softwarepakete für die verschiedenen Nutzergruppen vorgestellt.

## Anwendergruppen

Gruppe A	
Anteil Nutzer:	80 %
Aufgaben:	Routinemäßige Parameteroptimierung mit vorgefertigten, flexiblen Modellen für die Ableitung kinetischer Endpunkte nach FOCUS [1].
Modelle:	Parent: Single First Order (SFO), Double First Order in Parallel (DFOP), First Order Multi-Compartment (FOMC), Hockey Stick (HS), max. 3 Metabolite (SFO), max. 2 Kompartimente
Bedienung:	Einfache Bedienung, „Klick“-GUI oder Nutzung vorgefertigter Modelle; Einfacher Datenimport (Copy und Paste, Excel-Import); Ausgabe von Grafiken, kinetischen und statistischen Parametern
Gruppe B	
Anteil Nutzer:	15 %
Aufgaben:	Erstellung von Modellen, Parameteroptimierung
Modelle:	Unbegrenzte Anzahl Metabolite und Kompartimente, beliebige Kinetiken (siehe Gruppe A, Parent)
Gruppe C	
Anteil Nutzer:	5 %
Aufgaben:	Modellerstellung und Simulation für die Planung experimenteller Versuche
Modelle:	Unbegrenzt, Bibliotheken u.a. für Fluide, Thermodynamik, Abbau- und Verteilungsprozesse

## Ausschlusskriterien

Tab. 1: Ausschlusskriterien getrennt nach Anwendergruppe A und B

Kriterium	A	B
Verfügbarkeit, Pflege und Weiterentwicklung	X	X
Hard- und Softwareanforderungen (Windows Version 7 oder höher)	X	X
Kinetische Modelle gemäß FOCUS	X	X
Ausgabe kinetische und statistische Endpunkte gemäß Focus	X	
Mögliche Anzahl Metabolite min.	3	>>3
Abbaupfade seriell, parallel, sink	X	X
Freie Erstellung komplexer Modelle		X
Optimizer	X	X
GUI	X	
Klicksystem oder Verwendung von Modelltemplates	X	
Datenimport z. B. Excel-Import, Copy und Paste	X	X
Datenausgabe/-export z.B. in Excel, Word	X	X
Graphische Darstellung der Ergebnisse, Residuenplots	X	X

## Bewertungskriterien

Tab. 2: Bewertungskriterien und max. erreichbare Punktzahl differenziert nach Anwendergruppe

Kriteriengruppe	Kriterien (u. a.)	Punkte	
		A	B
Beschaffung	• Kosten • Verfügbarkeit	45	45
Systemanforderungen	• Unterstützte Betriebssysteme	5	5
Funktionalität	• Anzahl Metabolite • Gewichtung • Kinetische Modelle • Kinetische Endpunkte • Weitere Optimierungsalgorithmen (z. B. MCMC) • Komplexe Modelle	120	139
Leistung	• Zeitverhalten • Stabilität	20	26
Oberfläche	• GUI • Templates • Datenimport	45	65
Erweiterbarkeit	• Programmierbarkeit	5	7
Reporting	• Datenausgabe • Grafikausgabe	20	15
Hilfe	• Dokumentation • Tutorial • Support	26	39

## Validierung

Zur Prüfung der rechnerischen Eignung werden verschiedene Testdatensätze entsprechend Tabelle 3 verwendet. Die synthetischen Daten werden auf Basis kinetischer Modelle (Abb. 1) mit Störkomponenten (normalverteilt mit Standardabweichung 3, normalverteilt mit Standardabweichung 7 und heterogen nach Rocke und Lorenzato [2]) erzeugt. Anhand der Datensätze aus Wasser-Sediment und Mesokosmen-Studien kann die Leistungsfähigkeit der Software bei komplexeren Modellen (Bsp. in Abb. 2) überprüft werden.

## Zusammenfassung

- Definition von 3 Anwendergruppen mit unterschiedlichem Anforderungsprofil.
- Festlegung von Ausschlusskriterien (Tab. 1), differenziert nach Benutzergruppe A und B) für Vorselektion.
- Erstellung eines punktebasierten Bewertungskataloges unter Beteiligung der Anwender (Tab. 2).
- Prüfung der verschiedenen Softwarepakete durch einen externen Gutachter anhand des Bewertungskataloges.
- Reihung der Softwarepakete entsprechend erzielter Punktzahl.

## Literatur:

- [1] FOCUS (2006) Guidance document on estimating persistence and degradation kinetics from environmental fate studies on pesticides in EU registration (Report of the FOCUS Work Group on Degradation Kinetics, EC Doc. Ref. Sanco/10058/2005, Version 2.0, 2006)  
[2] Rocke, David M. und Lorenzato, Stefan (1995): Technometrics 37(2), 176-184.

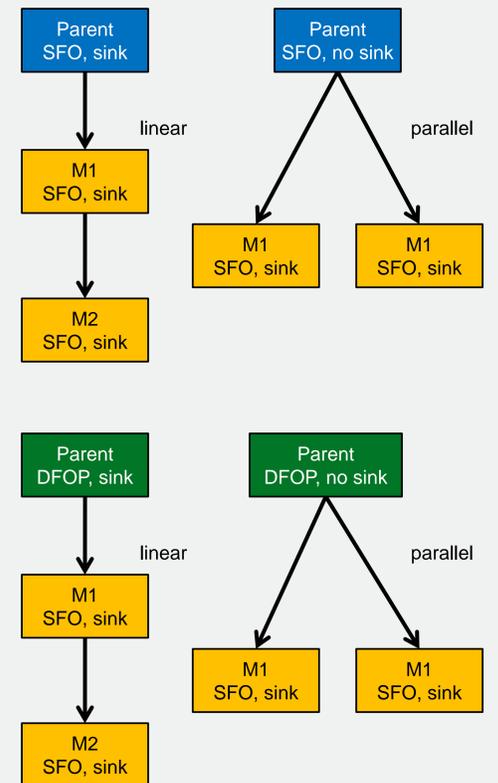


Abb. 1: Kinetische Modelle für die Erzeugung „synthetischer“ Daten

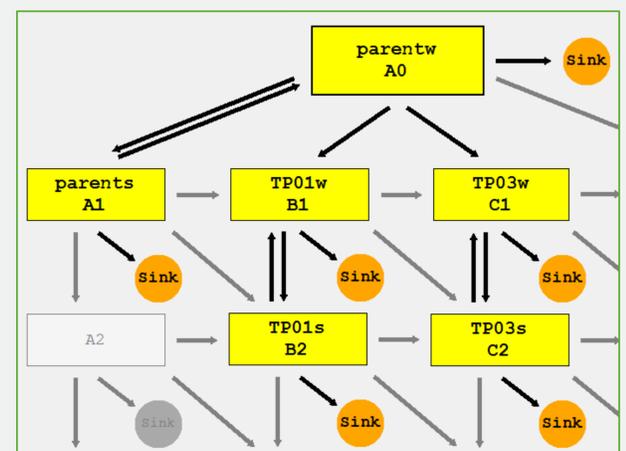


Abb. 2: Modell zu Wasser-Sediment-Studie (Software: KinGUI II)

Tab. 3: Datensätze zur Validierung der Softwarepakete

Datensätze/Modelle	Anzahl
Focus-Datensätze A, C, D, E	4
Synthetisch erzeugte Datensätze linear SFO	3
Synthetisch erzeugte Datensätze linear Parent DFOP, Metabolite SFO	3
Synthetisch erzeugte Datensätze parallel SFO	3
Synthetisch erzeugte Datensätze parallel Parent DFOP, Metabolite SFO	3
Experimentelle Daten aus Wasser-Sediment-Studie Teich	1
Experimentelle Daten aus Wasser-Sediment-Studie Fluss	1
Experimentelle Daten aus Pflanzenschutzmittel - Bodenstudie	1
Experimentelle Daten aus Mesokosmos-Studie Teich	1

- Allgemeine Empfehlungen für Benutzergruppe C (ohne Softwarevalidierung).
- Erzeugung von synthetischen Daten mit Störkomponenten.
- Zusammenstellung der Testdaten (Tab. 3) in einheitlichem Format.
- Validierung der Softwarepakete anhand der Testdaten und Vergleich der Optimierungsergebnisse.
- Softwareempfehlung für Benutzergruppe A und B.