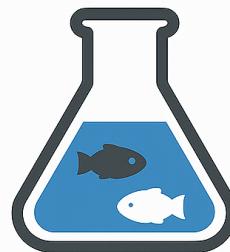


LC₅₀/EC₅₀ Rechner

Benutzerhandbuch

Version 1.0.0



Dr. Branimir K. Hackenberger

Institut für Biologie
Josip Juraj Strossmayer Universität Osijek

BioQuant-SCIOM d.o.o.

2. Oktober 2025



Inhaltsverzeichnis

1 Einführung	1
1.1 Über das Programm	1
1.1.1 Hauptmerkmale	1
1.2 Systemanforderungen	1
2 Installation	3
2.1 Windows-Installation	3
2.1.1 Download	3
2.1.2 Installationsverfahren	3
2.2 Ubuntu/Linux-Installation	3
2.2.1 AppImage-Methode (Empfohlen)	3
2.2.2 DEB-Paket für Debian/Ubuntu	4
2.2.3 Snap-Paket	4
2.3 macOS-Installation	4
2.3.1 DMG-Installation	4
2.3.2 Homebrew-Installation	5
3 Theoretische Grundlagen	7
3.1 LC ₅₀ und EC ₅₀ Konzept	7
3.2 Mathematische Grundlagen	7
3.2.1 Probit-Analyse	7
3.2.2 Logit-Analyse	8
3.2.3 Weibull-Analyse	8
3.2.4 Spearman-Kärber-Methode	8
3.3 Zusätzliche Parameter	9
3.3.1 EC ₁₀ und EC ₉₀	9
3.3.2 NOEC und LOEC	9
3.3.3 MATC	9
3.3.4 Benchmark-Dosen (BMD)	9
3.3.5 PNEC-Werte	9
4 Verwendung des Programms	11
4.1 Programmstart	11
4.1.1 Windows	11
4.1.2 Linux	11
4.1.3 macOS	11
4.2 Programmoberfläche	12
4.2.1 Oberflächenbereiche	12
4.3 Dateneingabe	12
4.3.1 Grunddaten	12



4.3.2	Experimentelle Daten	13
4.3.3	Berechnungsergebnisse	13
5	Verwendungsbeispiele	15
5.1	Beispiel 1: Akute Toxizität gegenüber <i>Daphnia magna</i>	15
5.1.1	Szenario	15
5.1.2	Experimentelles Design	15
5.1.3	Eingabeverfahren	15
5.1.4	Erwartete Ergebnisse	16
5.1.5	Interpretation	16
5.2	Beispiel 2: Algenwachstumshemmung	17
5.2.1	Szenario	17
5.2.2	Verfahren	17
5.2.3	Ergebnisse	17
5.3	Beispiel 3: Spearman-Kärber für terrestrische Organismen	17
5.3.1	Szenario	17
5.3.2	Spearman-Kärber-Methode Spezifika	17
5.3.3	Daten	18
5.3.4	Ergebnisse	18
6	Erweiterte Funktionen	19
6.1	Automatischer Einstellungsspeicher	19
6.1.1	Struktur von settings.json	19
6.2	CSV-Protokolldatei	19
6.2.1	Daten Import/Export	20
6.3	PDF-Berichte	20
7	Fehlerbehebung	21
7.1	Häufige Fehler	21
7.2	Empfohlene Vorgehensweisen	21
7.2.1	Datenvorbereitung	21
7.2.2	Methodenauswahl	22
7.2.3	Ergebnisvalidierung	22
7.3	FAQ	22
8	Technische Spezifikationen	23
8.1	Programmarchitektur	23
8.2	API-Dokumentation	23
8.2.1	Rust-Funktionen	23
8.2.2	JavaScript-Funktionen	24
8.3	Datenstrukturen	24
9	Referenzen und Standards	27
9.1	Internationale Standards	27
9.2	Literatur	27
9.3	Web-Ressourcen	28
A	Liste der Organismen	29
A.1	Aquatische Organismen	29
A.2	Terrestrische Organismen	29



B Formeln und Konstanten	31
B.1 Transformationsfunktionen	31
B.2 Statistische Konstanten	31
B.3 Bewertungsfaktoren	31
C Kontakt und Support	33
C.1 Technischer Support	33
C.2 Fehlerberichterstattung	33
C.3 Lizenzierung	33
Über den Autor	35



1. Einführung

1.1 Über das Programm

Der LC₅₀/EC₅₀ Rechner ist eine fortschrittliche professionelle Software zur präzisen Berechnung der Lethalkonzentration (LC₅₀) und der Effektivkonzentration (EC₅₀) von chemischen Substanzen auf Testorganismen. Das Programm wurde in der Programmiersprache Rust mit dem Tauri-Framework entwickelt, was hohe Leistung und Sicherheit gewährleistet.

1.1.1 Hauptmerkmale

- **Vier statistische Methoden:** Probit, Logit, Weibull und Spearman-Kärber
- **Automatische Berechnung zusätzlicher Parameter:** EC₁₀, EC₉₀, LOEC, NOEC, MATC
- **Benchmark-Dosen (BMD):** BMC₁₀ und BMC₂₀ mit 95%-Konfidenzintervallen
- **Risikobewertung:** PNEC-Berechnungen für verschiedene Ökosysteme
- **Datenvisualisierung:** Interaktive Grafiken mit Regressionskurven
- **PDF-Berichte:** Automatische Erstellung professioneller Berichte
- **CSV-Protokoll:** Dauerhafte Speicherung aller Analysen
- **Einstellungsspeicher:** Automatisches Speichern von Benutzereinstellungen

1.2 Systemanforderungen

Tabelle 1.1: Mindestsystemanforderungen

Komponente	Anforderung
Betriebssystem	Windows 10/11, macOS 10.15+, Ubuntu 20.04+
RAM	Minimum 4 GB (empfohlen 8 GB)
Speicherplatz	200 MB für die Installation
Bildschirmauflösung	Minimum 1280×720 (empfohlen 1920×1080)
.NET Framework	Version 4.7.2 oder neuer (nur Windows)



2. Installation

2.1 Windows-Installation

2.1.1 Download

1. Gehen Sie zu <https://sciom.hr/lc50-calculator/download>
2. Laden Sie LC50Calculator-Setup.exe herunter
3. Überprüfen Sie die SHA-256-Prüfsumme zur Sicherheit

2.1.2 Installationsverfahren

1. Führen Sie LC50Calculator-Setup.exe als Administrator aus
2. Akzeptieren Sie die Lizenzbedingungen
3. Wählen Sie das Installationsverzeichnis (empfohlen: C:\Program Files\LC50Calculator)
4. Wählen Sie Komponenten aus:
 - ✓ Hauptprogramm
 - ✓ Desktop-Verknüpfung
 - ✓ Startmenü-Verknüpfungen
 - ✓ Kontextmenü für CSV-Dateien
5. Klicken Sie auf „Installieren“
6. Warten Sie auf die Fertigstellung der Installation
7. Klicken Sie auf „Fertig stellen“, um das Programm zu starten

Windows Defender Warnung

Bei der ersten Installation kann Windows Defender eine Warnung anzeigen. Klicken Sie auf „Weitere Informationen“ und dann auf „Trotzdem ausführen“, da die Software sicher und digital signiert ist.

2.2 Ubuntu/Linux-Installation

2.2.1 AppImage-Methode (Empfohlen)



```
1      # AppImage herunterladen
2      wget https://sciom.hr/downloads/LC50Calculator
3          -1.0.0.AppImage
4
5      # Ausfuehrbar machen
6      chmod +x LC50Calculator-1.0.0.AppImage
7
8      # Ausfuehren
9      ./LC50Calculator-1.0.0.AppImage
```

Listing 2.1: AppImage-Installation

2.2.2 DEB-Paket für Debian/Ubuntu

```
1      # DEB-Paket herunterladen
2      wget https://sciom.hr/downloads/lc50calculator_1
3          .0.0_amd64.deb
4
5      # Abhaengigkeiten installieren
6      sudo apt update
7      sudo apt install libgtk-3-0 libwebkit2gtk-4.0-37
8
9      # Paket installieren
10     sudo dpkg -i lc50calculator_1.0.0_amd64.deb
11
12     # Abhaengigkeitsprobleme beheben
13     sudo apt --fix-broken install
```

Listing 2.2: DEB-Installation

2.2.3 Snap-Paket

```
1      sudo snap install lc50calculator
```

Listing 2.3: Snap-Installation

2.3 macOS-Installation

2.3.1 DMG-Installation

1. Laden Sie LC50Calculator-1.0.0.dmg herunter
2. Doppelklicken Sie auf die DMG-Datei
3. Ziehen Sie das Anwendungssymbol in den Anwendungsordner
4. Werfen Sie die DMG aus
5. Starten Sie aus den Anwendungen



2.3.2 Homebrew-Installation

```
1      # SCION-Tap hinzufuegen  
2      brew tap scion/tools  
3  
4      # Installieren  
5      brew install --cask lc50calculator
```

Listing 2.4: Homebrew-Installation

macOS Gatekeeper

Beim ersten Start kann macOS die Anwendung blockieren. Gehen Sie zu Systemeinstellungen → Sicherheit & Datenschutz und klicken Sie auf „Trotzdem öffnen“.



3. Theoretische Grundlagen

3.1 LC₅₀ und EC₅₀ Konzept

LC₅₀ (Letale Konzentration 50) stellt die Konzentration einer Testsubstanz dar, die bei 50% der exponierten Organismen während eines bestimmten Zeitraums zum Tod führt.

EC₅₀ (Effektive Konzentration 50) bezeichnet die Konzentration, die bei 50% der Testorganismen einen spezifischen Effekt (z.B. Wachstumshemmung, Immobilisierung) verursacht.

3.2 Mathematische Grundlagen

3.2.1 Probit-Analyse

Die Probit-Transformation basiert auf der Annahme einer Normalverteilung der Toleranz:

$$\text{Probit}(p) = \Phi^{-1}(p) + 5 \quad (3.1)$$

wobei Φ^{-1} die Umkehrfunktion der Standardnormalverteilung ist und p der Mortalitätsanteil.

Abbott-Korrektur

Für Grenzwerte wird die Abbott-Korrektur angewendet:

$$p_{\text{korr}} = \frac{0.5}{n} \quad \text{für } p = 0 \quad (3.2)$$

$$p_{\text{korr}} = \frac{n - 0.5}{n} \quad \text{für } p = 1 \quad (3.3)$$

Lineare Regression

Nach der Transformation wird eine lineare Regression angewendet:

$$Y = a + b \cdot \ln(X) \quad (3.4)$$

wobei:

- Y - Probit-Wert
- X - Konzentration
- a - Achsenabschnitt
- b - Steigung



LC₅₀ wird berechnet als:

$$\ln(\text{LC}_{50}) = \frac{5-a}{b} \quad (3.5)$$

3.2.2 Logit-Analyse

Die Logit-Transformation verwendet die logistische Funktion:

$$\text{Logit}(p) = \ln\left(\frac{p}{1-p}\right) \quad (3.6)$$

Für LC₅₀:

$$\ln(\text{LC}_{50}) = \frac{0-a}{b} \quad (3.7)$$

3.2.3 Weibull-Analyse

Weibull-Transformation:

$$W(p) = \ln(-\ln(1-p)) \quad (3.8)$$

LC₅₀ wird berechnet als:

$$\ln(\text{LC}_{50}) = -\frac{a}{b} \quad (3.9)$$

3.2.4 Spearman-Kärber-Methode

Eine nicht-parametrische Methode, die keine Verteilungsannahmen erfordert:

$$\log \text{LC}_{50} = \log x_0 + h \left(\sum_{i=1}^n p_i - 0.5 \right) \quad (3.10)$$

wobei:

- x_0 - niedrigste Dosis
- h - logarithmisches Intervall zwischen Dosen
- p_i - Mortalitätsanteile

Standardfehler:

$$SE = h \sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{p_i(1-p_i)}{n_i}} \quad (3.11)$$

95%-Konfidenzintervall:

$$\text{CI}_{95\%} = \text{LC}_{50} \times e^{\pm 1.96 \cdot SE} \quad (3.12)$$



3.3 Zusätzliche Parameter

3.3.1 EC₁₀ und EC₉₀

Für die Probit-Methode:

$$\text{EC}_{10} = \exp\left(\frac{\Phi^{-1}(0.1) + 5 - a}{b}\right) \quad (3.13)$$

$$\text{EC}_{90} = \exp\left(\frac{\Phi^{-1}(0.9) + 5 - a}{b}\right) \quad (3.14)$$

3.3.2 NOEC und LOEC

NOEC (No Observed Effect Concentration) - die höchste Konzentration ohne beobachteten Effekt.

LOEC (Lowest Observed Effect Concentration) - die niedrigste Konzentration mit beobachtetem Effekt.

Das Programm bestimmt automatisch NOEC und LOEC basierend auf statistischer Analyse (Schwellenwert: 10% Erhöhung der Mortalität).

3.3.3 MATC

Maximal akzeptable Toxikantkonzentration:

$$\text{MATC} = \sqrt{\text{NOEC} \times \text{LOEC}} \quad (3.15)$$

3.3.4 Benchmark-Dosen (BMD)

BMC₁₀ und BMC₂₀ werden mit der Bootstrap-Methode berechnet (1000 Iterationen):

$$\text{BMC}_x = \exp\left(\frac{\text{Ziel}_x - a}{b}\right) \quad (3.16)$$

wobei Ziel_x der transformierte Wert für x% Reaktion ist.

3.3.5 PNEC-Werte

Predicted No Effect Concentration gemäß REACH-Richtlinien:

Tabelle 3.1: PNEC-Bewertungsfaktoren

Ökosystem	AF	Formel
Aquatisch	1000	POD/1000
Terrestrisch	1000	POD/1000
Sediment	10	POD/10

wobei POD (Point of Departure) hierarchisch bestimmt wird:

1. NOEC (falls verfügbar)
2. BMC₁₀ untere Grenze
3. LOEC/3



4. Verwendung des Programms

4.1 Programmstart

4.1.1 Windows

- Doppelklicken Sie auf das Desktop-Symbol
- Oder: Startmenü → LC50 Calculator
- Oder: Rechtsklick auf CSV-Datei → Öffnen mit → LC50 Calculator

4.1.2 Linux

```
1      # Vom Terminal  
2      lc50calculator  
3  
4      # Oder aus dem Anwendungsmenue  
5      # Anwendungen -> Wissenschaft -> LC50 Calculator
```

4.1.3 macOS

- Launchpad → LC50 Calculator
- Oder: Programme → LC50 Calculator
- Oder: Spotlight-Suche (Cmd+Space) → „LC50“



4.2 Programmoberfläche

LC₅₀/EC₅₀ Calculator

Kalkulator za izračun letalne ili efektne koncentracije (LC₅₀/EC₅₀) pomoću statističkih metoda

Podaci o eksperimentu

Testirana tvar:	Jedinica koncentracije:	Metoda izračuna:
CdCl ₂	mg/L	Probit
Datum početka testiranja:	Trajanje testiranja (sati):	Organizam:
09/17/2025	24 h	Daphnia magna
Jedinica učinka:		
/1		

Koncentracije

Unesite svoje podatke u donja polja. Svaki podatak mora biti u posebnom redu. Sva tri polja moraju sadržavati jednak broj podataka.

Koncentracije	X ₀	X _t
0.01 0.03 0.1 0.3 1.0 3.0	20 20 20 20 20 20	0 1 4 12 19 20

LC₅₀/EC₅₀ **Spremi** **Ispiši PDF**

Abbildung 4.1: Hauptprogrammoberfläche

4.2.1 Oberflächenbereiche

1. **Experimentdaten** - grundlegende Testinformationen
2. **Dateneingabe** - Konzentrationen und Ergebnisse
3. **Steuerungsschaltflächen** - berechnen, speichern, PDF
4. **Ergebnisse** - nach Berechnung angezeigt
5. **Grafik** - Visualisierung der Regressionsanalyse

4.3 Dateneingabe

4.3.1 Grunddaten

Tabelle 4.1: Grunddatenfelder

Feld	Beschreibung
Testsubstanz	Name oder chemische Formel (z.B. „CdCl ₂ “)
Konzentrationseinheit	mg/L, µg/L, g/L oder benutzerdefiniert
Berechnungsmethode	Probit, Logit, Weibull oder Spearman-Kärber
Startdatum	Datum des Experimentbeginns
Testdauer	24h, 48h, 72h, 96h oder benutzerdefiniert
Organismus	Aus Liste auswählen oder benutzerdefiniert eingeben
Effekteinheit	/1, /mm ² , /FU oder benutzerdefiniert



4.3.2 Experimentelle Daten

Daten werden in drei Spalten eingegeben, jeder Datenpunkt in einer neuen Zeile:

Eingabeformat

Konzentrationen	X_0	X_t
0.1	20	0
0.5	20	2
1.0	20	5
5.0	20	15
10.0	20	20

4.3.3 Berechnungsergebnisse



Abbildung 4.2: Berechnungsergebnisse



5. Verwendungsbeispiele

5.1 Beispiel 1: Akute Toxizität gegenüber *Daphnia magna*

5.1.1 Szenario

Prüfung der Toxizität von Kupfersulfat (CuSO_4) an Wasserflöhen nach OECD 202-Protokoll.

5.1.2 Experimentelles Design

- **Testorganismus:** *Daphnia magna* (< 24h alt)
- **Dauer:** 48 Stunden
- **Temperatur:** $20 \pm 1^\circ\text{C}$
- **pH:** 7.8 ± 0.2
- **Gelöster Sauerstoff:** > 6 mg/L
- **Photoperiode:** 16h Licht : 8h Dunkelheit

5.1.3 Eingabeverfahren

1. Grunddaten:

- Testsubstanz: CuS04
- Einheit: mg/L
- Methode: Probit
- Datum: 2025-01-15
- Dauer: 48 h
- Organismus: *Daphnia magna*
- Effekteinheit: /1

2. Experimentelle Daten:

Tabelle 5.1: Daten für *Daphnia magna* Test

Konzentration (mg/L)	X ₀	X _t
0.01	20	0
0.03	20	1
0.1	20	4
0.3	20	12
1.0	20	19
3.0	20	20



3. Klicken Sie auf **LC₅₀/EC₅₀** berechnen

5.1.4 Erwartete Ergebnisse

Tabelle 5.2: Analyseergebnisse für CuSO₄

Parameter	Wert
LC ₅₀	0.217 ± 0.034 mg/L
EC ₁₀	0.089 mg/L
EC ₉₀	0.531 mg/L
NOEC	0.03 mg/L
LOEC	0.1 mg/L
R ²	0.982
Steigung	2.847

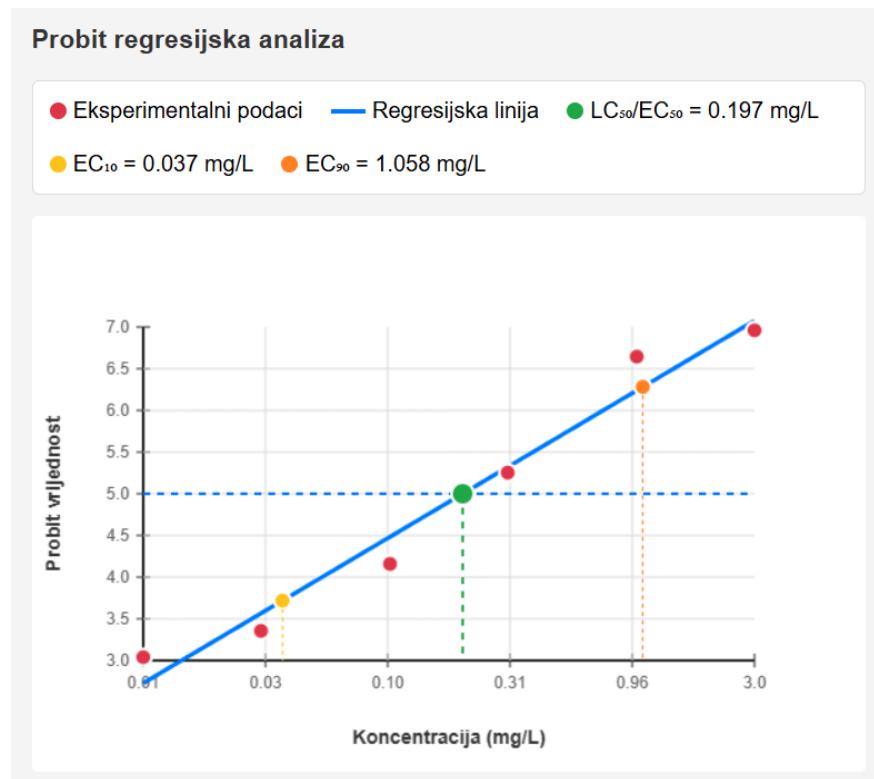


Abbildung 5.1: Probit-Analyse für CuSO₄ an *Daphnia magna*

5.1.5 Interpretation

- LC₅₀ = 0.217 mg/L klassifiziert CuSO₄ als **sehr toxisch** für aquatische Organismen
- R² = 0.982 zeigt eine exzellente Modellanpassung
- EC₉₀/EC₁₀ Verhältnis = 5.96 weist auf eine moderat steile Dosis-Wirkungs-Kurve hin
- PNEC_{aquatisch} = 0.000217 mg/L (Anwendung des Faktors 1000)



5.2 Beispiel 2: Algenwachstumshemmung

5.2.1 Szenario

Wachstumshemmungstest an *Pseudokirchneriella subcapitata* mit dem Herbizid Atrazin nach OECD 201.

5.2.2 Verfahren

1. Grunddaten:

- Testsubstanz: **Atrazin**
- Einheit: $\mu\text{g}/\text{L}$
- Methode: **Weibull** (besser für Wachstumskurven)
- Dauer: 72 h
- Organismus: ***Pseudokirchneriella subcapitata***
- Effekteinheit: /FU (Fluoreszenzeinheiten)

2. Daten:

Tabelle 5.3: Daten für Algenwachstumshemmungstest

Konzentration ($\mu\text{g}/\text{L}$)	Kontroll-FU	Gehemmt-FU
0	1000	0
10	1000	50
30	1000	180
100	1000	420
300	1000	750
1000	1000	950

5.2.3 Ergebnisse

- $\text{EC}_{50} = 112.4 \mu\text{g}/\text{L}$
- $\text{EC}_{10} = 28.7 \mu\text{g}/\text{L}$
- $\text{BMC}_{10} = 31.2 \mu\text{g}/\text{L}$ (95% CI: 24.8-38.9)
- $\text{PNEC}_{\text{aquatisch}} = 0.112 \mu\text{g}/\text{L}$

5.3 Beispiel 3: Spearman-Kärber für terrestrische Organismen

5.3.1 Szenario

Kontaktoxitätstest eines Pestizids an Regenwürmern *Eisenia fetida*.

5.3.2 Spearman-Kärber-Methode Spezifika

- Erfordert geometrische Progression der Konzentrationen
- Erfordert keine Normalverteilung
- Ideal für Daten mit 0% und 100% Mortalität



5.3.3 Daten

Tabelle 5.4: Geometrische Progression für Spearman-Kärber

Konzentration (mg/kg)	N	Mortalität
1	10	0
3	10	1
9	10	3
27	10	6
81	10	9
243	10	10

Hinweis: Faktor zwischen Konzentrationen = 3 (geometrische Progression)

5.3.4 Ergebnisse

- $LC_{50} = 34.7 \text{ mg/kg}$
- 95% CI: 22.1 - 54.5 mg/kg
- Methode liefert keinen R^2 -Wert (nicht-parametrisch)

6. Erweiterte Funktionen

6.1 Automatischer Einstellungsspeicher

Das Programm speichert automatisch zuletzt verwendete Einstellungen in:

Tabelle 6.1: Einstellungsorte

BS	Pfad
Windows	C:\Users\[BENUTZERNAME]\AppData\Roaming\LC50Calculator\settings.json
macOS	~/Library/Application Support/LC50Calculator/settings.json
Linux	~/.config/LC50Calculator/settings.json

6.1.1 Struktur von settings.json

```
1   {
2       "test_substance": "CuSO4",
3       "unit": "mg/L",
4       "method": "Probit",
5       "organism": "Daphnia magna",
6       "test_duration": "48 h",
7       "concentrations": "0.01\n0.03\n0.1\n0.3\n1.0",
8       "total_organisms": "20\n20\n20\n20\n20",
9       "dead_organisms": "0\n1\n4\n12\n19"
10      }
```

Listing 6.1: Beispiel settings.json Datei

6.2 CSV-Protokolldatei

Jedes Speichern fügt einen Eintrag zu log.csv hinzu:

```
1   Timestamp , Test Substance , Organism , Test Date , Test
2   Duration ,
3   Method , Concentration Unit , Effect Unit , LC50 / EC50 ,
4   EC10 , EC90 ,
5   LOEC , NOEC , MATC , Slope , Intercept , R-squared , BMC10 ,
     BMCL10 ,
     BMCU10 , BMC20 , BMCL20 , BMCU20 , POD , PNEC Aquatic ,
     PNEC Terrestrial , PNEC Sediment
```

Listing 6.2: Struktur der log.csv Datei



6.2.1 Daten Import/Export

CSV-Daten importieren

Das Programm kann bestehende CSV-Dateien mit Daten laden. Das Format muss sein:

- Erste Spalte: Konzentrationen
- Zweite Spalte: Gesamtzahl der Organismen
- Dritte Spalte: Anzahl toter/betroffener Organismen
- Trennzeichen: Komma (,) oder Semikolon (;)

6.3 PDF-Berichte

Automatisch generierte PDFs enthalten:

1. Titelseite

- Substanz- und Organismusname
- Testdatum und -dauer
- Institutionelle Daten

2. Analyseergebnisse

- Alle berechneten Werte
- Statistische Parameter
- Konfidenzintervalle

3. Grafische Darstellung

- Regressionskurve
- Experimentelle Daten
- LC/EC-Werte

4. Datentabelle

- Konzentrationen
- Anzahl der Organismen
- Mortalitätsprozentsatz

5. Interpretation

- Modellqualitätsbewertung
- Regulatorische Eignung
- Empfehlungen

7. Fehlerbehebung

7.1 Häufige Fehler

Tabelle 7.1: Häufige Fehler und Lösungen

Fehler	Lösung
„Alle Arrays müssen die gleiche Länge haben“	Überprüfen Sie, dass alle Spalten die gleiche Anzahl von Zeilen haben
„Alle Konzentrationen müssen positiv sein“	Entfernen Sie Null- oder Negativwerte
„Unzureichende Daten für Regression“	Geben Sie mindestens 2 Datenzeilen ein
„Spearman-Kärber erfordert geometrische Progression“	Verwenden Sie Konzentrationen in konstantem Verhältnis (z.B. 1, 2, 4, 8...)
„ $R^2 < 0.7$ “	Modell passt schlecht, versuchen Sie eine andere Methode
„PDF-Generierung fehlgeschlagen“	Überprüfen Sie Schreibberechtigungen und Speicherplatz

7.2 Empfohlene Vorgehensweisen

7.2.1 Datenvorbereitung

1. **Anzahl der Konzentrationen:** Minimum 5 + Kontrolle
2. **Bereich:** 0-100% Mortalität abdecken
3. **Abstand:** Geometrische Progression (Faktor 2-3)
4. **Replikate:** Mindestens 3 pro Konzentration
5. **Kontrolle:** Mortalität < 10%



7.2.2 Methodenauswahl

Tabelle 7.2: Methodenauswahl-Leitfaden

Methode	Wann zu verwenden
Probit	Erste Wahl, Normalverteilung, Standard in der Ökotoxikologie
Logit	Alternative zu Probit, gibt oft ähnliche Ergebnisse
Weibull	Asymmetrische Daten, Wachstumskurven, Hormesis-Effekte
Spearman-Kärber	Nicht-parametrische Alternative, geometrische Progression

7.2.3 Ergebnisvalidierung

Akzeptabilitätskriterien

- $R^2 > 0.9$ für regulatorische Zwecke
- $R^2 > 0.8$ für Forschungszwecke
- Kontrollmortalität < 10%
- CV zwischen Replikaten < 30%
- LC_{50} innerhalb des Bereichs der getesteten Konzentrationen

7.3 FAQ

F: Kann ich das Programm für Pflanzen verwenden?

A: Ja, verwenden Sie EC_{50} für Wachstums- oder Keimhemmung.

F: Was ist, wenn ich keine 100% Mortalität habe?

A: Das Programm wendet automatisch die Abbott-Korrektur an.

F: Wie exportiere ich Ergebnisse für Publikationen?

A: Verwenden Sie den PDF-Bericht oder kopieren Sie aus der CSV-Protokolldatei.

F: Unterstützt das Programm IC_{50} ?

A: Ja, IC_{50} ist äquivalent zu EC_{50} für Inhibition.

8. Technische Spezifikationen

8.1 Programmarchitektur

Das Programm wurde mit modernen Technologien entwickelt:

Tabelle 8.1: Technologie-Stack

Komponente	Technologie
Backend	Rust 1.75+
Frontend	HTML5, CSS3, JavaScript (ES6+)
Framework	Tauri 1.6
PDF-Generierung	pdf-writer 0.10
Statistik	statsr 0.16
UI-Rendering	WebView2 (Windows), WebKit (macOS/Linux)

8.2 API-Dokumentation

8.2.1 Rust-Funktionen

```
1      #[tauri::command]
2      fn calculate_lc50(data: ExperimentData)
3          -> Result<ProbitResult, String>
4
5      #[tauri::command]
6      fn calculate_logit(data: ExperimentData)
7          -> Result<LogitResult, String>
8
9      #[tauri::command]
10     fn calculate_weibull(data: ExperimentData)
11         -> Result<WeibullResult, String>
12
13     #[tauri::command]
14     fn calculate_spearman_karber(data: ExperimentData
15         )
16         -> Result<SpearmanKarberResult, String>
17
18     #[tauri::command]
19     fn generate_pdf(pdf_data: PdfData)
20         -> Result<String, String>
21
22     #[tauri::command]
23     fn save_log_csv(csv_content: String)
24         -> Result<String, String>
```



Listing 8.1: Haupt-Rust-Funktionen

8.2.2 JavaScript-Funktionen

```
1      async function calculateLC50() {
2          const data = collectData();
3          const result = await invoke('
4              calculate_lc50', { data });
5          displayResults(result);
6      }
7
8      function collectData() {
9          return {
10              concentrations: [...],
11              total_organisms: [...],
12              dead_organisms: [...]
13          };
14      }
15
16      function drawChart(results) {
17          // Canvas-Rendering-Logik
18      }
19
20      async function generatePDF() {
21          const chartPng = getChartAsBase64();
22          await invoke('generate_pdf', { ...data,
23              chartPng });
24      }
```

Listing 8.2: Frontend-Funktionen

8.3 Datenstrukturen

```
1      #[derive(Debug, Serialize, Deserialize)]
2      pub struct ExperimentData {
3          pub concentrations: Vec<f64>,
4          pub total_organisms: Vec<usize>,
5          pub dead_organisms: Vec<usize>,
6      }
7
8      #[derive(Debug, Serialize)]
9      pub struct ProbitResult {
10          pub lc50: f64,
11          pub slope: f64,
12          pub intercept: f64,
13          pub r_squared: f64,
14          pub probit_data: Vec<ProbitPoint>,
15          pub regression_line: Vec<(f64, f64)>,
16          pub additional_values: AdditionalValues,
17      }
18
19      #[derive(Debug, Serialize)]
```



```
20     pub struct AdditionalValues {
21         pub ec10: f64,
22         pub ec90: f64,
23         pub loec: Option<f64>,
24         pub noec: Option<f64>,
25         pub benchmark_doses: BenchmarkDose,
26         pub risk_assessment: RiskAssessment,
27         pub matc: Option<f64>,
28     }
```

Listing 8.3: Grundstrukturen



9. Referenzen und Standards

9.1 Internationale Standards

- OECD-Richtlinien:
 - OECD 201: Algenwachstumshemmungstest
 - OECD 202: Daphnia sp. Akute Immobilisierungstest
 - OECD 203: Fisch, Akute Toxizitätstest
 - OECD 207: Regenwurm, Akute Toxizitätstests
 - OECD 211: Daphnia magna Reproduktionstest
- ISO-Standards:
 - ISO 14442:2006 - Wasserqualitätsrichtlinien
 - ISO 11348 - Vibrio fischeri Biolumineszenz
 - ISO 10706 - Chronische Toxizität für Daphnia magna
- EU-Verordnungen:
 - REACH-Verordnung (EG) Nr. 1907/2006
 - CLP-Verordnung (EG) Nr. 1272/2008
 - Wasserrahmenrichtlinie 2000/60/EG
- US EPA:
 - ECOTOX-Datenbank Standardbetriebsverfahren
 - Serie 850 - Ökologische Effekt-Testrichtlinien

9.2 Literatur

1. Finney, D.J. (1971). *Probit Analysis* (3. Aufl.). Cambridge University Press.
2. Hamilton, M.A., Russo, R.C., Thurston, R.V. (1977). Trimmed Spearman-Karber method for estimating median lethal concentrations. *Environmental Science & Technology*, 11(7), 714-719.
3. OECD (2006). Current Approaches in the Statistical Analysis of Ecotoxicity Data: A Guidance to Application. Series on Testing and Assessment No. 54.
4. Newman, M.C. (2013). *Quantitative Ecotoxicology* (2. Aufl.). CRC Press.



5. Wheeler, J.R., Grist, E.P.M., Leung, K.M.Y., Morritt, D., Crane, M. (2002). Species sensitivity distributions: data and model choice. *Marine Pollution Bulletin*, 45, 192-202.
6. Ritz, C., Baty, F., Streibig, J.C., Gerhard, D. (2015). Dose-Response Analysis Using R. *PLOS ONE*, 10(12), e0146021.
7. EFSA (2013). Guidance on tiered risk assessment for plant protection products for aquatic organisms in edge-of-field surface waters. *EFSA Journal*, 11(7), 3290.

9.3 Web-Ressourcen

- SCIOM-Website: <https://sciom.hr>
- Programm-Download: <https://lcec50calculator.sciom.hr>
- GitHub-Repository: <https://github.com/Branimir-K-Hackenberger/lcec50-calculator>
- OECD-Testrichtlinien: <https://www.oecd.org/chemicalsafety/testing/>
- US EPA ECOTOX: <https://cfpub.epa.gov/ecotox/>
- REACH-Helpdesk: <https://echa.europa.eu/support>

A. Liste der Organismen

A.1 Aquatische Organismen

Tabelle A.1: Standard-aquatische Testorganismen

Spezies	Gruppe	Anwendung
<i>Daphnia magna</i>	Crustacea	Akute und chronische Toxizität, Standard
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Crustacea	Chronische Toxizität, empfindlicher
<i>Danio rerio</i>	Pisces	Akute Toxizität, Embryotoxizität
<i>Oryzias latipes</i>	Pisces	Endokrine Disruptoren
<i>Pimephales promelas</i>	Pisces	US EPA Standard
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	Algae	Wachstumshemmung, Primärproduzenten
<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Algae	EU-Alternative
<i>Chlorella vulgaris</i>	Algae	Süßwasseralge
<i>Lemna minor</i>	Macrophyta	Wasserpflanzen
<i>Myriophyllum spicatum</i>	Macrophyta	Untergetauchte Makrophyten
<i>Vibrio fischeri</i>	Bacteria	Biolumineszenz, Schnelltest
<i>Tetrahymena pyriformis</i>	Protozoa	Einzellige Eukaryoten
<i>Chironomus riparius</i>	Insecta	Sedimenttoxizität
<i>Gammarus pulex</i>	Crustacea	Fließgewässer
<i>Hyalella azteca</i>	Crustacea	Sediment, Nordamerika

A.2 Terrestrische Organismen

Tabelle A.2: Standard-terrestrische Testorganismen

Spezies	Gruppe	Anwendung
<i>Eisenia fetida</i>	Oligochaeta	Akut und chronisch, OECD-Standard
<i>Eisenia andrei</i>	Oligochaeta	Alternative zu E. fetida
<i>Enchytraeus crypticus</i>	Enchytraeidae	Reproduktion, empfindlicher
<i>Folsomia candida</i>	Collembola	Bodenarthropoden
<i>Lactuca sativa</i>	Dicotyledonae	Keimung, Wurzelwachstum
<i>Avena sativa</i>	Monocotyledonae	Einkeimblättrige
<i>Brassica napus</i>	Dicotyledonae	Raps



ANHANG A. LISTE DER ORGANISMEN

Spezies	Gruppe	Anwendung
<i>Apis mellifera</i>	Hymenoptera	Bienen, Bestäuber
<i>Bombus terrestris</i>	Hymenoptera	Hummeln
<i>Aleochara bilineata</i>	Coleoptera	Nützlinge
<i>Pardosa sp.</i>	Araneae	Spinnen, Räuber
<i>Porcellio scaber</i>	Isopoda	Zersetzer
<i>Lumbricus terrestris</i>	Oligochaeta	Tief grabende Regenwürmer

B. Formeln und Konstanten

B.1 Transformationsfunktionen

Tabelle B.1: Transformationsfunktionen für verschiedene Methoden

Methode	Transformation
Probit	$Y = \Phi^{-1}(p) + 5$
Logit	$Y = \ln\left(\frac{p}{1-p}\right)$
Weibull	$Y = \ln(-\ln(1-p))$
Gompertz	$Y = -\ln(-\ln(p))$
Angular	$Y = \arcsin(\sqrt{p})$

B.2 Statistische Konstanten

Tabelle B.2: Kritische Werte für verschiedene Signifikanzniveaus

Parameter	90% CI	95% CI	99% CI
z-Wert	1.645	1.960	2.576
t (df=10)	1.812	2.228	3.169
t (df=20)	1.725	2.086	2.845
t (df=30)	1.697	2.042	2.750

B.3 Bewertungsfaktoren

Tabelle B.3: REACH-Bewertungsfaktoren (AF)

Verfügbare Daten	AF
Akute L(E)C ₅₀ für 3 trophische Ebenen	1000
Niedrigste chronische NOEC für 1 Spezies	100
Chronische NOEC für 2 trophische Ebenen	50
Chronische NOEC für 3 trophische Ebenen	10
SSD (5% HC ₅)	1-5
Felddaten	1-5



C. Kontakt und Support

C.1 Technischer Support

Kontakt	Details
E-Mail	support@sciom.hr
Telefon	+385 31 123 456
Web	https://sciom.hr/support
Arbeitszeiten	Mo-Fr, 8:00-16:00 MEZ

C.2 Fehlerberichterstattung

Um Probleme zu melden, geben Sie bitte Folgendes an:

1. Programmversion (Hilfe → Über)
2. Betriebssystem
3. Problembeschreibung
4. Schritte zur Reproduktion
5. Screenshot des Fehlers
6. CSV-Datei mit Daten

E-Mail: bugs@sciom.hr

C.3 Lizenzierung

Lizenzbedingungen

- **LIZENZGEWÄHRUNG** - Durch diese Lizenz gewährt Ihnen SCIOM d.o.o. folgende Rechte: - Installation und Nutzung der SOFTWARE - Erstellung einer Sicherungskopie der SOFTWARE. - Nutzung der SOFTWARE und der durch ihre Nutzung erzeugten Ergebnisse für kommerzielle und nicht-kommerzielle Zwecke ohne jegliche Verpflichtungen gegenüber dem Eigentümer oder Autor der SOFTWARE
- **EINSCHRÄNKUNGEN** - Die Verteilung von Kopien der SOFTWARE an Dritte mit oder ohne Vergütung ist nicht gestattet. - Änderung, Anpassung, Übersetzung oder Erstellung neuer abgeleiteter Werke auf Grundlage der SOFTWARE ist nicht gestattet. - Dekompilierung, Disassemblierung oder



Reverse Engineering der SOFTWARE ist nicht gestattet.

- URHEBERRECHT - Alle Rechte, einschließlich aber nicht beschränkt auf das Urheberrecht, an und zu der SOFTWARE und allen Kopien davon sind Eigentum von SCiom d.o.o.
- GARANTIEN UND HAFTUNGSAUSSCHLUSS - Die SOFTWARE wird „WIE BESEHEN“ Nöhne Garantien jeglicher Art bereitgestellt. SCiom d.o.o. schließt alle Garantien aus, ob ausdrücklich oder stillschweigend.
- HAFTUNGSBESCHRÄNKUNG - SCiom d.o.o. haftet in keinem Fall für Schäden (einschließlich, aber nicht beschränkt auf, Schäden durch Verlust von Geschäftsgewinnen, Geschäftsunterbrechung, Verlust von Geschäftsinformationen oder anderen Vermögensschaden), die aus der Nutzung oder Unfähigkeit zur Nutzung dieser SOFTWARE entstehen.
- AKADEMISCHE LIZENZ - Spezielle Lizenzoptionen sind für akademische Institutionen verfügbar. Bitte kontaktieren Sie info@sciom.hr für weitere Informationen.
- BEENDIGUNG - Diese Vereinbarung ist wirksam, bis sie beendet wird oder die SOFTWARE deinstalliert wird. Ihre Rechte aus dieser Vereinbarung enden automatisch ohne Mitteilung von SCiom d.o.o., wenn Sie gegen eine Bestimmung dieser Vereinbarung verstößen.
- ANWENDBARES RECHT - Diese Vereinbarung unterliegt den Gesetzen der Republik Kroatien und internationalen Abkommen.
- Copyright © 2025 SCiom d.o.o. Alle Rechte vorbehalten.

Für andere Lizenzbedingungen kontaktieren Sie: info@sciom.hr

Über den Autor

Dr. Branimir K. Hackenberger ist ordentlicher Professor am Institut für Biologie der Josip Juraj Strossmayer Universität Osijek. Er ist Experte für Ökotoxikologie mit über 30 Jahren Erfahrung in der Entwicklung von Methoden zur Bewertung der Toxizität chemischer Substanzen und ihrer Auswirkungen auf die Umwelt.



SCIOM d.o.o.
Fruškogorska 5, 31000 Osijek, Kroatien
<https://sciom.hr>