

# **Valutazione del rischio chimico**

CdL Magistrale Interateneo in  
Analisi e Gestione dell'Ambiente  
Università di Udine e Università di Trieste

CdL Magistrale in Chimica  
Università di Trieste

Docente  
Pierluigi Barbieri

**SSD Chimica dell'ambiente e dei beni culturali, CHIM/12**

# *Valutazione del rischio chimico*

*Processo chimico*



*(Emissioni)*



*(Dispersione  
Trasferimenti di fase  
trasformazioni ambientali)*



*Esposizione / PEC*



***Valutazione  
del rischio***

*Valutazione degli **effetti** dell'esposizione  
a sostanze singole e a miscele /  
NOAEC /tossicologia*

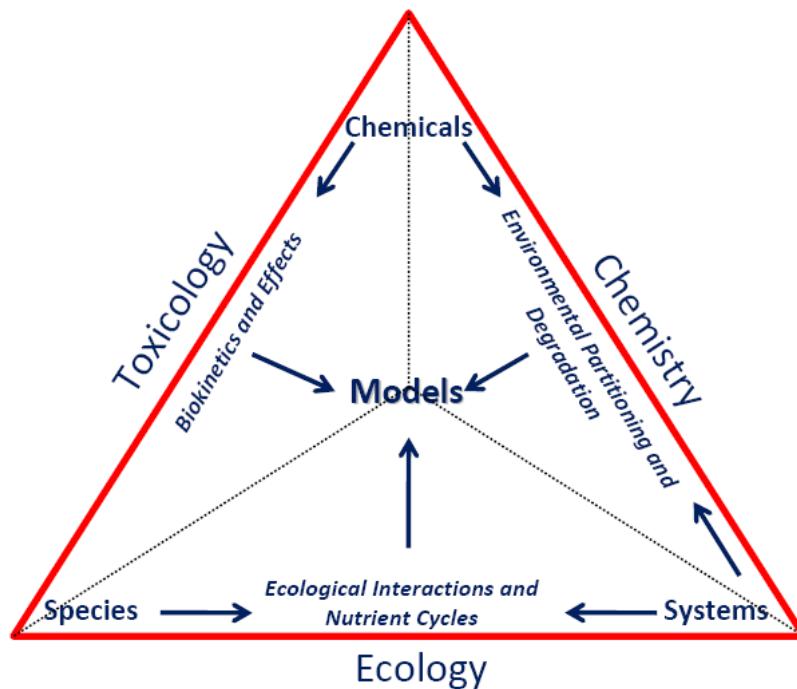
## Tossicologia ambientale

Identificazione e quantificazione dei ***danni sui sistemi biologici (diversi dalla specie umana)*** a diverso livello di organizzazione, prodotto dall'esposizione ai contaminanti ambientali

## Ecotossicologia

Studio del destino e degli effetti dei contaminanti nell'ambiente

# Ecotoxicologia: scienza delle tre S



Redrawn from Figure 7.1 of van Leeuwen and Vermeire (2007)

Table 6.1. “Disciplines” of ecotoxicology and some of their research topics

Chemistry	Toxicology	Ecology	Mathematics
Exposure assessment	effects assessment	community structure	environmental fate models
Transport	modes of toxic action	community functions	pharmacokinetic models
Partitioning	bioaccumulation	population dynamics	LC50 and NOEC statistics
Transformation	biotransformation	nutrient/energy cycling	species-species extrapolation
SARs/QSARs	extrapolation	various interactions	population and ecosystem models

## **Differences between HRA and ERA**

- 1)• Taxonomic diversity
- 2)• Toxicological endpoints
- 3)• Spatial scales
- 4)• Temporal scales
- 5)• Complexity of exposure

# Valutazioni sulla tossicità

- **A livello di Specie**
  - Laboratory toxicity experiments
  - Greenhouse studies
  - Field studies
- **A livello di Ecosistema**
  - Most sensitive species
  - Mesocosm studies
  - Species Sensitivity Distribution

# Species Level Assessment: NOEC (aka NOAEL) and EC<sub>x</sub>

- **LOEC** = lowest tested conc at which a statistically significant adverse effect is observed
- **NOEC** = highest tested conc < LOEC
  - LOEC, NOEC depend on experimental design & statistical test
- **EC<sub>x</sub>** = conc producing x% effect
  - EC<sub>x</sub> depends on experimental design and model and choice of x

# Ecosystem level assessment

## Current Method



- Determine the NOEC (or EC50) for each species representing an ecosystem
- Find the *smallest NOEC* (or EC50)
- Divide it by 10, 100, or 1000 (uncertainty factor)
- Regulate from this value
  - or argue against it

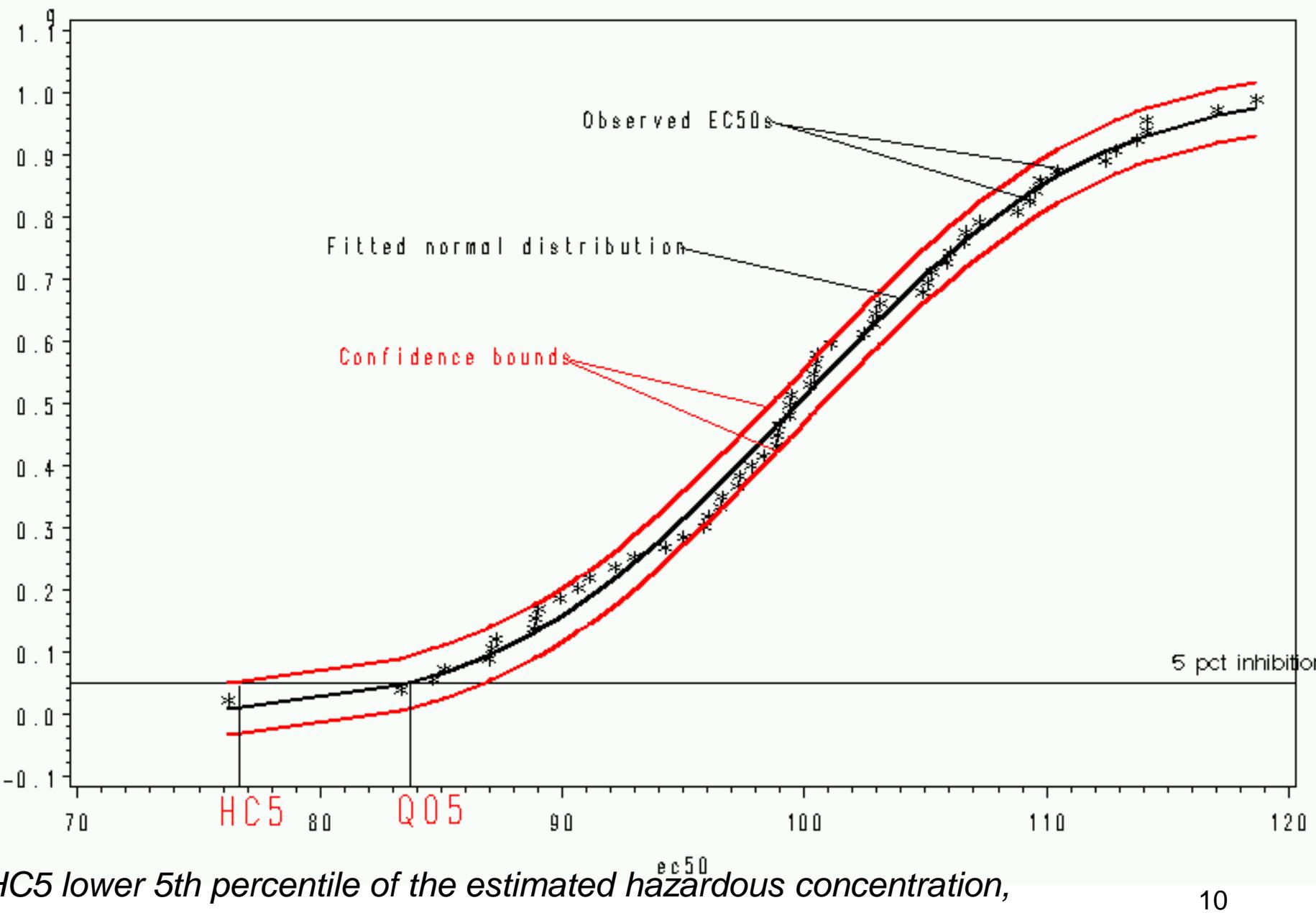
# Ecosystem level assessment

## Probabilistic Approach



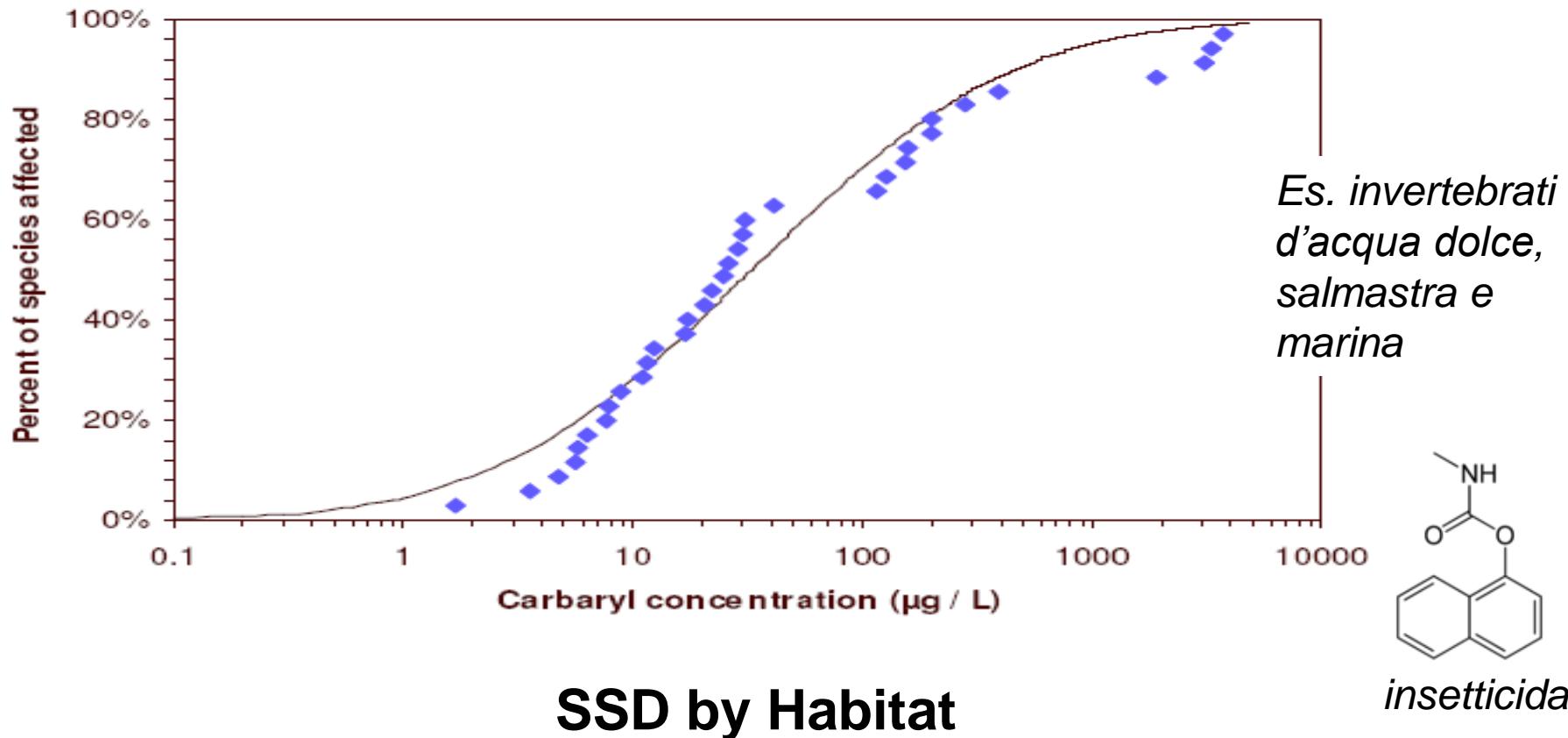
- Collect a consistent measure of toxicity from **a representative set of species**
  - EC50s **or** NOECs (not both)
- Fit a distribution (**SSD**) to these numerical measures
- Estimate concentration, HC5, that protects 95% of species in ecosystem
- Advantages and problems with SSDs

### Normal Distribution



# Selection of Toxicity Data

Acute LC<sub>50</sub> values of Carbaryl for 34 aquatic invertebrate species. The fitted log-normal SSD has a mean of 3.497 and a standard deviation of 2.063.



**Visual groupings are not taxonomic classes but defined by habitat , possibly related to mode of action** 11

# How Many Species?

- Newman's method: **40 to 60 species**
  - Snowball's chance...
  - Might reduce this by good choice of groups to model
- Aldenberg-Jaworski: **1 species will do**
  - If you make enough assumptions,...
- 8 is usual target
- 5 is common
- 20-25 in some non-target plant studies

# Which Distribution to Fit?

- **Normal, log-normal, log-logistic, Burr III...?**
  - With 5-8 data points, selecting the “right” distribution is a challenge
- **Does it matter?**
  - Recent simulation study suggests **yes**
    - Various distributions fit
  - Actual laboratory data suggests **yes**

# Which Laboratory Species?

One EUFRAM case study fits an SSD to the following

Species	Toxicity (µg/l)	Test	
<i>Selenastrum capricornutum</i>	43	72h EC50	Alga
<i>Navicula pelliculosa</i>	60	120h EC50	Alga
<i>Skeletonema costatum</i>	69	48-120h EC50	Alga
<i>Myriophyllum heterophyllum</i>	132	14d EC50	Pianta acquatica
<i>Lemna gibba</i>	180	7d EC50	Pianta acquatica
<i>Anabaena flos-aquae</i>	342	72-120h EC50	Batterio/plankton

**Aquatic toxicologists can comment (and have to) on whether these values belong to a meaningful population**

<http://www.eufram.com/outputsDraft.cfm>

# Variability and Uncertainty

**Uncertainty** reflects *lack of knowledge* of the system under study

Ex1: what distribution to fit for SSD

Ex2: what mathematical model to use to estimate ECx

Increased knowledge will reduce uncertainty

**Variability** reflects *lack of control*

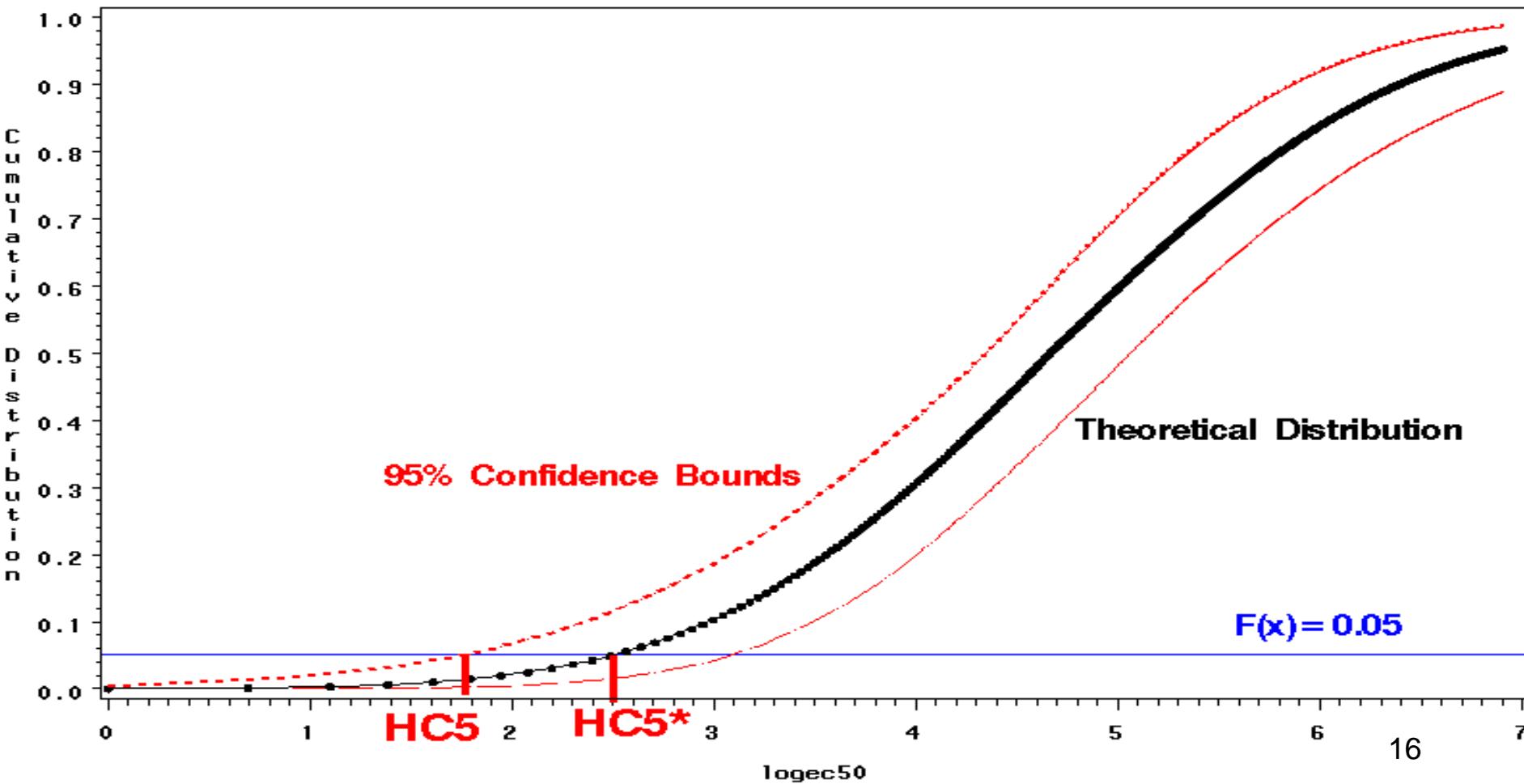
*inherent* variation or noise among individuals.

Increased knowledge of the animal or plant species will not reduce variability

# Summary Plot for SSD

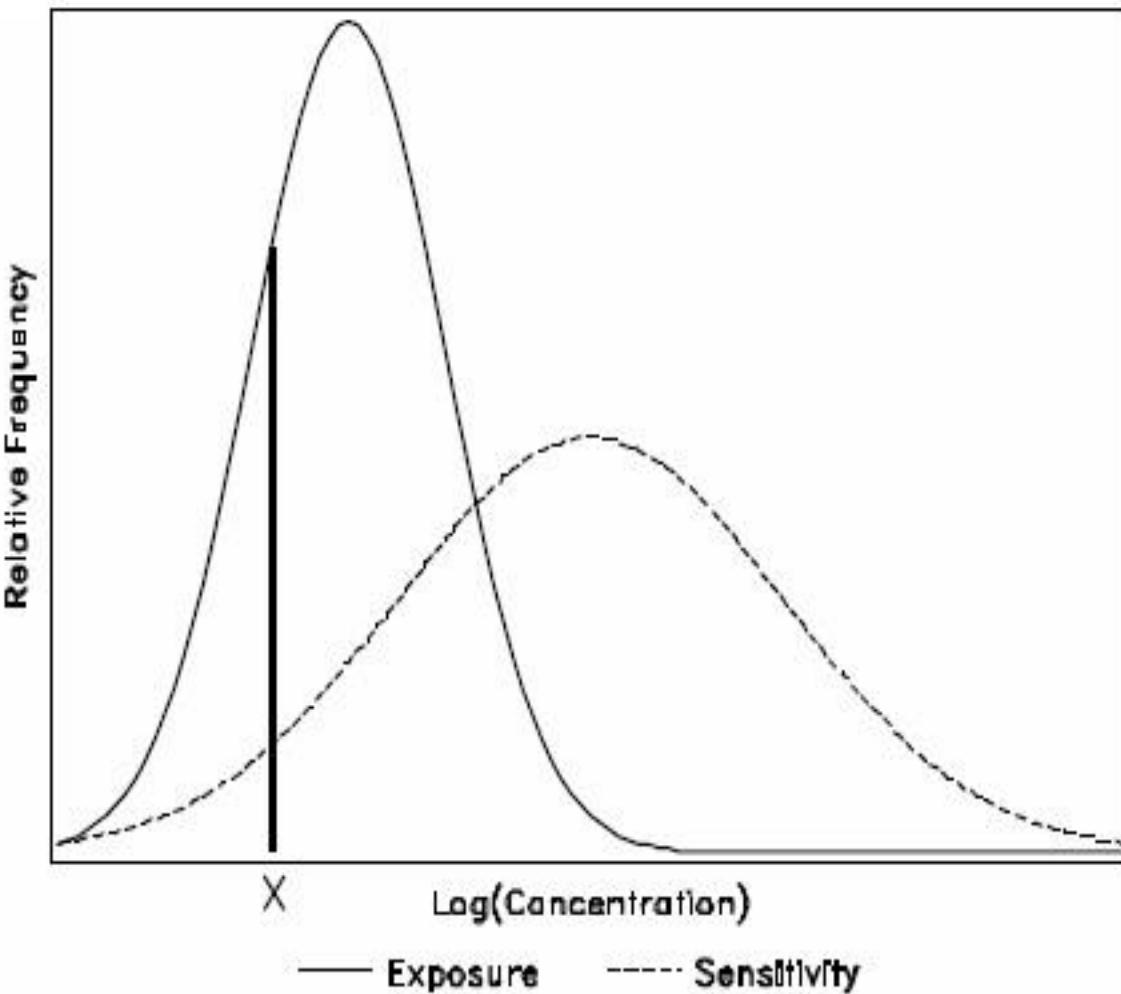
Distribution of Log(EC50) w/ 95% Confidence Bounds

Subset: Where Obs <=35,  
Subset: Where 0 < Obs,  
Mean=267.51599923, STD=533.77440553



# Putting it All Together

Probability Density Functions (PDF's)



## Joint Probability Curves

**Plot exposure and toxicity distributions together to understand the likelihood of the exposure concentration exceeding the toxic threshold of a given percent of the population**

# Calculating Risk

The risk is given by

$$\Pr[X_e > X_s]$$

where  $X_e$  = exposure,  $X_s$  = sensitivity or toxicity

This is an “average” probability that exposure will exceed the sensitivity of species exposed

# **US EPA: ICE and ACE Software Development**

## **ICE** (Interspecies Correlation Estimation)

Estimates ***acute toxicity*** for a species, genus or family ***from a surrogate species***

<https://www3.epa.gov/webice/> (2016)

## **ACE** (Acute to Chronic Estimation)

Estimates ***chronic*** toxicity ***from raw acute toxicity data***

[https://cfpub.epa.gov/si/si\\_public\\_record\\_report.cfm?dirEntryID=62534](https://cfpub.epa.gov/si/si_public_record_report.cfm?dirEntryID=62534)

Interspecies Correlation Estimation | Interspecies Correlation Estimation | US EPA - Windows Internet Explorer

US EPA http://www.epa.gov/ceampub/fchain/webice/ Interspecies Correlation software

Preferiti Siti suggeriti Risorse del computer HotMail gratuita Personalizzazione collegamenti WindowsMedia Raccolta Web Slice

US EPA Interspecies Correlation Estimation | Interspecies Cor... Pagina Sicurezza Strumenti

## Interspecies Correlation Estimation

You are here: EPA Home » Exposure Assessment » Food Chain » WebICE » Interspecies Correlation Estimation

**The data for this site is being updated, please postpone toxicity calculations until update is complete.**

**Exposure Assessment Models**

- Web-ICE Home
- Aquatic Species
- Aquatic Genus
- Aquatic Family
- Wildlife Species
- Wildlife Family

**Species Sensitivity Distributions**

- Aquatic
- Wildlife

**Endangered Species**

- Aquatic
- Wildlife

**Basic Information**

**User Manual**

**Download Model Data**

**Bibliography**

**Web ICE Logo**

The Web-based Interspecies Correlation Estimation (Web-ICE) application estimates acute toxicity to aquatic and terrestrial organisms for use in risk assessment. Please refer to the [User Manual](#) for detailed instructions on using Web-ICE.

### Web-ICE Modules

<b>ICE Aquatic</b> Aquatic vertebrates / invertebrates Species Genus Family	<b>ICE Wildlife</b> Terrestrial Birds / Mammals Species Family
---	---

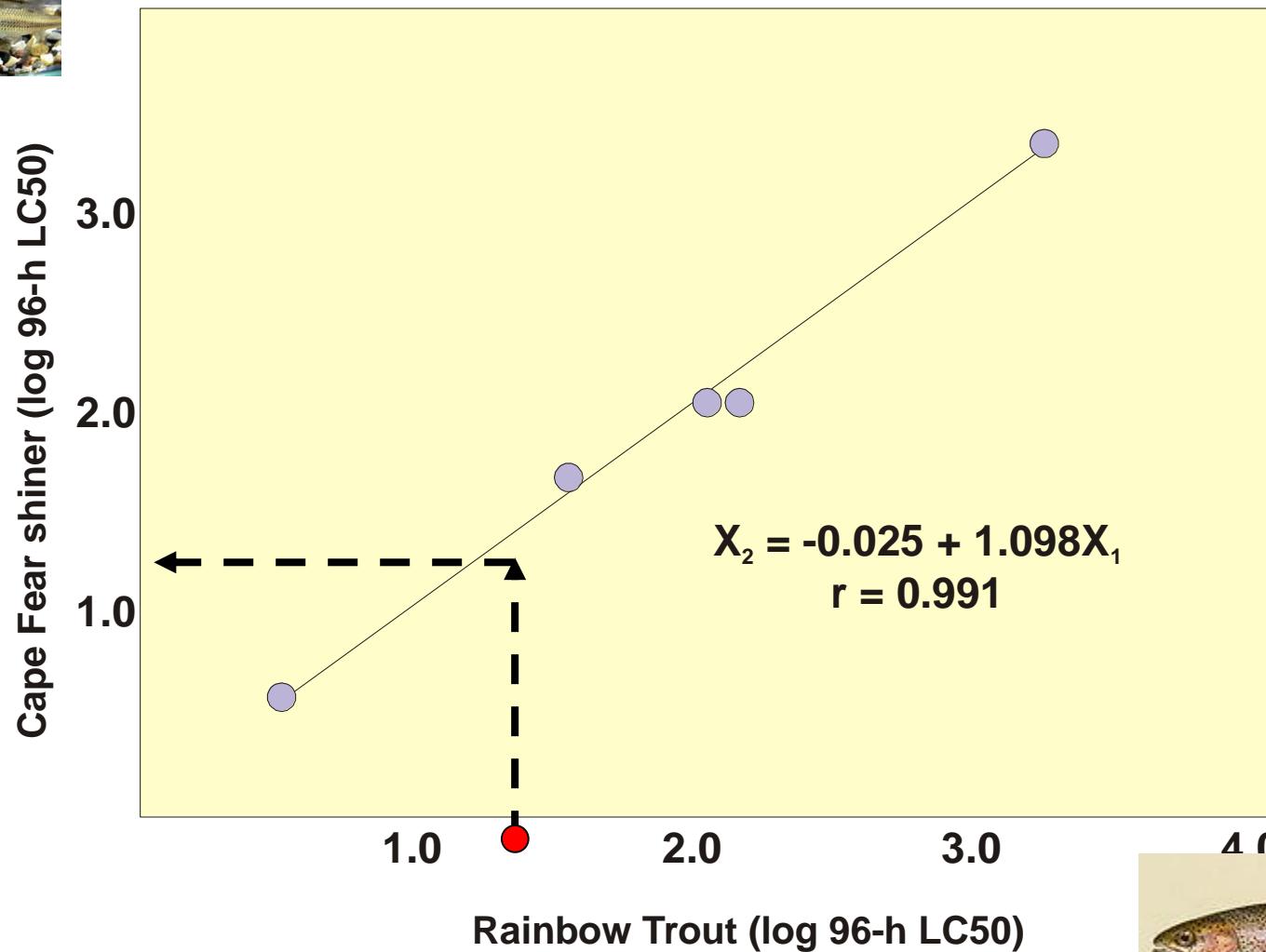
<b>Species Sensitivity Distribution Module</b>	
<a href="#">ICE Aquatic</a>	<a href="#">ICE Wildlife</a>

<b>Endangered Species Module</b>	
<a href="#">ICE Aquatic</a>	<a href="#">ICE Wildlife</a>

Fine Internet 100% 16.59

Start 6 Esplora ris... Download 3 Microsoft ... 2 Internet E... Adobe Reader

# Acute toxicity estimates using interspecies correlations



## Exposure Assessment Modeling

### Modeling Products

Groundwater  
Surface Water

Food Chain  
Multimedia  
Tools & Data

### Information Sources

About CEAM  
Frequent Questions  
CEAM Discussion  
Related Links  
Distribution & Support  
Policy

# ACE

ICE and ACE were developed by the U.S. EPA in collaboration with other federal agencies, industry, and universities to address data gaps in species sensitivity and reduce reliance on uncertainty factors in ecological risk assessment.

The Acute-to-Chronic Estimation (ACE) with Time-Concentration-Effect Models software allows prediction of chronic toxicity from acute toxicity datasets. ACE uses linear regression and accelerated life testing to predict no-effect and low-effect concentrations for chronic mortality.

#### Specifications

Current Version:	2.0
Release Date:	December 2003
Development Status:	General Release
Development Information:	<a href="#">Release Notes</a> – changes and known deficiencies
Operating System:	Win 9x, NT, 2000, XP
Development Language:	Visual Basic, Fortran
Intended Audience:	Scientist/Biologist
Key Words:	acute, chronic, toxicity, concentration, exposure
Related Web Sites:	<a href="#">Web-ICE Model Page</a> <a href="#">EPA National Health and Environmental Effects Research Laboratory (NHEERL)</a>

#### Text Files (ASCII Format)

File Name	File Description

# ACE:

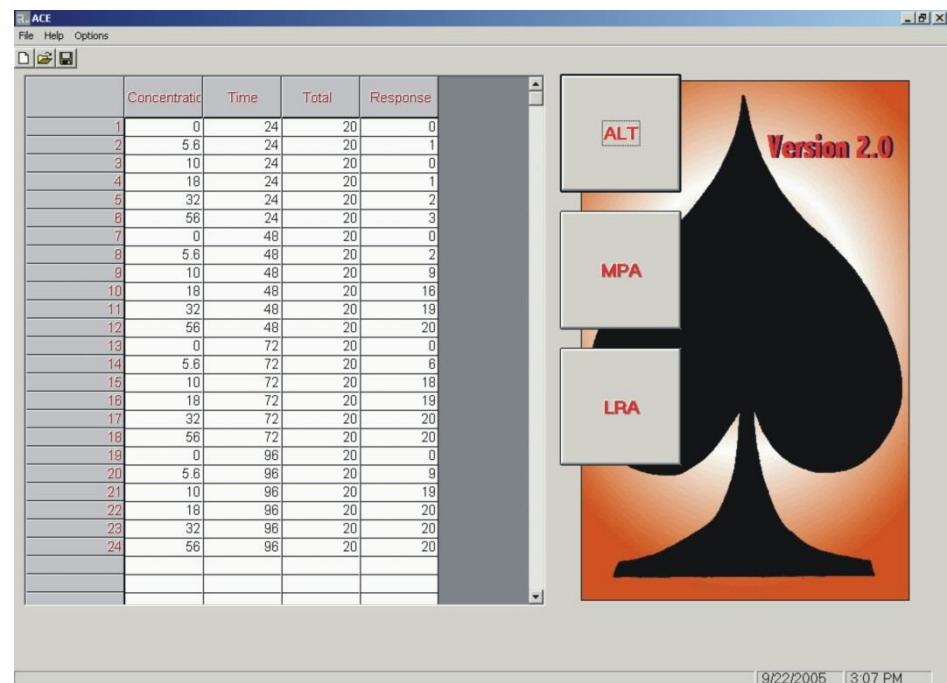
## Acute to Chronic Estimations

### Significance:

Provides estimated chronic toxicity for species with only acute data

Acute: ie. 96-hour LC50/ LD50

Chronic: long-term, sublethal



# Tossicologia acquatica

Gli studi sugli organismi acquatici sono di prima generazione, i più diffusi, i più consolidati

Misure basate su effetti a breve termine, o Saggi acuti:  
da pochi minuti (batteri luminescenti) a 24 o 96 h (pesci, crostacei).

Valutazioni: effetti prodotti da immissioni, più o meno accidentali, di sostanze diverse, di pesticidi, di reflui industriali o domestici

Specie animali: pesci, invertebrati

Specie vegetali: microalghe

Scopo: rilevare la concentrazione o la dose di una sostanza o di una miscela, di un agente fisico (turbidità, livello termico, radiazioni ionizzanti) che hanno effetto avverso misurabile per gli organismi considerati

# **Motivazioni dell'uso di saggi di tossicità con organismi acquatici**

## **a) Sollecitazioni di carattere legale –**

controllo della qualità delle acque superficiali ai fini della *tutela della fauna ittica e della pesca*

## **b) Formulazione di criteri di qualità:**

saggi *preventivi all'immissione sul mercato di nuovi prodotti chimici*. Bersagli biologici – saggi con pesci e crostacei

## **c) Tutela ambientale:**

giudizi di *accettabilità di effluenti* di cui non è nota la composizione

## Pesci

*Salmonidi* *Oncorhyncus mykiss*, *Salvelinus fontinalis*

*Ciprinidi* *Pimephales promelas*

*Ictaluridi* *Ictalurus punctatus*

*Centrarchidi* *Lepomis macrochirus*

## Invertebrati

*Cladoceri* *Daphnia magna*, *D.pulicaria*, *D.pulex*

*Anfipodi* *Gammarus lacustris*, *G.fasciatus*, *G.pseudolimnaeus*

*Decapodi* *Orconects* sp., *Cambarus* sp.

*Ditteri* *Chironomus* sp.

*Gasteropodi* *Physa integra*

## Pesci

*Ciprinodontidi* *Cyprinodon variegatus*, *Fundulus heteroclitus*, *F.similis*

*Aterinidi* *Menidia* sp.

## Invertebrati

*Copepodi* *Acartia tonsa*, *A.clausi*

*Decapodi* *Peneus setiferus*, *P.duorarum*, *Palaemonetes pugio*, *P.vulgaris*, *Crangon septemspinosa*,  
*Mysidiopsis bahia*, *Callinectes sapidus*, *Uca* sp.

*Lamellibranchi* *Crassostrea virginica*, *C.gigas*

*Policheti* *Capitella capitata*, *Neanthes* sp.

# Introduction: experimental

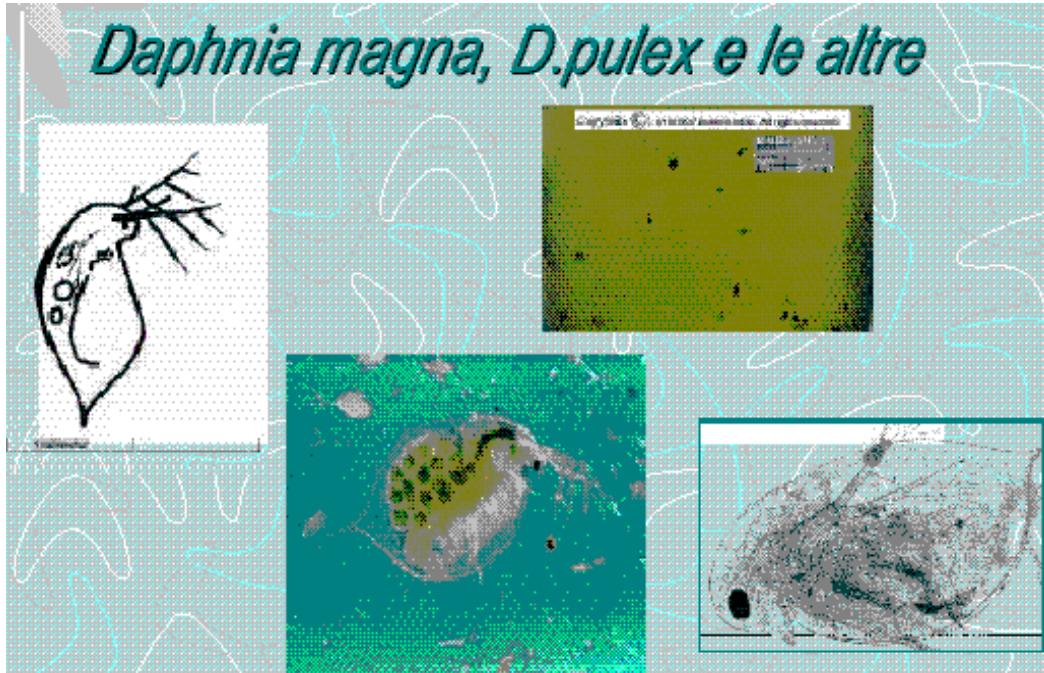
The toxicity towards **Fathead Minnow (*Pimephales promelas*)** – a freshwater fish from **north America** - has been tested [1] for

- 562 compounds representing a cross section of industrial organic chemicals [2], and
- Toxicity has been reported as median lethal concentrations LC50 (mmol/l) after 96 hours exposure

1. C.L. Russom, S.P. Brandbury, S.J. Broderius, D.E. Hammermeister, D.A. Drummond, *Environmental Toxicology and Chemistry*, 16 (1997) 948-967.
2. G.D. Veith, B. Greenwood, R.S. Hunter, G.I. Niemi, R. Regal, *Chemosphere*, 17 (1988) 1617-1630 .



## *Daphnia magna, D.pulex e le altre*



**Effetto rilevato:** morte, a volte si sceglie *l'immobilizzazione* (dafnie). Per gli organismi monocellulari si sceglie la *diminuzione della crescita* (alghe) o la *compromissione della luminescenza* (batteri)

**Somministrazione:** Nei saggi con organismi acquatici si contamina l'acqua (*effective concentration* – concentrazione efficace).

Tre sono i possibili tipi di approccio:

- **test statici.** Si allestiscono una serie di soluzioni con concentrazioni diverse senza ulteriori aggiunte di contaminante.

*Sono impiegati per i saggi di breve durata*

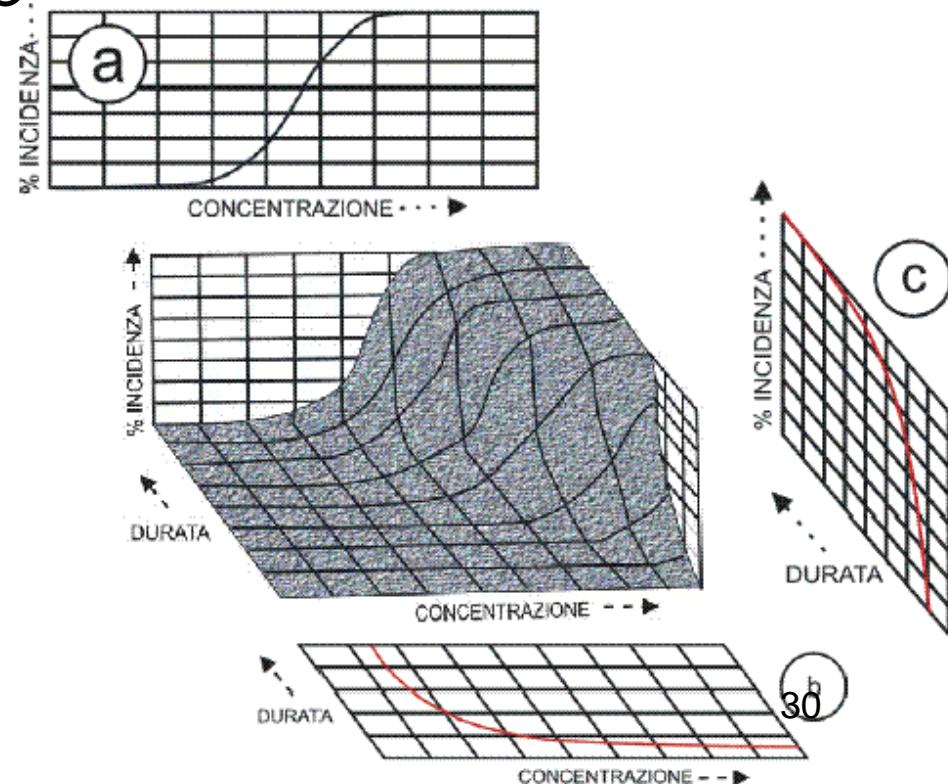
- **test con rinnovo periodico della soluzione:** si procede come con i test statici, ma dopo 24 h si procede ad una sostituzione dell'acqua a cui viene aggiunto di nuovo il tossico per ripristinare la concentrazione.

- **test a flusso continuo:** la soluzione test viene mantenuta in stato stazionario mediante un sistema di alimentazione automatico. *Sono i più utilizzati per gli esperimenti a lungo termine*

Si suppone che la sostanza impiegata nel test sia la causa dell'effetto osservato.

Nel corso del test deve essere verificato se a carico di tale sostanza si verificano trasformazioni chimiche (b). Si suppone che la risposta osservata e la sua intensità siano in funzione della concentrazione della sostanza in esame nell'acqua in cui vengono posti gli organismi-test (a). Livelli di esposizione non efficaci a breve termine possono produrre danni con tempi di trattamento più lunghi. ©

**Tuttavia, in genere, si tiene costante il tempo ma si varia la concentrazione.**



Produrre uno o più effetti sugli organismi tenuti in condizioni controllate

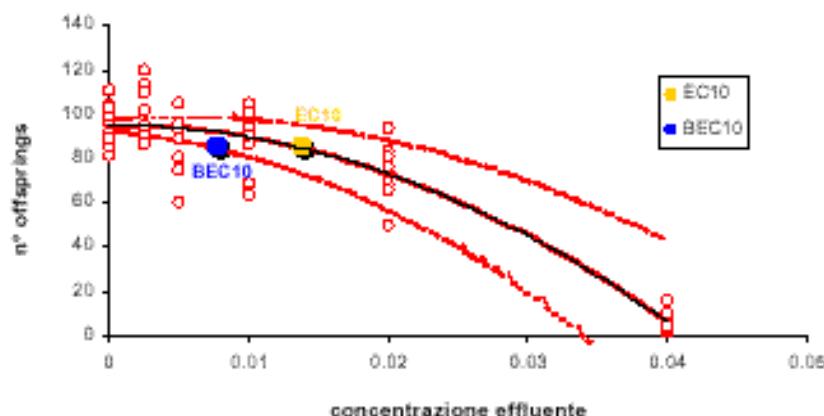
Esperimenti con più repliche:

- Variazione della concentrazione della sostanza in esame
- Scelta dei tempi
- Lettura dei danni prodotti allo scadere dei tempi prefissati
- Curva di tossicità
- EC 50 (*Median effective concentration – Concentrazione efficace mediana*)
- Quando l'effetto è la morte allora EC 50 = LC 50 (*Median lethal concentration – Concentrazione letale mediana*)
- Mediana indica che la risposta biologica è pari al 50%; alla LC 50 ci si aspetta la morte del 50% dei trattati.

- Generalmente si prendono come riferimento dei parametri fisiologici e/o riproduttivi (es. vel. di nuoto, tasso respiratorio, parametri indicativi del metabolismo) dell'organismo utilizzato nei test e se ne confrontano statisticamente i valori rispetto ad un gruppo di controllo.

## Definizione del NOEC

- Ad esempio può essere assunto come endpoint una diminuzione del 10% del tasso riproduttivo



## PREGI

Il saggio tossicologico diviene estremamente utile ai fini della valutazione delle interazioni tra le componenti tossiche e le caratteristiche naturali del corpo idrico ricevente.

## LIMITAZIONI

L'approccio tradizionale basato sull'utilizzazione di *una singola specie* può essere riduttivo rispetto alla complessità degli ecosistemi

L'utilizzazione di un *numero maggiore di specie lascia comunque irrisolti i problemi di incertezza* rispetto alla capacità di tolleranza delle innumerevoli specie (micro e macrospiche) di un ecosistema acquatico

I saggi a *breve termine*, prevalentemente utilizzati, non permettono di prevedere quali siano invece gli effetti derivanti da esposizione a lungo termine

*Soglia di tossicità.* Dose o concentrazione alla quale o al di sotto della quale non si manifesta un danno misurabile dopo un determinato tempo prestabilito. Tale concetto non si applica per quelle sostanze o agenti fisici (radiazioni ionizzanti) che agiscono sul DNA, per le sostanze mutagene, per quelle che producono un'inibizione enzimatica e dei meccanismi di trasporto, per quelle cancerogene.

*No-observed-effect level.* Max livello di esposizione ancora non efficace

*Lowest-observed-effect level.* Livello più basso tra quelli efficaci

Per definizione la soglia di tossicità si colloca tra NOEL e LOEL

*No-observed-adverse-effect level.* Concentrazioni che non producono effetti necessariamente dannosi (*adverse effect*) e pertanto anche se presenti non vengono considerati ai fini della valutazione della soglia di tossicità.

La conoscenza del NOEL **per gli organismi più sensibili di una comunità** consente di ricavare criteri di protezione accettabili. La difficoltà è rappresentata dalla possibilità di includere le specie più sensibili tra gli organismi con cui si effettuano i test di tossicità.

Individuazione *a priori* dei **percorsi critici** degli inquinanti (quelli in cui si prevedono le contaminazioni maggiori) e dei **gruppi critici** (specie o insiemi di individui più esposti alla contaminazione).

Si controllano gruppi critici e/o i percorsi critici, e si assume che se per essi sono verificate condizioni accettabili, allora anche altre specie, individui, siti si trovino in condizioni di sicurezza.



## Review

# Development and application of the adverse outcome pathway framework for understanding and predicting chronic toxicity: I. Challenges and research needs in ecotoxicology



Ksenia J. Groh<sup>a,b,\*</sup>, Raquel N. Carvalho<sup>c</sup>, James K. Chipman<sup>d</sup>, Nancy D. Denslow<sup>e</sup>, Marlies Halder<sup>f</sup>, Cheryl A. Murphy<sup>g</sup>, Dick Roelofs<sup>h</sup>, Alexandra Rolaki<sup>f</sup>, Kristin Schirmer<sup>a,i,j</sup>, Karen H. Watanabe<sup>k</sup>

<sup>a</sup> Eawag, Swiss Federal Institute of Aquatic Science and Technology, 8600 Dübendorf, Switzerland

<sup>b</sup> ETH Zürich, Department of Chemistry and Applied Biosciences, 8093 Zürich, Switzerland

<sup>c</sup> European Commission, Joint Research Centre, Institute for Environment and Sustainability, Water Resources Unit, 21027 Ispra, Italy

<sup>d</sup> University of Birmingham, B15 2TT Birmingham, UK

<sup>e</sup> University of Florida, Department of Physiological Sciences, Center for Environmental and Human Toxicology and Genetics Institute, 32611 Gainesville, FL, USA

<sup>f</sup> European Commission, Joint Research Centre, Institute for Health and Consumer Protection, Systems Toxicology Unit, 21027 Ispra, Italy

<sup>g</sup> Michigan State University, Fisheries and Wildlife, Lyman Briggs College, 48824 East Lansing, MI, USA

<sup>h</sup> VU University, Institute of Ecological Science, 1081 HV Amsterdam, The Netherlands

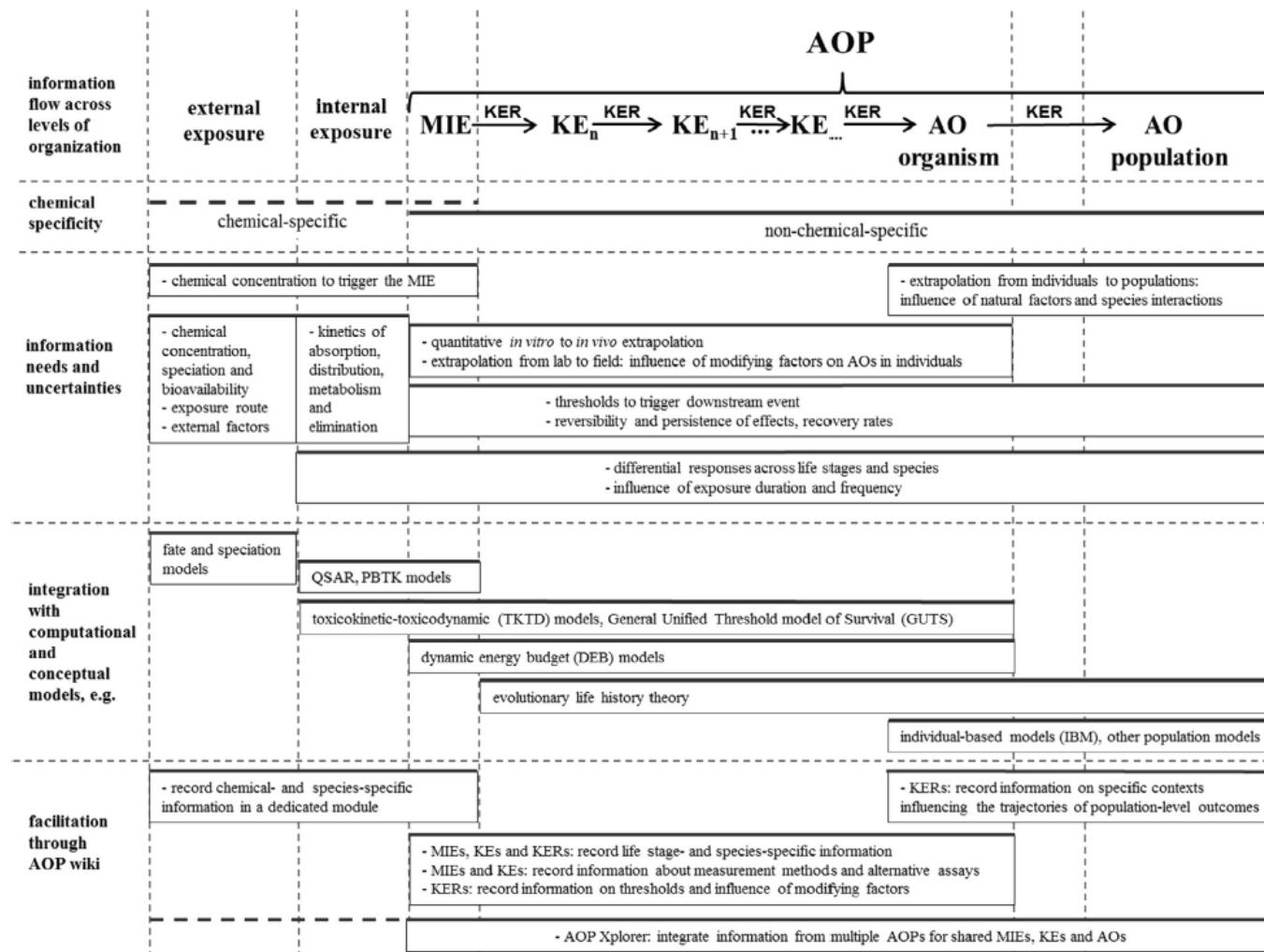
<sup>i</sup> ETH Zürich, Department of Environmental Systems Science, 8092 Zürich, Switzerland

<sup>j</sup> EPFL Lausanne, School of Architecture, Civil and Environmental Engineering, 1015 Lausanne, Switzerland

<sup>k</sup> Oregon Health & Science University, Institute of Environmental Health, Division of Environmental and Biomolecular Systems, 97239-3098 Portland, OR, USA

## HIGHLIGHTS

- AOP development can improve understanding and predicting chronic toxicity outcomes.
- Chemical- and site-specific risk assessment requires extension of the AOP framework.
- Exposure, toxicokinetics and ecological contexts should be considered.
- AOPs can be integrated with computational models employing common interfaces.
- Integration of life history theory in AOPs may improve cross-species extrapolation.



**Fig. 1.** Information flow in ecotoxicological risk assessment: key features and suggestions for further development of adverse outcome pathways framework. Top panel depicts the information flow during risk assessment, indicating the AOP position in the process. Far-left column defines several specific aspects, which are discussed in relation to AOP framework and its potential extension to include additional information. Abbreviations: AOP, adverse outcome pathway; MIE, molecular initiating event; KER, key event relationship; KE, key event; AO, adverse outcome; AOP Xplorer, a tool for AOP visualization within the AOP wiki resource; QSAR, quantitative structure-activity relationship; PBTK, physiologically-based toxicokinetic models.

## ***Possibili forme di distorsione delle prove di tossicità:***

- l'impiego di un basso numero di animali può portare a valutazioni di tipo ottimistico.
- l'insorgenza di effetti a basse concentrazioni può confondersi con le risposte dei controlli
- il trasferimento dei risultati ricavati dal campione sperimentale all'intera popolazione (inferenza statistica).
- l'estrapolazione dei risultati conseguiti con una specie ad altre

## Fattori di sicurezza

Ai NOEL sperimentali si applicano *fattori di incertezza o fattori di sicurezza* (1/5, 1/10, 1/100 del suo valore)

Spesso si effettuano *test tossicologici su organismi posti a diversi livelli della catena trofica*.

Ad esempio:

1 test su batteri (es. *Vibrio Fisheri* inibizione luminescenza)

1 test su alghe (es. *Dunaliella Tertiolecta* inibizione crescita)

1 test su invertebrati (es. *Daphnia Magna* inibizione mobilità)

1 test su pesci (es. *Pimephales promelas* LD<sub>50</sub>)

# SEDIMENTI

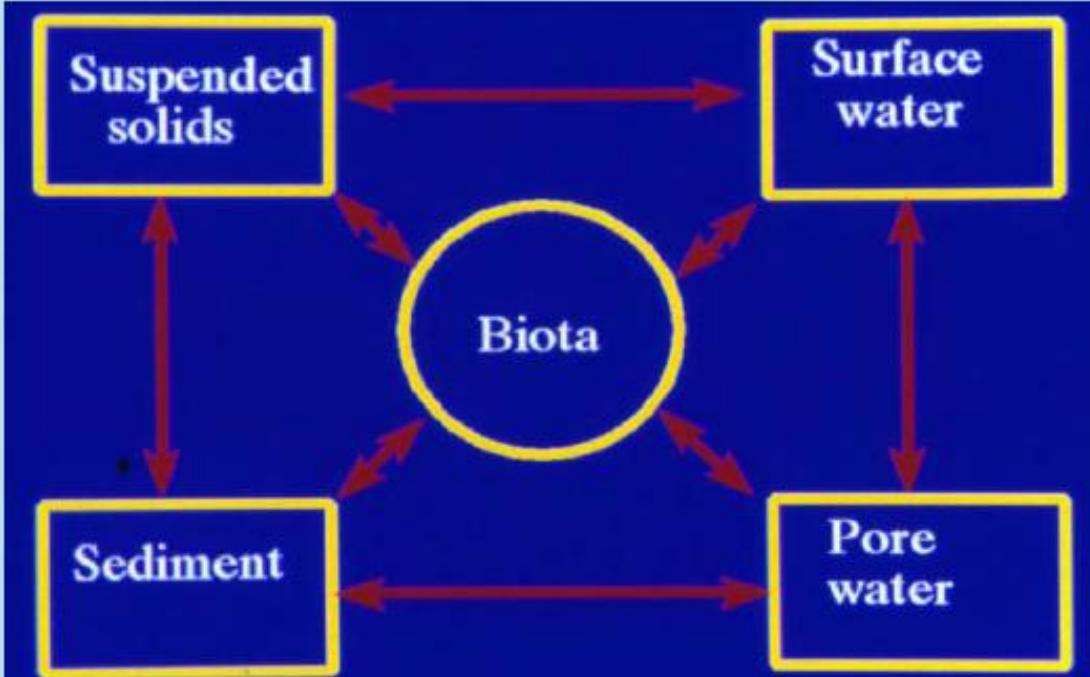


Fig. 7.26. Compartments and their interrelationships

## EQUILIBRIUM-PARTITIONING

(Van der Kooy et al., 1990)

CONCENTRATIONS IN WATER AND SOLIDS ARE RELATED THROUGH A PARTITION COEFFICIENT:

$$K_{SW} = \frac{C_s}{C_w}$$

WHERE:

$K_{SW}$  = SOLIDS-WATER PARTITION COEFFICIENT (L/KG)

$C_s$  = CONCENTRATION IN THE SOLID PHASE (MG/KG)

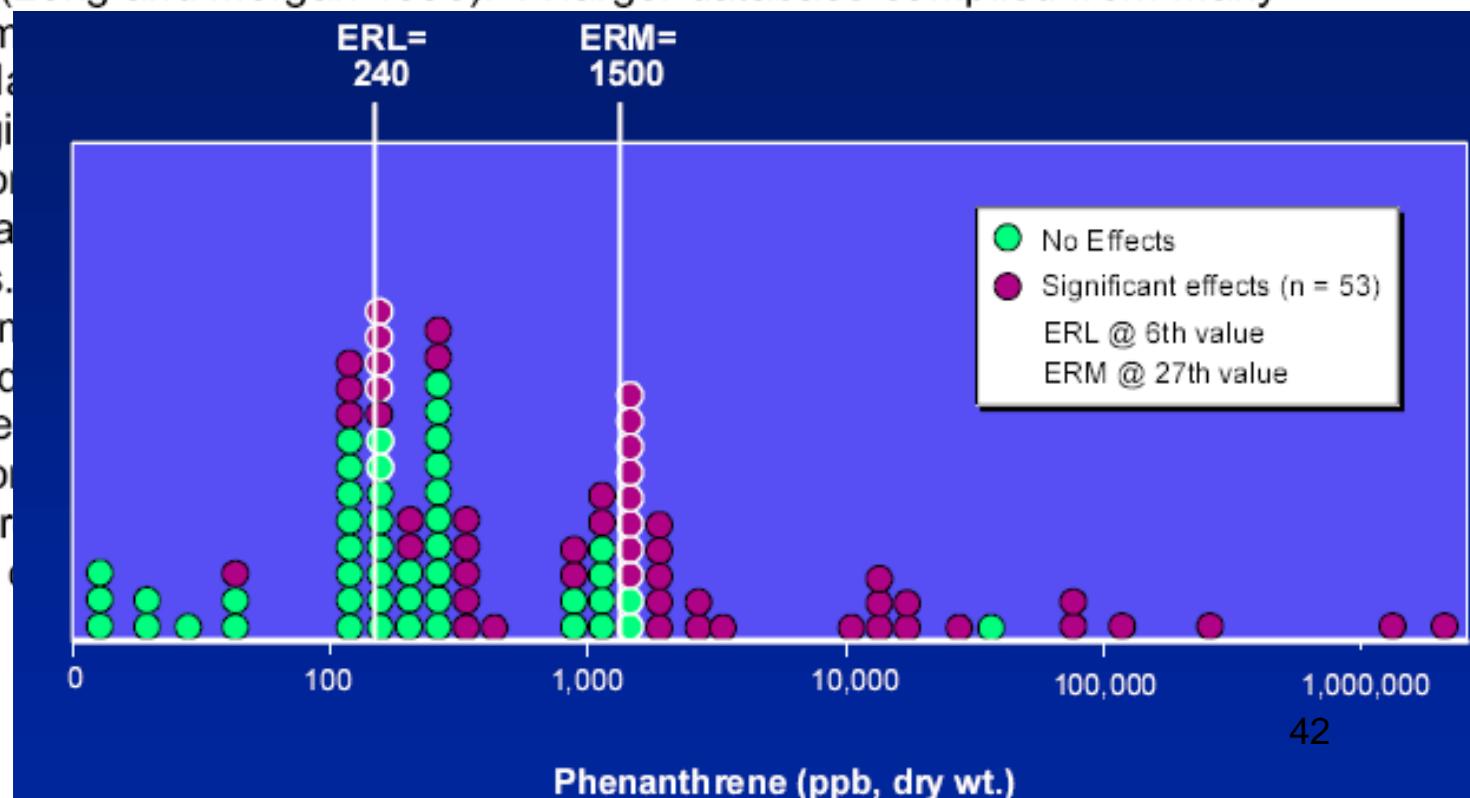
$C_w$  = CONCENTRATION IN THE WATER PHASE (MG/L)

# Sediment Quality Guidelines developed for the National Status and Trends Program

Because guidelines were needed that were based on measures of biological effects associated with toxicants, data were compiled that included both chemical measures and biological effects.

SQGs were derived initially using a database compiled from studies performed in both saltwater and freshwater and published in NOAA Technical Memorandum NOS OMA 52 (Long and Morgan 1990). A larger database compiled from many

studies performed in both saltwater and freshwater was used to derive the SQGs. The database was revised and updated in 1995, and a comprehensive database was developed. Data were collected on sediment concentrations of phenanthrene and other toxicants identified. From this database, the 10th percentile (median) of the data was determined. The 10th percentile was considered to be indicative of concentrations that were not representative of the data set.



**Table 1. ERL and ERM guideline values for trace metals (ppm, dry wt.) and percent incidence of biological effects in concentration ranges defined by the two values (from Long et al., 1995). ERL= Effects Range-Low; ERM= Effects Range-Median.**

Chemical	Guidelines		Percent incidence of effects*		
	ERL	ERM	<ERL	ERL - ERM	>ERM
Arsenic	8.2	70	5.0	11.1	63.0
Cadmium	1.2	9.6	6.6	36.6	65.7
Chromium	81	370	2.9	21.1	95.0
Copper	34	270	9.4	29.1	83.7
Lead	46.7	218	8.0	35.8	90.2
Mercury	0.15	0.71	8.3	23.5	42.3
Nickel	20.9	51.6	1.9	16.7	16.9
Silver	1.0	3.7	2.6	32.3	92.8
Zinc	150	410	6.1	47.0	69.8

\*Number of data entries within each concentration range in which biological effects were observed divided by the total number of entries within each range.

**Table 2. ERL and ERM guideline values for organic compounds (ppb, dry wt.) and percent incidence of biological effects in concentration ranges defined by the two values (from Long et al. 1995). ERL= Effects Range-Low; ERM= Effects Range-Median.**

Chemical	Guidelines		Percent incidence of effects*		
	ERL	ERM	<ERL	ERL - ERM	>ERM
Acenaphthene	16	500	20.0	32.4	84.2
Acenaphthylene	44	640	14.3	17.9	100
Anthracene	85.3	1100	25.0	44.2	85.2
Fluorene	19	540	27.3	36.5	86.7
2-methyl					
naphthalene	70	670	12.5	73.3	100
Naphthalene	160	2100	16.0	41.0	88.9
Phenanthrene	240	1500	18.5	46.2	90.3
Sum LPAH	552	3160	13.0	48.1	100
Benz(a)anthracene	261	1600	21.1	43.8	92.6
Benzo(a)pyrene	430	1600	10.3	63.0	80.0
Chrysene	384	2800	19.0	45.0	88.5
Dibenzo (a,h)					
anthracene	63.4	260	11.5	54.5	66.7
Fluoranthene	600	5100	20.6	63.6	92.3
Pyrene	665	2600	17.2	53.1	87.5
Sum HPAH	1700	9600	10.5	40.0	81.2
Sum of total PAH	4022	44792	14.3	36.1	85.0
p,p'-DDE	2.2	27	5.0	50.0	50.0
Sum total DDTs	1.58	46.1	20.0	75.0	43 53.6
Total PCBs	22.7	180	18.5	40.8	51.0

\*Number of data entries within each concentration range in which biological effects were observed divided by the total number of entries within each range.