

Undersøgelse af metode til vurdering om en koncentrationsstigning er ikke-målbar ved udledning af stof

Fagligt notat fra DCE – Nationalt Center for Miljø og Energi

Dato: 16. juli 2024 | 40



AARHUS
UNIVERSITET

DCE – NATIONALT CENTER FOR MILJØ OG ENERGI

Datablad

Fagligt notat fra DCE – Nationalt Center for Miljø og Energi

Kategori: Rådgivningsnotat

Titel: Undersøgelse af metode til vurdering om en koncentrationsstigning er ikke-målbar ved udledning af stof

Forfattere: Jacob Carstensen¹, Martin M. Larsen¹ og Pia Lassen²
Institutioner: ¹Institut for Ecoscience og ²Institut for Miljøvidenskab, DCE, Aarhus Universitet

Faglig kommentering: Peter Borgen Sørensen
Kvalitetssikring, DCE: Iben Boutrup Kongsfelt

Ekstern kommentering: Miljøstyrelsen. Kommentarerne findes her:
https://dce.au.dk/fileadmin/dce.au.dk/Udgivelser/Notater_2024/KommentarerN/N2024_40_komm.pdf

Rekvirent: Miljøstyrelsen

Bedes citeret: Carstensen J, Larsen MM, Lassen P. 2024. Undersøgelse af metode til vurdering om en koncentrationsstigning er ikke-målbar ved udledning af stof. Aarhus Universitet, DCE – Nationalt Center for Miljø og Energi, 24 s. – Fagligt notat nr. 2024 | 40

Gengivelse tilladt med tydelig kildeangivelse

Foto forside: Martin Mørk Larsen

Sideantal: 24

Indhold

1	Indledning	4
2	Problemstilling	5
2.1	Datatilgængelighed	7
2.2	Marine områder	8
2.3	Ferskvandsområder	8
3	Metoder	9
3.1	Bestemmelse af varianskomponenter	12
3.2	Sandsynlighed for ikke-målbar koncentrationsøgning	13
4	Resultater	15
4.1	Bestemmelse af varianskomponenter	15
4.2	Eksempel: TN i vandområde	16
4.3	Sandsynligheder for ikke-målbar koncentrationsøgning	17
5	Diskussion	20
6	Konklusion	23
	Referencer	24

1 Indledning

MST har bedt om DCE's input til at udarbejde et værktøj eller vejledning til miljømyndigheder ift. at kunne vurdere, om en tilladelse til udledning af et stof, hvor der i det modtagende overfladevand i forvejen er overskridelse af stoffets miljøkvalitetskrav, vil medføre en målbar koncentrationsstigning ved et repræsentativt målepunkt. Specifikt har MST bedt DCE om at vurdere "hvad der skal betragtes som en koncentrationsstigning, der med sikkerhed ikke er målbar i overfladevandet". Den teoretiske udredning skal tage højde for, at beregningen skal kunne udføres for alle de stoffer, der er fastsat miljøkvalitetskrav for i sediment og vandfasen i bek. 796/2023.

Da retningslinjer for udledningstilladelser skal dække overfladevand/situationer med meget forskellige forhold, er det ikke muligt at definere en ikke-målbar koncentration som et tal per stof. En lang række variable vil indgå i en sådan vurdering, såsom antal prøver som indgår, konfidensniveau, fortyndingsgrad, samt variation mellem prøvetagning, laboratorier og analyseusikkerhed med flere.

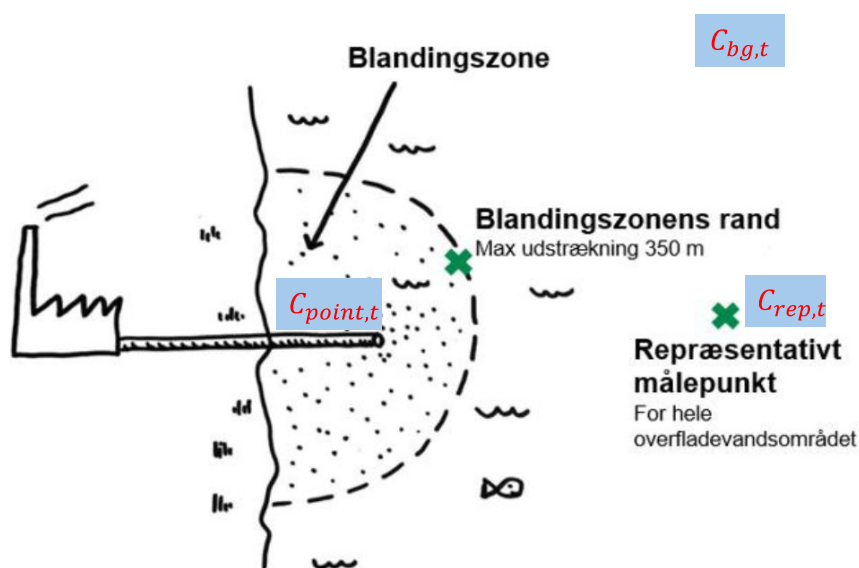
I henhold til vandrammedirektivet er udgangspunktet, at der ikke må ske en målbar koncentrationsøgning på grund af punktkilden i et område, som kan forværre muligheden for at komme i god (kemisk) tilstand. Den udviklede statistiske metode baserer sig derfor som udgangspunkt (nulhypotese) på, at der ikke sker en koncentrationsøgning med tilstrækkelig sikkerhed (konfidens), således at enhver tvivl om en koncentrationsøgning kommer miljøet til gode, og ikke punktkilden, dvs. vurderet ud fra forsigtighedsprincippet. Opgaven består derfor i at bestemme sandsynligheden for, at en merudledning giver anledning til en ikke-målbar henholdsvis målbar koncentrationsøgning i det repræsentative målepunkt, og at sammenholde disse sandsynligheder med et ønsket konfidensniveau (dvs. sikkerhed for at nulhypotesen er overholdt).

Notatet indeholder en teoretisk udredning for, hvad der skal til, for at man kan foretage disse beregninger som udgangspunkt. Den præsenterede statistiske metode er generel og kan derfor anvendes på alle stoffer. På sigt er det meningen at udvikle et redskab, der kan bruges til fastlæggelse af ikke-målbar koncentrationsstigning i de enkelte situationer. Den teoretiske udredning i nærværende notat er eksemplificeret med TN og TP.

2 Problemstilling

Et givent stof udledes fra en punktkilde med en kendt koncentration ($C_{point,t}$) til et marint vandområde, som påvirkes af vandmasser med en baggrundskoncentration ($C_{bg,t}$), hvor indekset t indikerer, at disse koncentrationer varierer over tid (Figur 2.1). Med baggrundskoncentration menes den i forvejen forekomne koncentration. Omkring punktkilden er der en blandingszone, hvor der forventes en påvirkning fra udledningen. Udenfor blandingszonen er der et repræsentativt målepunkt, som repræsenterer overfladevandets tilstand, og hvor der potentielt er en påvirkning fra udledningen, og hvor koncentrationen af det givne stof måles ($C_{rep,t}$).

Figur 2.1. Illustration af problemstilling. En punktkilde udleder et stof med koncentrationen $C_{point,t}$ til et vandområde, som har en baggrundskoncentration $C_{bg,t}$. I det repræsentative målepunkt skal det vurderes, om en ændring i $C_{point,t}$ medfører en målbar koncentrationsstigning for $C_{rep,t}$. Blandingszonen angiver området omkring punktkilden, hvor en påvirkning af udledningen må forventes.



Den kemiske tilstand vurderes ud fra et repræsentativt målepunkt i vandområdet. Koncentrationen af det givne stof i dette målepunkt vil bestå af en baggrundskoncentration¹ og et bidrag fra punktkilden, som afhænger af en påvirkningsfaktor f , dvs.

$$C_{rep,t} = C_{bg,t} + \Delta C_{extra,t} = (1 - f) \cdot C_{bg,t} + f \cdot C_{point,t} \quad (2.1)$$

Påvirkningsfaktoren beskriver fortynding af stoffet fra punktkilden til det repræsentative målepunkt og afhænger af de lokale hydrografiske forhold (eksempelvis dybdeforhold, strømningsforhold, ferskvandspåvirkning). Påvirkningsfaktoren vil derfor være tidsvarierende og specifik for et vandområde og specielt placeringen af det repræsentative målepunkt. Det er muligt at bestemme påvirkningsfaktorer ved hjælp af hydrodynamiske modeller, som er

¹ For naturligt forekommende stoffer som metaller og PAH er der en i forvejen forekommende koncentration, som består af det naturlige baggrundsniveau samt bidrag fra andre punktkilder. For syntetiske stoffer, der ikke forekommer naturligt, anvendes der ofte en "i forvejen forekommende koncentration", som viser det niveau der pt måles i et vandområde, før en ny udledning tilføjes (se Miljøministeriet (2024), spørgsmål 22 og 63).

konfigureret specifikt til formålet med høj rumlig opløsning omkring udledningspunktet. Sådanne modeller findes for flere vandområder i Danmark², men er baseret på et standardår (2014), og påvirkningsfaktoren kan ikke beregnes dynamisk for en given periode med målinger. Derfor antages påvirkningsfaktoren at være konstant og kendt. Det bør afklares, om de eksisterende modeller kan benyttes til beregning af påvirkningsfaktoren.

En merudledning fra punktkilden kan ske ved en højere koncentration eller et større volumen. Hvis merudledningen sker ved at øge udløbsvolumenet fra punktkilden og en fastholdt udløbskoncentration, vil påvirkningsfaktoren tilsvarende blive større. Dette tilfælde vil derfor svare til en koncentrationsøgning ved punktkilden, hvis påvirkningsfaktoren holdes konstant mellem de to perioder. Derfor foretages beregninger for merudledning som en koncentrationsstigning ved punktkilden. En merudledning dækker også over nye punktkilder, idet udløbsvolumenet øges fra nul med en bestemt udløbskoncentration.

Hvis koncentrationen af det givne stof fra punktkilden ændres fra en periode (t_1) til den næste periode (t_2), så vil den forventede koncentrationsændring i det repræsentative målepunkt være

$$\begin{aligned} \Delta C_{rep,t_2-t_1} &= C_{rep,t_2} - C_{rep,t_1} \\ &= (1 - f) \cdot (C_{bg,t_2} - C_{bg,t_1}) + f \cdot (C_{point,t_2} - C_{point,t_1}) \end{aligned} \quad (2.2)$$

Hvis ændringen i punktkilden ($\Delta C_{point,t_2-t_1}$) og påvirkningsfaktoren er kendt, kan fordelingen af $\Delta C_{rep,t_2-t_1}$ bestemmes ud fra fordelingerne af C_{bg,t_2} og C_{bg,t_1} . Baggrundskoncentrationen afhænger af den 'naturlige variation' for det givne stof i havmiljøet ($\mu(mon, S_t, T_t, \dots)$) foruden tilfældig variation som følge af prøvetagning og måleusikkerhed, dvs.

$$C_{bg,t} = \mu(mon, S_t, T_t, \dots) + \underbrace{YR + YR \times MON}_{\text{Sampling}} + e_t + \underbrace{e_{lab} + e_{rep}}_{\text{Analytical}} \quad (2.3)$$

Den naturlige variation af baggrundskoncentrationen kan være konstant (μ), have en fastlagt sæsonvariation ($\mu(mon)$, eksempelvis opdelt på måneder), eller være afhængig af en række forskellige variable som salinitet, temperatur mm. ($\mu(mon, S_t, T_t, \dots)$). Salinitet vil være oplagt, hvis baggrundskoncentrationen består af en blanding af vandmasser med forskellige saliniteter og koncentrationer af det givne stof. For eksempel vil baggrundskoncentrationen i fjordområder typisk være en blanding af ferskvand og marint, hvorved saliniteten kan bruges til at forklare variationerne i $C_{bg,t}$. På tilsvarende vis kan koncentrationen af et givent stof afhænge af temperatur og andre variable. Ved at inkludere sådanne forklarende variable er det muligt at reducere den tilfældige variation. Ovenstående model er formuleret for normalfordelte variable ($C_{bg,t}$) med additive effekter på højre side, men kan også formuleres for lognormalfordelte variable ($\ln(C_{bg,t})$), hvilket svarer til at variationerne på højre side har multiplikativ effekt på baggrundskoncentrationen.

² DHI har en fortyndingsmodel for danske kyster og fjorde, som kan udregne fortyndingen fra en punktkilde i et 1 km x 1 km område centreret omkring udledningspunktet. Output fra MIKE 3D modelkomplekset i 2014 benyttes som randbetingelse for dette beregningsområde. <https://www.dhigroup.com/upload/publications/misc/11825390-Fortynding%20langs%20kyster-uden%20bilag.pdf>.

Variationer i prøvetagning har også betydning for baggrundskoncentrationen. Der kan være variationer fra år-til-år i baggrundskoncentrationen (YR), som ikke kan forklares ud fra ændringer i salinitet, temperatur osv. Ligeledes kan der være ændringer i sæsonvariationen fra år-til-år ($YR \times MON$), dvs. afvigelser fra den fastlagte sæsonvariation ($\mu(mon)$) mellem årene. Endelig er der en residualvariation for prøvetagningen (e_t), som beskriver variationen mellem to prøver taget indenfor samme måned.

Den analytiske usikkerhed, eller måleusikkerhed, indeholder en række forskellige bidrag, men kan sammenfattes i en variation mellem laboratorier (e_{lab}), hvis prøverne analyseres af flere laboratorier, og en replikationsusikkerhed (e_{rep}), som beskriver variationen, hvis den samme prøve blev målt på forskellige tidspunkter af det samme laboratorie.

Fordeling af den forventede koncentrationsændring i det repræsentative målepunkt kan derfor beregnes ved at kombinere (2.2) med (2.3). Dette vil blive beskrevet i detaljer i det følgende afsnit.

2.1 Datatilgængelighed

For parametre, der indgår i NOVANA programmet er der i analysekvalitetsbekendtgørelsen (Bekendtgørelse om kvalitetskrav til miljømålinger, BEK nr. 529 af 14/05/2023; Miljøministeriet 2023a) opsat minimumskrav til analysekvalitet, der skal anvendes til overvågning af det marine miljø. Der er defineret detektionsgrænser, analyseusikkerhed (lavt og højt niveau) for metaller, TN, TP, sulfat og klorid i spildevand. Der er ikke organiske stoffer nævnt i analysekvalitetsbekendtgørelsen for spildevand.

Det repræsentative målepunkt (Figur 2.1) kan i nogle tilfælde defineres ud fra NOVANA overvågningsdata, hvis der er stationer i nærheden af udledningspunktet, eller data fra området, der kan bruges til at definere koncentrationerne for hele overfladevandsområdet. Som eksempel gennemgås datamaterialet for den marine overvågning i NOVANA i næste afsnit. Der er ikke angivet nogen grænse for hvor langt fra blandingszonen et sådant repræsentativt punkt må ligge. Der er et begrænset antal NOVANA stationer, og der måles i NOVANA overvågningen både på vandprøver, biotaprøver og sedimenter, så de nærmeste stationer er ikke nødvendigvis vandprøver. For biota og sediment er det mere kompliceret at sammenstille overvågningsdata med en udledning i vandfasen.

Data fra overvågningen er tilgængeligt via miljøportalen (<https://www.miljoportal.dk>), og der kommer løbende nye data fra vandovervågningen, mens der for biotaovervågningen kommer nye data en gang om året, typisk i foråret. Der er ikke adgang til analysekvalitetsdata direkte fra miljøportalen, ligesom der typisk heller ikke er direkte adgang til evt. dobbeltbestemmelse fra vandområderne.

For biota er der fælles analysekvalitetskrav for både ferskvand og marint vand for skaldyr: metaller, TBT, pesticider, PAH'er og naphthalen, en række chlorerede forbindelser Hexachlorbutadien, PCB, dioxiner og furaner. For anden biota (fisk) er der analysekvalitetskrav til de samme stoffer som for skaldyr, og herudover bromerede flammehæmmere og perfluorforbindelser.

2.2 Marine områder

For marint vand måles der kun næringsstoffer (inkl. TN og TP), og der måles generelt ikke på miljøfremmede stoffer i vandfasen i NOVANA regi, men der kan findes enkelte data fra regionale eller lokale projekter. Der er defineret analysekvalitetskrav i analysekvalitetsbekendtgørelsen for metaller, næringsstoffer (inklusive TN og TP), pesticider, naftalen, organotin og fenoler i marint vand, og for metaller, organotin, sum pesticider, phenoler, PAH'er, dioxiner og furaner, blødgørere og ethere i sediment.

Det marine overvågningsprogram for miljøfarlige stoffer er fokuseret på muslinger, fisk og sediment, hvor der i sediment kun måles for phthalater og fenoler. Muslinger måles for PAH'er, organotin og metaller, og for fisk er analyseprogrammet frem til 2024 klorerede forbindelser (PCB'er og klorerede pesticider), bromerede forbindelser (PBDE'er), perfluorerede forbindelser (PFAS) og dioxiner/furaner i enkelte prøver. Målinger fra fisk og muslinger kan evt. anvendes til omregning for vandkoncentrationer i blandingszonens rand. Det marine overvågningsprogram dækker stort set alle farvandsområder indenfor hvert 6-årige programperiode for vandrammedirektivet. De marine prøver for miljøfarlige stoffer indsamles kun i efteråret, og det er ikke muligt at lave sæsonopdelte opgørelser, men resultaterne forventes at være robuste middelværdier for længere tidsperioder (måneder, hele årstider) i fisk og muslinger.

2.3 Ferskvandsområder

Der er defineret analysekvalitetskrav i analysekvalitetsbekendtgørelsen for vandkemiske parametre (pH, alkalinitet, næringsstoffer (inklusive TN og TP) o.l.), uorganiske sporstoffer (inkl. metaller), organotin, pesticider, naftalen, benzen, fenoler, halogenrede alifatiske og aromatiske forbindelser, samt pentachlorphenol, LAS og MTBE i fersk overfladevand. For sediment er der analysekvalitetskrav til uorganiske sporstoffer (metaller), organotin, pesticider, aromatiske kulbrinter og PAH'er, phenoler, blødgørere og MTBE.

Der analyseres både vandprøver, biota og sediment i både ferskvand og søer, med et rullende program så alle kontrolprøver nås over en 6 årsperiode, og et antal operationelle prøver med et lidt andet analyseprogram, justeres efter forventede kilder.

3 Metoder

For at vurdere, om der er sket en målbar koncentrationsøgning fra en periode til en anden periode, er det vigtigt at fastlægge:

1. Den forventede ændring af koncentrationen i punktkilden ($\Delta C_{point,t_2-t_1}$).
2. Påvirkningsfaktoren af punktkilden i det repræsentative målepunkt. Denne faktor vil være meget lokalafhængig og ofte svær at bestemme. I dette notat vil vi antage, at påvirkningsfaktoren varierer op til 2%, men påvirkningsfaktoren indgår som en parameter, som kan tilpasses de lokalspecifikke forhold.
3. Periodelængderne for de to perioder. I dette notat antages, at begge perioder er 6 år svarende til tilstandsvurderingsperiode i Vandrammedirektivet, men dette kan ændres i forhold til den konkrete problemstilling.
4. Antallet af prøver og deres fordeling over tid som karakteriserer de to perioder. I dette notat antages enten 12 eller 24 prøver om året i hvert år, svarende til den nuværende prøvetagningsfrekvens for TN og TP på størstedelen af overvågningsstationer i NOVANA-programmet. I praksis kan prøvetagningsfrekvensen ændres efter behov.
5. Varianserne for de forskellige usikkerhedskomponenter (jvnf. ligning 2.3) ved måling af prøve fra det repræsentative målepunkt. Metoden til bestemmelse af disse varianser er beskrevet i et underafsnit nedenfor.
6. Konfidensniveauet for at kunne vurdere om der er sket en målbar stigning i koncentrationen. Valg af konfidensniveau er beskrevet nedenfor.

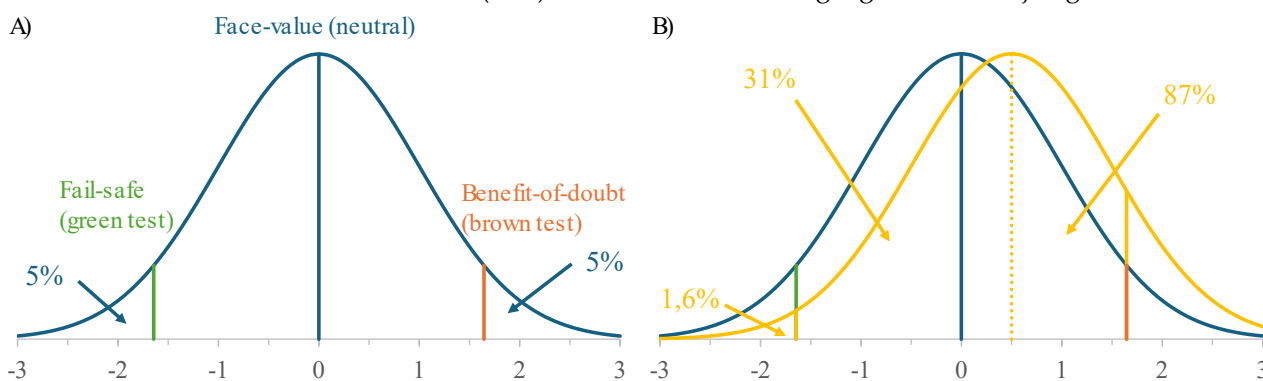
Det antages, at alle koncentrationer er normalfordelte eller kan gøres normalfordelte ved log-transformation (lognormal fordelte). Sandsynligheden for, at en kendt koncentrationsøgning er målbar (eller vil blive detekteret), kaldes styrken ($1 - \beta$) og bestemmes ud fra ovenstående parametre. Tilsvarende er sandsynligheden for, at en kendt koncentrationsøgning ikke er målbar (eller ikke vil blive detekteret) lig med 1-styrken og betegnes som en Type II fejl (β) indenfor statistikken.

Indenfor statistikken er der praksis for at anvende 95% konfidensniveau, men der er forskel på hvilken nul-hypotese (H_0), der anvendes (Figur 3.1A). Konfidensniveauet ($1 - \alpha$) benyttes til at regulere Type I fejlen (α) indenfor statistikken, som er sandsynligheden for at detektere en forskel, som ikke er der.

Hvis det som udgangspunkt antages, at der er en koncentrationsøgning (H_0) med mindre det modsatte (den alternative hypotese H_1) kan bevises med tilstrækkelig konfidens, er der tale om et såkaldt 'green test'. I dette tilfælde kommer usikkerheden miljøet til gode og koncentrationsændringen skal være negativ med en vis margin (ex. $< -1,64$, Figur 3.1A) for at kunne afvise, at der er en koncentrationsøgning. Hvis det omvendt som udgangspunkt antages,

at der ikke er en koncentrationsøgning (H0) med mindre det modsatte (H1) kan bevises med tilstrækkelig konfidens, er der tale om et såkaldt 'brown test'. I dette tilfælde kommer usikkerheden punktkilden til gode og koncentrationsændringen skal være positiv over en vis margin (ex. >1,64, Figur 3.1A) for at kunne afvise, at der ikke er en koncentrationsøgning. Kommissionen har i deres vejledninger til implementering af Vandrammedirektivet (European Commission 2003) foreslået tre forskellige principper til anvendelse af konfidens, uden at anbefale en konkret løsning:

- *Fail-safe princip*, hvilket svarer til green test. Usikkerheden kommer miljøet til gode.
- *Benefit-of-doubt princip*, hvilket svarer til brown test. Usikkerheden kommer forurenere til gode.
- *Face-value princip*, hvor usikkerheden deles ligeligt mellem miljø og punktkilde (50%). Usikkerheden deles ligeligt mellem miljø og forurenere.



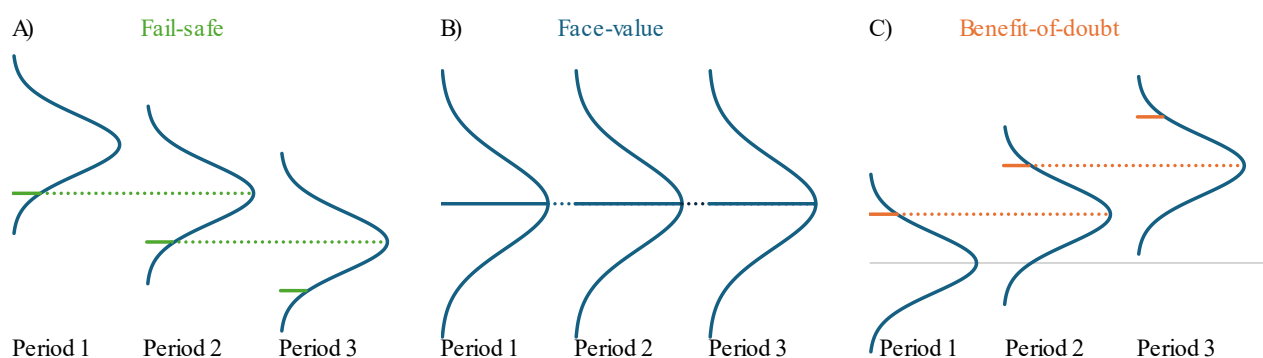
Figur 3.1. A) Fastlæggelse af kritiske værdier for test af koncentrationsændring under to forskellige nulhypoteser med 95% konfidens (Fail-safe og Benefit-of-doubt) og en ligelig fordeling af konfidens mellem miljø og punktkilde (50%, Face-value). B) Eksempel på sandsynligheder for at koncentrationsændringen ikke er målbar under de tre forskellige konfidensfortolkninger.

De tre forskellige tilgange har store konsekvenser for, om en koncentrationsøgning er målbar eller ej. Som eksempel antages en koncentrationsøgning (0,5 enheder, Figur 3.1B). Ved anvendelse af fail-safe princippet er der kun 1,6% sandsynlighed for, at koncentrationsøgningen ikke er målbar. Ved anvendelse af face-value princippet er der 31% sandsynlighed for, at koncentrationsøgningen ikke er målbar. Endelig er der ved anvendelse af benefit-of-doubt princippet 87% sandsynlighed for at koncentrationsøgningen ikke er målbar. En umiddelbar konsekvens af problemstillingen med en koncentrationsøgning er, at sandsynligheden for en ikke-målbar koncentrationsøgning stiger, jo færre data der indsamles. Dermed er der ikke noget incitament fra udleder til at øge sikkerheden i bestemmelsen ved at indsamle flere prøver.

Normalt anvendes ovenstående principper i forhold til en fastsat grænseværdi (tilstandsvurdering), hvor det vurderes om grænseværdien er overholdt eller ej med tilpas sikkerhed (konfidens). Forsigtighedsprincippet indenfor miljølovgivningen lægger derfor umiddelbart op til, at det er mest korrekt at anvende fail-safe princippet til tilstandsvurdering. Fail-safe princippet sikrer også et incitament til at indsamle flere prøver, jo tættere koncentrationen af et givent stof er på grænseværdien.

Imidlertid kan fail-safe princippet have en utilsigtet sideeffekt ved vurdering af, om der er sket en koncentrationsøgning, og det samme gør sig gældende for benefit-of-doubt princippet. Ifølge fail-safe princippet skal middelkoncentrationen (dvs. dens fordeling) i seneste periode være mindre end forrige periode med en vis margin (Figur 3.2A). Når denne periode så skal anvendes til

at vurdere, om der er sket en koncentrationsøgning i en ny periode, skal middelværdikoncentrationen (dvs. dens fordeling) igen være mindre med en vis margin. Dermed bliver der via fail-safe princippet implicit indbygget et krav om faldende middelværdikoncentration mellem perioder. På tilsvarende vis er der implicit indbygget en gradvis slækning af miljøkravet under benefit-of-doubt princippet (Figur 3.2C). Face-value princippet har ikke indbygget en margineffekt og indeholder derfor ikke en drift i miljøkravet på samme vis som fail-safe og benefit-of-doubt. Det vil derfor være oplagt at anvende fail-safe princippet til tilstandsvurdering i forhold til kravværdier, men derimod anvende face-value princippet til vurdering af en koncentrationsøgning. Face-value princippet har dog en lav konfidens (50%) og dermed stor sandsynlighed for Type I fejl, nemlig 50% sandsynlighed for at se en koncentrationsøgning, som ikke er til stede.



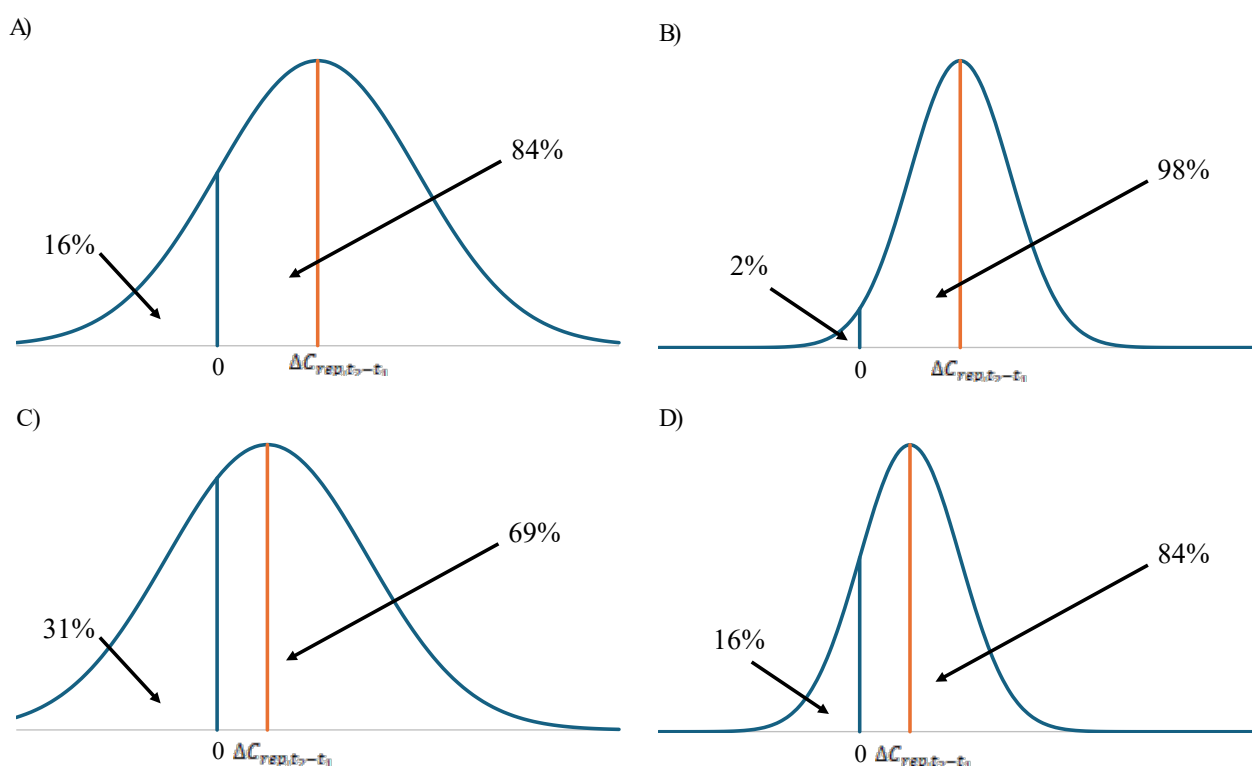
Figur 3.2. Anvendelse af A) fail-safe princip, B) face-value princip og C) benefit-of-doubt princip ved statistisk analyse for koncentrationsøgning mellem flere perioder. Koncentrationen af et givet stof er vist som y-akse.

De ovenfor nævnte 6 parametre til bestemmelse af sandsynligheden for, at der ikke er en målbar koncentrationsøgning, kan i princippet reduceres til 2 grundlæggende parametre, hvis face-value princippet anvendes (konfidensniveauet er 50%).

1. Ændringen i punktkildekoncentrationen og påvirkningsfaktoren kan kombineres til en forventet koncentrationsændring i det repræsentative målepunkt ($\Delta C_{rep,t_2-t_1}$).
2. Antallet af prøver over de to perioder kombineret med varianserne for de forskellige usikkerhedskomponenter udtrykker spredningen på ændringen i det repræsentative målepunkt.

Ændringer i disse to parametre kan illustreres ved eksemplerne vist i Figur 3.3. For en given forventet stigning i koncentrationen i det repræsentative målepunkt ($\Delta C_{rep,t_2-t_1}$) og dens sandsynlighedsfordeling ud fra det samlede antal prøver og usikkerhedskomponenterne, kan der for eksempel være 16% sandsynlighed for, at den målte koncentrationsændring er mindre end nul og 84% sandsynlighed for at den målte koncentrationsændring er større end nul (Figur 3.3A). Sandsynligheden for at der ikke er en målbar koncentrationsforøgelse er derfor 16%, og omvendt er sandsynligheden for, at der er sket en målbar koncentrationsforøgelse 84%. Der er derfor en overvejende sandsynlighed for, at der er en målbar koncentrationsforøgelse, og helt konkret 84% sandsynlighed for at middelværdien for observationerne vil vise en målbar koncentrationsforøgelse ved anvendelse af face-value princippet.

Hvis den forventede ændring kun er det halve med det samme antal prøvetagninger, så stiger sandsynligheden for en ikke-målbare koncentrationsforøgelse til 31% (Figur 3.3C). Dette betyder, at sandsynligheden stiger jo mindre den forventede koncentrationsøgning er, men sandsynligheden for en ikke-målbare koncentrationsforøgelse kan aldrig overstige 50%. Hvis spredningen på koncentrationsændringen reduceres (eksempelvis ved at indsamle flere prøver), så ændres sandsynligheden fra 16% (Figur 3.3A) til 2% (Figur 3.3B) ved den høje koncentrationsøgning og fra 31% (Figur 3.3C) til 16% (Figur 3.3D) ved den mindre koncentrationsøgning. I langt de fleste tilfælde indenfor statistikken er det en fordel at reducere spredningen, og dermed øge præcisionen og sikkerheden, for at vurdere en koncentrationsændring. Men for problemstillingen i dette notat, så reduceres sandsynligheden for en ikke-målbare koncentrationsøgning ved at øge antallet af prøver. Dette kan have den umiddelbare uheldige konsekvens, at jo færre prøver der indsamles jo større sandsynlighed er der for, at koncentrationsstigningen ikke er målbare.



Figur 3.3. Illustration af statistisk analyse for en målbare koncentrationsændring. Sandsynligheder er angivet for at den målte koncentrationsændring i det repræsentative målepunkt er henholdsvis mindre og større end nul. Den forventede middelkoncentrationsændring i det repræsentative målepunkt er ens for A) og B), såvel som for C) og D), hvor ændringen er reduceres til det halve. Spredningen på middelkoncentrationsændringen er ens for A) og C), hvorimod den er reduceret til det halve for B) og D).

3.1 Bestemmelse af varianskomponenter

Som beskrevet ovenfor, så indgår der forskellige usikkerheder i koncentrationsmålinger i det repræsentative målepunkt (2.2 og 2.3), og dermed i bestemmelsen af koncentrationsændringen ($\Delta C_{rep,t_2-t_1}$). Idet det antages, at der kun måles i et repræsentativt målepunkt, indgår der 5 usikkerhedskomponenter i bestemmelsen af $\Delta C_{rep,t_2-t_1}$ (2.3), hvoraf 3 er relateret til prøvetagningen og 2 er relateret til analysen. Normalt er usikkerheden relateret til prøvetagningen meget større end usikkerheden relateret til analysen for naturligt forekommende vandkemiske parametre som TN og TP (Carstensen & Lindegarth, under udarb.), og da det for nuværende ikke er muligt at udtrække information om det udførende laboratorie fra den nationale database (Vanda), er disse to

usikkerhedskomponenter ikke medtaget i analyserne nedenfor. Dette forventes ikke at have en større effekt på resultaterne.

Varianserne for år-til-år variationen ($V[YR]$), ændringer i sæsonvariationen fra år-til-år ($V[YR \times MON]$), og residualvariation for prøvetagningen ($V[e_t]$) bestemmes ud fra en analyse af et større datasæt (flere år og stationer) af TN og TP. Ved at anvende et større datasæt kan varianserne bestemmes med større sikkerhed. For at undersøge effekten af at inkludere forklarende variable og forskellige varianskomponenter bestemmes fem forskellige versioner af (2.3), formuleret nedenfor for logtransformeret TN, idet TN koncentrationer typisk beskrives ved en lognormal-fordeling. Tilsvarende modeller kan formuleres for log(TP).

$$\text{Model 0: } \log(TN) = \mu + e_t \quad (3.1)$$

$$\text{Model 1: } \log(TN) = \mu(mon) + e_t \quad (3.2)$$

$$\text{Model 2: } \log(TN) = \mu(mon, S_t) + e_t \quad (3.3)$$

$$\text{Model 3: } \log(TN) = \mu(mon, S_t) + YR + e_t \quad (3.4)$$

$$\text{Model 4: } \log(TN) = \mu(mon, S_t) + YR + YR \times MON + e_t \quad (3.5)$$

Forskellen mellem de første tre modeller består i, hvordan middelniveauet beskrives. I model 0 er middelkoncentrationen konstant, i model 1 er middelkoncentrationen sæsonafhængig og i model 2 er middelkoncentrationen sæsonafhængig og varierende med salinitet (S_t). Salinitet benyttes typisk som korrektionsfaktor i fjordområder med ferskvandspåvirkning, idet næringsstofkoncentrationerne er højere i ferskvand end de åbne kystområder, og blandingen mellem de to vandmasser kan beskrives ved hjælp af salinitet. I model 4 og 5 opsplittes residualvariationen ved at inddrage år-til-år variation (YR) og ændringer i sæsonvariationen fra år-til-år ($YR \times MON$). For lognormal fordelte størrelser med variansen $V[\cdot]$ udtrykkes den relative spredning ved $\exp(\sqrt{V[\cdot]}) - 1$.

De fem modeller er bestemt ud fra variansanalyser af overvågningsdata (2018-2023) for TN og TP fra 87 overvågningsstationer med mindst månedlig prøvetagning. De fem modeller repræsenterer en modeludvikling, hvorved effekten af mere detaljerede og korrekte modeller kan fremstilles pædagogisk. Varianserne er bestemt specifikt for hver overvågningsstation for at undersøge en eventuel rumlig afhængighed i estimaterne.

3.2 Sandsynlighed for ikke-målbar koncentrationsøgning

Sandsynligheden for at der er, eller ikke er, en målbar koncentrationsøgning beregnes typisk ved Monte Carlo simulering af de forskellige varianskomponenter, kombineret med antagelser omkring en stigning i koncentrationen ved punktkilden ($\Delta C_{point, t_2-t_1}$), prøveindsamlingen og dens fordeling mellem år og måneder ved det repræsentative punkt indenfor de to sammenligningsperioder, og med en given påvirkningsfaktor (f). I dette notat er der anvendt 1000 simuleringer for at bestemme fordelingen af middelkoncentrationsændringen i det repræsentative punkt ($\Delta C_{rep, t_2-t_1}$), og antallet af simuleringer mindre end nul angiver sandsynligheden for, at der ikke er en målbar koncentrationsøgning ved anvendelse af face-value princippet.

Ændringen i det repræsentative målepunkt ($\Delta C_{rep,t_2-t_1}$) simuleres ud fra (2.2) kombineret med (2.3), hvor det antages, at punktkildekoncentrationen i de to perioder er kendt (hhv. C_{point,t_1} og C_{point,t_2}), middel baggrundskoncentrationen er kendt ($\mu(mon, S_t, T_t, \dots)$), påvirkningsfaktoren (f) er kendt, variansen på prøvetagningsvariationerne er kendt ($V[YR]$, $V[YR \times MON]$ og $V[e_t]$), idet der ses bort fra de relativt små varianser forbundet med analyserne af TN og TP, og endelig at antallet af prøver fordelt på år og måneder er kendt. Observationer i det repræsentative målepunkt kan derfor simuleres ud fra

$$C_{rep,t_1} = (1 - f) \cdot \mu(mon, S_t, T_t, \dots) + \underbrace{YR + YR \times MON + e_t}_{\text{Sampling}} + f \cdot C_{point,t_1} \quad (3.6)$$

i den første periode og tilsvarende for anden periode

$$C_{rep,t_2} = (1 - f) \cdot \mu(mon, S_t, T_t, \dots) + \underbrace{YR + YR \times MON + e_t}_{\text{Sampling}} + f \cdot C_{point,t_2} \quad (3.7)$$

hvor de tilfældige variationer simuleres ud fra normalfordelingerne

$$YR \in N(0, V[YR] \cdot \left(1 - \frac{n_{YR,data}}{N_{YR,period}}\right)) \quad (3.8)$$

$$YR \times MON \in N(0, V[YR \times MON] \cdot \left(1 - \frac{n_{YR \times MON,data}}{N_{YR \times MON,period}}\right)) \quad (3.9)$$

$$e_t \in N(0, V[e_t]) \quad (3.10)$$

I tilfælde af lognormal fordelte variable er koncentrationen i det repræsentative punkt simuleret med multiplikative effekter på højre side, som efter logtransformation bliver til en additiv model. Det bemærkes, at der i varianserne for YR og $YR \times MON$ indgår en korrektionsfaktor for endelige fordelinger (Cochran 1977; Carstensen & Lindegarth 2016). Indenfor en periode har år-til-år variationen en endelig population på 6 år ($N_{YR,period} = 6$), og hvis alle år er målt ($n_{YR,data} = 6$) er der ikke behov for at inkludere denne variation. Hvis kun 3 ud af 6 år er målt, simuleres år-til-år variationen med den halve varians. På samme måde indgår en korrektionsfaktor for antal måneder med observationer ($n_{YR \times MON,data}$) i forhold til den endelige population af $YR \times MON$ ($N_{YR \times MON,period} = 72$).

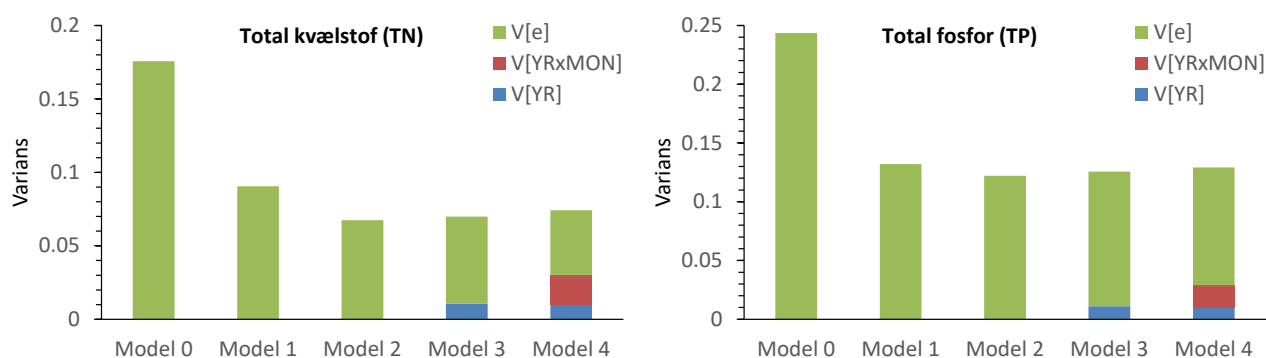
Princippet i Monte Carlo simuleringerne vises først med et eksempel for TN for at illustrere fremgangsmåden for en enkelt kombination af C_{point,t_1} , C_{point,t_2} , $\mu(mon, S_t, T_t, \dots)$, f , $V[YR]$, $V[YR \times MON]$ og $V[e_t]$. Dernæst beregnes sandsynligheden for en ikke-målbar koncentrationsøgning for TN og TP for:

- Realistiske koncentrationsøgninger i det repræsentative punkt med påvirkningsfaktor fra 0 til 2%.
- Antal prøver fra den repræsentative station fordelt på henholdsvis 12 og 24 prøver om året i henholdsvis 3 eller 6 år. Varianserne parameteriseres ud fra de bestemte varianskomponenter.

4 Resultater

4.1 Bestemmelse af varianskomponenter

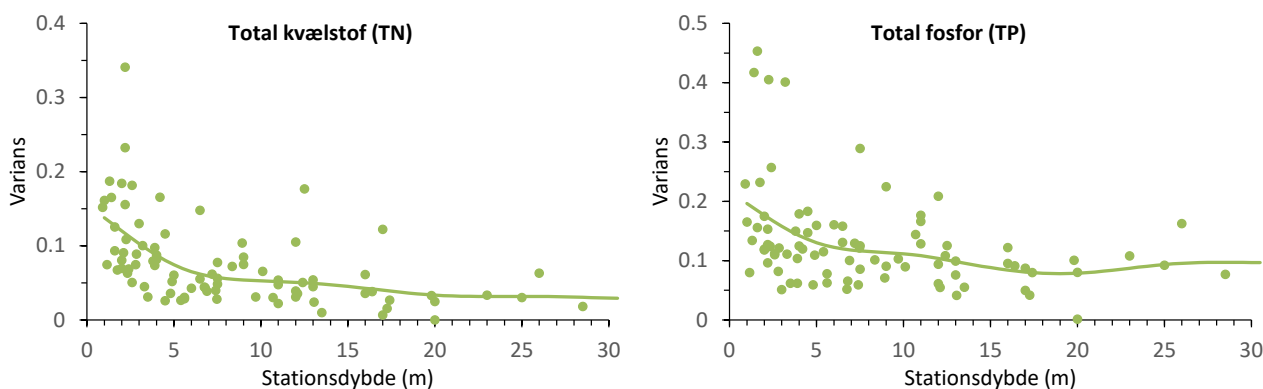
Modellerne for variationerne i TN og TP, bestemt for 87 NOVANA overvågningsstationer i en 6-årig periode (2018-2023), viser, at der er muligt at reducere den tilfældige variation ved at inkludere forklarende variable (Figur 4.1). Hvis der ikke tages højde for sæsonvariation og salinitet (model 0), så er den gennemsnitlige varians 0.176 for log(TN) og 0.243 for log(TP), hvilket svarer til en relativ spredning mellem observationer på henholdsvis 52% og 64%. Hvis TN- og TP-koncentrationer sæsonkorrigeres (model 1), reduceres den tilfældige variation til 0.0906 for log(TN) og 0.132 for log(TP), svarende til en relativ spredning mellem observationer på henholdsvis 35% og 44%. Hvis TN- og TP-koncentrationer endvidere korrigeres for salinitet (model 2), reduceres den tilfældige variation yderligere til 0.0674 og 0.122, hvilket svarer til en relativ spredning på henholdsvis 30% og 42%. Ved at inkludere forklarende variable kan den tilfældige variation reduceres væsentlig. Korrektion med salinitet havde større effekt for TN end for TP, hvilket skyldes, at TN i havmiljøet i større udstrækning kommer fra land, og dermed er der en stærkere relation til salinitet.



Figur 4.1. Gennemsnitlige variansestimater for de fem modeller for TN og TP (3.1-3.5).

Den tilfældige variation i TN- og TP-koncentrationer kan opdeles i år-til-år variation, ændringer i sæsonvariationen mellem år og residualvariation (model 3 & 4). For både TN og TP er residualvariationen (23% og 37%), altså variation mellem målinger indenfor samme måned, den største, efterfulgt af ændringer i sæsonvariationen (15% for både TN og TP) og endelig år-til-år variationen (10% og 11%).

En yderligere analyse af den samlede varians (summen af varianser for model 4) viser, at stationer i lavvandede områder har større tilfældig variation for TN- og TP-koncentrationer end dybere stationer (Figur 4.2). For stationer dybere end 5 m er den samlede varians for log(TN) omkring 0.05 og for log(TP) omkring 0.10. For stationer lavere end 5 m stiger variansen meget skarpt med værdier 2-3 gange højere. Der vil derfor være større usikkerhed forbundet med at bestemme en koncentrationsændring i et lavvandet område sammenlignet med et dybere.



Figur 4.2. Den samlede varians (model 4) for 87 overvågningsstationer mod dybden på stationen for $\log(\text{TN})$ og $\log(\text{TP})$. En non-parametrisk GAM model er fittet til data.

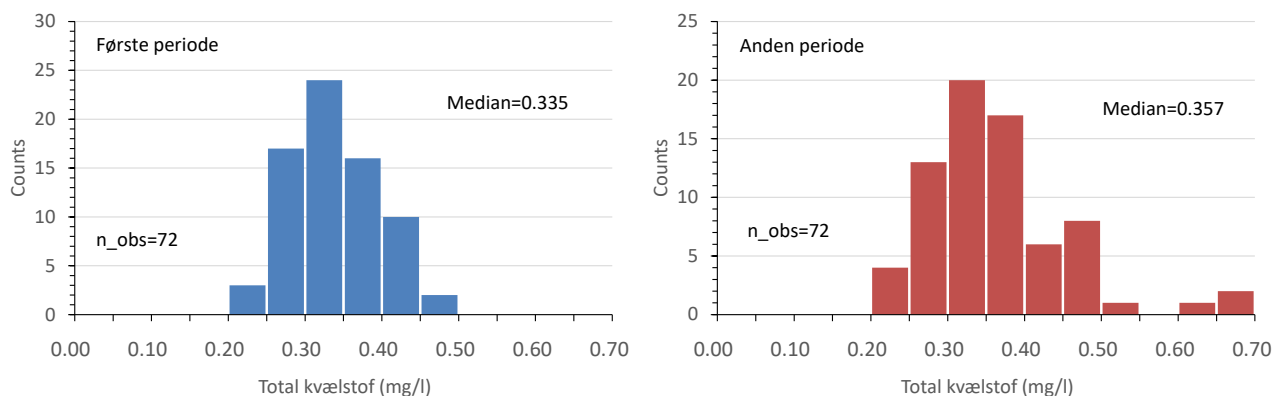
De estimerede varianser for TN og TP (model 4) indgår i simuleringerne præsenteret nedenfor. Det skal bemærkes, at varianser for de enkelte vandområder er behæftet med en vis usikkerhed, og at overvågningsstationer for de fleste marine vandområder er placeret på de dybeste steder (typisk >10 m). Derfor benyttes gennemsnitlige estimater for varianskomponenter for de dybere stationer til eksemplificering (Tabel 4.1). Det bemærkes, at varianser for TP er væsentlig højere end for TN.

Tabel 4.1. Variansestimater for simuleringer beregnet som middelværdier over overvågningsstationer dybere end 10 m.

Varians	Forklaring	TN	TP
$V[\text{YR}]$	År-til-år variation	0,0062	0,0064
$V[\text{YR} \times \text{MON}]$	Ændringer i sæsonvariation mellem år	0,0102	0,0199
$V[e_t]$	Residual variation indenfor en måned	0,0279	0,0704
$V[C_{bq,t}]$	Samlet variation (summen af ovenstående)	0,0443	0,0967

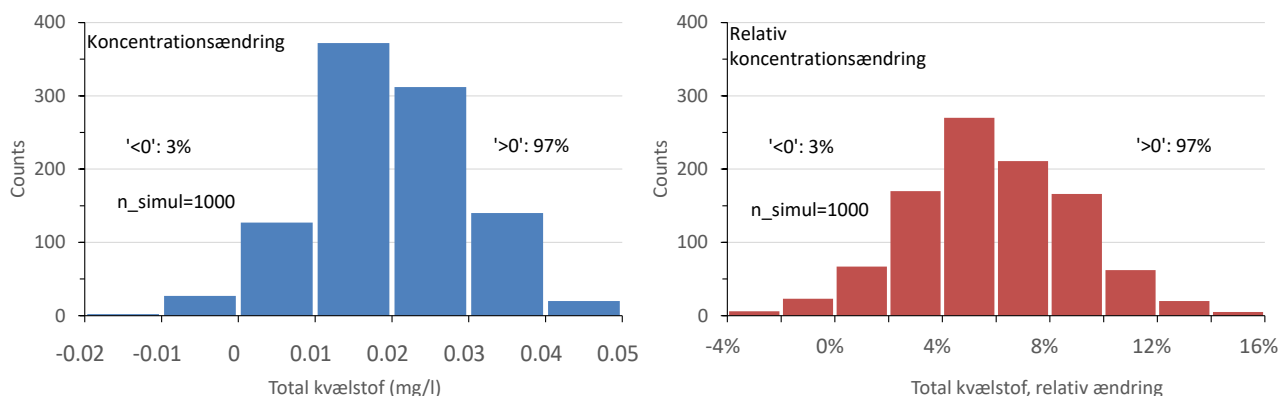
4.2 Eksempel: TN i vandområde

Som eksempel på beregning af sandsynligheden for, at en koncentrationsøgning ikke er målbar, lad os antage, at udledningen af TN fra en punktkilde er 6 mg/l i første 6-årige periode og stiger til 8 mg/l i anden 6-årige periode. I det repræsentative målepunkt antages en påvirkningsfaktor af punktkilden på $f = 1\%$, og samtidig er der en baggrundskoncentration på 0.28 mg/l ($\sim 20 \mu\text{M}$, som er en typisk koncentration i de åbne indre danske farvande). Det antages, at der indsamles prøver i det repræsentative punkt hver måned i hvert år i hver periode. En simulering under disse antagelser med anvendelse af ligningerne (3.6-3.10) og de bestemte variansbidrag for TN (Tabel 4.1), viser en stigning i medianværdien fra 0.335 til 0.357 mg/l og en generelt højere fordeling (Figur 4.3). Ved anvendelse af face-value princippet er der tale om en stigning i TN koncentrationen og derfor er der i dette tilfælde tale om en målbar koncentrationsøgning.



Figur 4.3. Simulering af TN fordelingerne i to forskellige 6-års perioder, hvor TN koncentrationen i punktkilden stiger fra 6 mg/l til 8 mg/l og fortyndes 1% ved det repræsentative målepunkt. I hver periode indsamles prøver månedligt hvert år.

Hvis denne simulering gentages 1000 gange og fordelingen af forskellen mellem periode 2 og periode 1 beregnes, kan fordelingen af koncentrationsændringen beregnes i absolutte og relative værdier (Figur 4.4). Ud af de 1000 simuleringer var kun 29 mindre end nul, hvilket betyder, at sandsynligheden for en ikke-målbar koncentrationsøgning er omkring 3%, og tilsvarende er der 97% sandsynlighed for en målbar koncentrationsøgning, når face-value princippet anvendes.

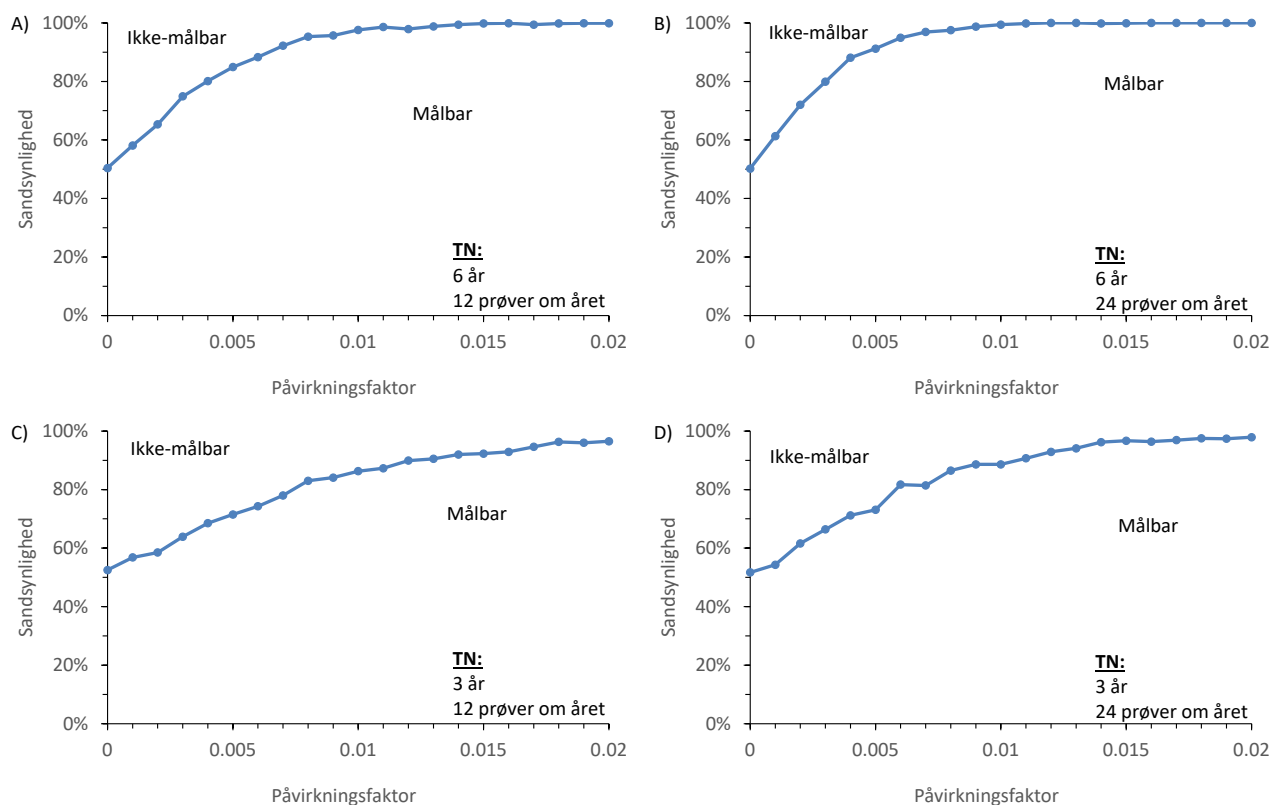


Figur 4.4. Fordelingen af koncentrationsændringer (absolutte og relative koncentrationer) fra periode 1 til periode 2 fra 1000 Monte Carlo simuleringer.

4.3 Sandsynligheder for ikke-målbar koncentrationsøgning

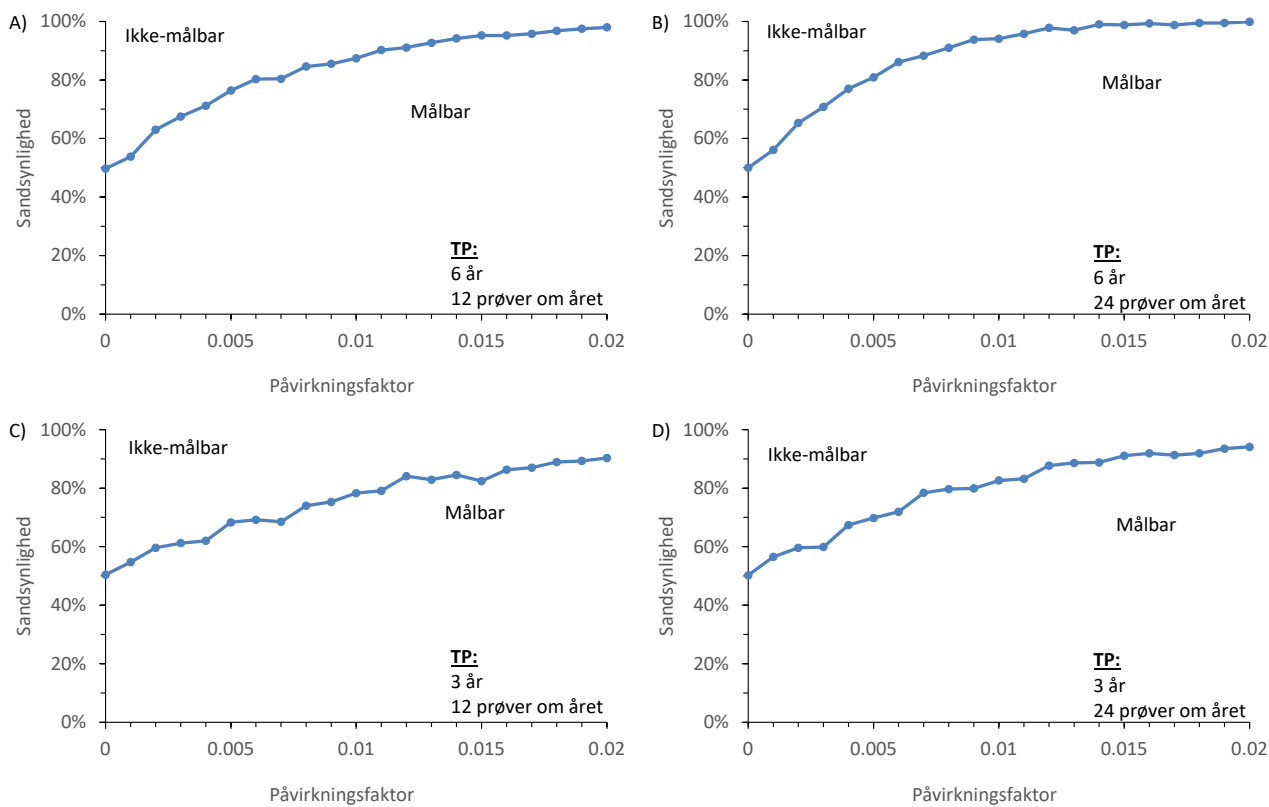
Ovenstående simuleringseksempel udvides til at bestemme sandsynligheden for en målbar eller ikke målbar koncentrationsøgning for forskellige påvirkningsfaktorer og prøvetagningsfrekvenser for total kvælstof (TN) (Figur 4.5). Hvis der indsamles månedlige prøver i 6 år, falder sandsynligheden for en ikke målbar koncentrationsøgning fra 50%, når påvirkningsfaktoren er meget lille, til omkring 15% ved en påvirkningsfaktor på 0.5%, og omkring 2-3% ved en påvirkningsfaktor på 1% (Figur 4.5A). For højere påvirkningsfaktorer er sandsynligheden for en ikke-målbar koncentrationsøgning endnu mindre. Hvis antallet af prøver om året øget fra 12 til 24 prøvetagninger, så falder sandsynligheden for en ikke-målbar effekt endnu hurtigere (Figur 4.5B). Således er sandsynligheden <1% for påvirkningsfaktorer over 1%. Hvis antallet af år med prøvetagning reduceres fra 6 til 3 år, således at der kun overvåges hvert andet år, så er sandsynligheden for en ikke målbar koncentrationsøgning omkring 14% ved en påvirkningsfaktor på 1%, og omkring 4% ved en påvirkningsfaktor på 2% (Figur 4.5C). Tilsvarende vil en øget indsamlingsfrekvens i de tre år resultere i en sandsynlighed for ikke målbar effekt omkring

11% for en påvirkningsfaktor på 1% og en sandsynlighed omkring 2% for en påvirkningsfaktor på 2% (Figur 4.5D). Det bemærkes, at sandsynligheden for en ikke målbar effekt er mindre, når der indsamles månedlige prøver hvert år (Figur 4.5A) sammenlignet med 24 prøver hvert andet år (Figur 4.5D), selvom antallet af prøver er ens. Dette skyldes, at år-til-år variationen får en væsentlig betydning, når der ikke indsamles prøver alle år (ligning 3.6-3.10) og der derfor er et usikkerhedsbidrag fra de tre år uden observationer.



Figur 4.5. Sandsynligheden for henholdsvis målbar eller ikke målbar koncentrationsøgning for total kvælstof i det repræsentative målepunkt for forskellige prøvetagningsfrekvenser og påvirkningsfaktorer. Koncentrationen ved punktkilden stiger fra 6 til 8 mg/l med en baggrundskoncentration på 0.28 mg/l.

For total fosfor (TP) koncentrationen falder sandsynligheden for ikke målbar koncentrationsøgning ligeledes med stigende påvirkningsfaktor (Figur 4.6). På grund af de relativt større varianser for TP, sammenlignet med TN, så falder sandsynligheden knapt så hurtigt med stigende påvirkningsfaktorer. Ved månedlig prøvetagning hvert år er sandsynligheden for ikke målbar koncentrationsøgning omkring 24% ved en fortyndingsfaktor på 0,5%, ~13% ved en påvirkningsfaktor på 1% og ~2% ved en påvirkningsfaktor på 2% (Figur 4.6A). Tilsvarende ses, at sandsynligheden for en ikke-målbar koncentrationsøgning er noget højere for TP end for TN for de andre simuleringer (Figur 4.6B-D).



Figur 4.6. Sandsynligheden for henholdsvis målbar eller ikke målbar koncentrationsøgning for total fosfor i det repræsentative målepunkt for forskellige prøvetagningsfrekvenser og påvirkningsfaktorer. Koncentrationen ved punktkilden stiger fra 1 til 1,5 mg/l med en baggrundskoncentration på 0,031 mg/l.

5 Diskussion

Opgaven falder indenfor fagområdet statistisk kvalitetskontrol, hvor det undersøges om en tilstand, bedømt ud fra et antal prøver, overholder fastsatte kravværdier. Tilstanden for miljøfarlige stoffer (Miljøministeriet 2023b), såvel som TN og TP (grænseværdier endnu ikke fastlagt), skal stadig klassificeres i henhold til om miljøkravene er overholdt, selvom nærværende analyse fokuserer på koncentrationsændringer over tid. Retningslinjerne fra Miljøministeriet og kommissionens vejledninger til implementering af Vandrammedirektivet (European Commission 2003) giver ikke en klar vejledning til, hvordan klassificeringen statistisk skal håndtere usikkerhed og konfidens. Anvendelse af forsigtighedsprincippet tilskrives dog, at tilstanden i forhold til fastsatte kravværdier vurderes ud fra fail-safe princippet. Dette følger anvendelsen af konfidensgrænser i OSPARs QSR2023, hvor kravet for god tilstand er, at den øvre 95% konfidensgrænse er under miljøkvalitetskravet (OSPAR, 2023a), eksemplificeret ved metaller i fisk og muslinger for forskellige OSPAR vandområder (Figur 4 i OSPAR, 2023b) hvor kun "god" status (grøn) opnås når den øvre konfidensgrænse er under miljøkvalitetskriteriet (i dette tilfælde som ERL), hvorimod status bliver rød (ikke-god), selvom middelværdien (cirklen) er under ERL, men den øvre konfidensgrænse er over. Beskrivelse af metoden, der anvendes i OSPAR, kan findes i Larsen et al. (2023).

Nærværende notat omhandler problemstillingen relateret til eventuelle koncentrationsstigninger som følge af ændret udledning fra en punktkilde fra en periode til en anden periode (eksempelvis 6-årige perioder i henhold til Vandrammedirektivet). Ved vurdering af koncentrationsændringer over tid indgår der i anvendelsen af fail-safe eller benefit-of-doubt principperne en margin, som er bestemt ud fra konfidensniveauet. Anvendelse af disse to principper kan derfor medføre en gradvis skærpelse (fail-safe) eller slækkelse (benefit-of-doubt) af kravene til miljøtilstanden over tid, når den statistiske analyse anvendes over flere på hinanden følgende perioder (Figur 3.2). Dette taler for anvendelse af face-value princippet, når en ændring over tid skal vurderes, hvor usikkerheden deles ligeligt mellem udleder og recipient. For lave påvirkningsfaktorer (tæt på 0), er sandsynligheden for en ikke-målbar koncentrationsøgning 50% (Figur 4.5 og Figur 4.6). Det betyder, at der er lige stor sandsynlighed for, at der sker en stigning eller fald i koncentrationen, på trods af øget udledning. Problemet er, at fortyndingen i det repræsentative målepunkt kan blive så stor (meget lille påvirkningsfaktor), at det repræsentative målepunkt ikke er repræsentativt for den potentielle påvirkning af den givne punktkilde. Derfor bør det repræsentative målepunkt ligge i umiddelbar nærhed af blandingszonens rand, hvor påvirkningen er størst (European Commission 2003; s. 24), således at sandsynligheden er størst for at detektere en reel større påvirkning fra punktkilden. De anvendte simuleringer for TN og TP indikerer, at påvirkningsfaktoren helst ikke skal være mindre end 0.01 for at kunne detektere en større påvirkning med tilstrækkelig sandsynlighed (styrke >80-90%). Den forelagte metode vil ligeledes kunne anvendes til at beregne styrken for merudledning af andre stoffer.

En mulig modifikation af metoden til vurdering af en målbar koncentrationsøgning, som følger forsigtighedsprincippet, er at anvende fail-safe princippet, når og kun når miljøkvalitetskravene er overskredet. Tilsvarende vil der ikke være behov for at vurdere en koncentrationsøgning i denne modificerede me-

tode, hvis miljøkvalitetskravet for det givne stof er opfyldt. Fail-safe princippet vil dermed medføre en gradvis skærpelse af kravene til miljøtilstanden, indtil miljøkvalitetskravene bliver opfyldt. Muligheden for en kombineret metode som dækker både områder med overholdt miljøkvalitetskrav og områder med overskridelse af miljøkvalitetskrav fremgår ikke af opgavebestillingen fra MST, men bør kunne indgå som en mulig løsning. Denne metode kan ligeledes give et øget incitament til at indsamle tilstrækkelig mange prøver for at opnå en vis sikkerhed.

MST har desuden ønsket en vurdering af, om en målbar koncentrationsstigning skal defineres ud fra antal betydende cifre, som anvendes af laboratoriet for overvågningsresultaterne. Dette princip indgår for nuværende i miljøkvalitetskravet (Miljøministeriet 2023b), hvor der først er overskridelse, såfremt denne er større end det sidste betydende ciffer i miljøkvalitetskravet (side 99 i retningslinjerne: "For eksempel er miljøkvalitetskravet for bly i sediment 163 mg/kg TS, og dette miljøkvalitetskrav betragtes dermed som overskredet, når den afrundede værdi for blykoncentrationen i sediment er 164 mg/kg TS eller derover"). Selvom præcisionen på enkeltmålinger til en vis grad modsvarer antal betydende cifre i laboratorieresultaterne, så vil middelværdier for en 6-årig periode eller koncentrationsændringer mellem to perioder oftest være baseret på flere målinger og dermed have en bedre præcision end den angivet for enkeltmålinger i laboratoriet. Helt generelt medfører en sådan afrunding et informationstab, hvilket ikke er ønskværdigt for en statistisk vurdering. Ydermere vil afrunding til sidste betydende ciffer for koncentrationsændringer medføre en drift på samme måde som for fail-safe og benefit-of-doubt principperne, idet afrundingen repræsenterer en acceptabel margin (koncentrationsstigning) mellem perioder. Det kan derfor ikke anbefales at anvende afrundede værdier til vurdering af en eventuel koncentrationsstigning, såvel som for vurdering af overholdelse af miljøkvalitetskravet.

Ud fra et teoretisk synspunkt, så strider den af MST formulerede problemstilling imod en traditionel statistisk tilgang, hvor der ønskes tilstrækkelig sikkerhed for, at miljøkravet er overholdt. Denne tilgang sikrer en naturlig afbalancering mellem antallet af prøver, og hvor tæt middelniveauet er på miljøkvalitetsmålet. Det medfører, at der skal tages flere prøver, når middelniveauet er på grænseværdien for at kunne dokumentere, at grænseværdien er overholdt. MST forudsætter i opgaveformuleringen, at grænseværdien allerede er overskredet og ønsker at beregne en sandsynlighed for at en merudledning ikke vil medføre en målbar koncentrationsstigning. I princippet vil en merudledning altid medføre en koncentrationsstigning, såfremt punktkildekoncentrationen er større end baggrundskoncentrationen. På baggrund af nærværende notats gennemgang af de statistiske principper kan opgaveformuleringen fortolkes som, hvor lidt skal der måles eller hvor lille påvirkningsfaktor skal man have (dvs. placering af repræsentativt målepunkt) for at mindske sandsynligheden for at detektere en reel koncentrationsøgning. Opgaveformuleringen burde nok have taget udgangspunkt i, hvordan sikres tilstrækkelig sandsynlighed for at detektere en reel koncentrationsøgning, hvilket svarer til en styrkeberegning indenfor traditionel statistik.

Dette notat beskriver en generel metode til beregning af sandsynligheder for henholdsvis målbar eller ikke-målbar koncentrationsøgning fra en merudledning af et givent stof ud fra en række fastsatte parametre. Metoden er eksemplificeret ved total kvælstof (TN) og total fosfor (TP) i marine vandområder, men metoden kan overføres til andre stoffer (MFS), under antagelse af kendte

påvirkningsfaktorer, punktkilde- og baggrundskoncentrationer, prøvetagningsprogram og varianser for relevante usikkerhedskomponenter for koncentrationsmålingerne i vandfasen af det givne stof. Miljøfarlige forurenende stoffer måles typisk med lavere frekvens end TN/TP, hvilket øger usikkerhed omkring bestemmelsen af en koncentrationsstigning. For nogle MFS kan målefrekvensen være så lav, at det kan være en udfordring at bestemme variationen på målingerne og dermed sandsynligheden for en ikke-målbar koncentrationsstigning. I sådanne tilfælde må der vælges en passende parameterisering for varianskomponenter til at beskrive variationen i baggrundskoncentrationen.

En udfordring er, at mange miljøfarlige forurenende stoffer ikke måles i vandfasen, men derimod i biota og sediment. Der vil derfor være behov for enten at etablere relationer, som kan omsætte koncentrationerne i disse matricer til vandfasen, hvorved en påvirkningsfaktor kan beregnes ved anvendelse af hydrodynamisk model, eller på anden vis estimere en påvirkningsfaktor (f), som kobler punktkilden direkte til en sediment- eller biotakoncentration for overvågningsstationen. Akkumulering over tid i sediment og biota kan dog gøre det vanskeligt at bestemme en sådan påvirkningsfaktor, som kan anvendes til at vurdere en potentiel ændring mellem to perioder. Ydermere er der behov for at undersøge, hvilke normaliseringsfaktorer, som kan anvendes til at reducere den tilfældige variation i disse målinger (svarende til sæson og salinitet for TN og TP). Sådanne analyser vil medføre en bedre parameterisering af den præsenterede metode.

6 Konklusion

I dette notat er der udviklet en statistisk metodik til vurdering af den potentielle effekt af en merudledning fra punktkilde på en repræsentativ målestation. Metoden finder anvendelse på stoffer målt i vandfasen, hvorimod koblingen til målinger i sediment og biota kræver, at der etableres en robust sammenhæng, som kan bruges til at omsætte disse målinger til forventede koncentrationer i vandfasen. Med baggrund i de statistiske analyser og diskussionen i foregående afsnit konkluderes:

- Tilstanden for koncentrationen af et givent stof i forhold til fastsatte kravværdier bør vurderes ud fra fail-safe princippet, hvor usikkerheden kommer miljøet til gode. Dette princip følger et miljømæssigt forsigtighedsprincip og anbefalinger fra OSPAR.
- Sandsynligheden for ændring over tid af et givent stof bør generelt vurderes ud fra face-value princippet, men det anbefales at anvende fail-safe princippet, hvis miljøkvalitetskravet allerede er overskredet. Fail-safe princippet indeholder en forventning om et koncentrationsfald, som vil medvirke til, at miljøkvalitetskravet over tid bliver opnået i det tilfælde, at det er overskredet.
- Det repræsentative målepunkt bør placeres på en lokation i vandområdet, som er mest følsom overfor udledninger fra punktkilden (jvnf. CIS #7) for at opnå størst sandsynlighed for at kunne detektere en reel merudledning. Placering af det repræsentative målepunkt i et område med en påvirkningsfaktor på mindst 0.01 vil sikre en rimelig sandsynlighed for at vurdere miljøeffekten af punktkildeudledningen (i forhold til miljøkvalitetskravværdier for kronisk og akut effekt såvel som ændringer over tid).
- Det frarådes at anvende afrundede værdier til vurdering af en eventuel koncentrationsstigning, såvel som for vurdering af overholdelse af miljøkvalitetskravet. Afrunding af resultater er ikke fagligt velbegrunder og medfører et direkte informationstab.
- Den statistiske problemstilling bør tage udgangspunkt i, at miljøkvalitetskravet skal være overholdt, og at dette skal vurderes med tilstrækkelig sikkerhed (konfidens). En sådan problemformulering sikrer tilpas balance mellem punktkildepåvirkning og overvågning, således at der indsamles flere prøver med stigende risiko for at overskride miljøkvalitetskravet.

Referencer

Carstensen, J. (2007) Statistical principles for ecological status classification of Water Framework Directive monitoring data. *Marine Pollution Bulletin* 55: 3-15. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2006.08.016>

Carstensen, J., Lindegarth, M. (2016) Confidence in ecological indicators: A framework for quantifying uncertainty components from monitoring data. *Ecological Indicators* 67: 306-317. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ecolind.2016.03.002>

Carstensen, J., Lindegarth, M. (under udarbejdelse) Getting the errors right: The importance of partitioning sources of uncertainty for ecological indicators. *Ecological Indicators*.

Cochran, W.G., 1977. *Sampling Techniques*. Wiley, New York.

European Commission (2003). Monitoring under the Water Framework Directive. Guidance Document No. 7. Implementation strategy for the Water Framework Directive (2000/60/EC). [https://circabc.europa.eu/sd/a/63f7715f-0f45-4955-b7cb-58ca305e42a8/Guidance%20No%207%20-%20Monitoring%20\(WG%202.7\).pdf](https://circabc.europa.eu/sd/a/63f7715f-0f45-4955-b7cb-58ca305e42a8/Guidance%20No%207%20-%20Monitoring%20(WG%202.7).pdf)

Larsen, M. M., Strand, J., Tairova, Z., Göke, C. (2023). Vurdering af tilstanden i danske havområder for Havstrategi D8. Aarhus Universitet, DCE – Nationalt Center for Miljø og Energi, 85 s. - Teknisk rapport Nr. 286. https://dce.au.dk/fileadmin/dce.au.dk/Udgivelser/Tekniske_rapporter_250-299/TR286.pdf

Miljøministeriet (2023a) BEK nr 529 af 14/05/2023. Bekendtgørelse om kvalitetskrav til miljømålinger. <https://www.retsinformation.dk/eli/lta/2023/529>

Miljøministeriet (2023b) Retningslinjer for udarbejdelse af vandområdeplanerne 2021-2027. Intern arbejdsinstruks. ISBN: 978-87-91824-04-3

Miljøministeriet (2024) Vejledning til bekendtgørelse om krav til udledning af visse forurenende stoffer til overfladevand og havområder med ofte stillede spørgsmål og svar, offentliggjort 11. marts 2024. Opslag maj 2024. <https://mst.dk/erhverv/rent-miljoe-og-sikker-forsyning/spildevand/miljoefremmede-og-forurenende-stoffer#>

OSPAR (2023a) OSPAR Assessment Portal <https://oap.ospar.org/en/ospar-assessments/quality-status-reports/qsr-2023/>

OSPAR (2023b) Status and Trend for Heavy Metals (Mercury, Cadmium and Lead) in Fish, Shellfish and Sediment. <https://oap.ospar.org/en/ospar-assessments/quality-status-reports/qsr-2023/indicator-assessments/heavy-metals-biota-sediment/>