

Stoftransportberegning

Et overblik over hyppigt anvendte metoder

Fagligt notat fra DCE – Nationalt Center for Miljø og Energi

Dato: 3. februar 2025 | 08



AARHUS
UNIVERSITET

DCE – NATIONALT CENTER FOR MILJØ OG ENERGI

Fagligt notat fra DCE – Nationalt Center for Miljø og Energi

Kategori: Rådgivningsnotat

Titel: Stoftransportberegning – et overblik over hyppigt anvendte metoder

Forfatter(e): Søren E. Larsen
Institution(er): Institut for Ecoscience, Aarhus Universitet

Faglig kommentering: Niels Bering Ovesen
Kvalitetssikring, DCE: Lars M. Svendsen
Sproglig kvalitetssikring: Anne Mette Poulsen

Ekstern kommentering: Styrelsen for Grøn Arealomlægning og Vandmiljø. [Kommentarerne findes her.](#)

Rekvirent: Styrelsen for Grøn Arealomlægning og Vandmiljø

Bedes citeret: Søren E. Larsen. 2025. Stoftransportberegning – et overblik over hyppigt anvendte metoder. Aarhus Universitet, DCE – Nationalt Center for Miljø og Energi, 13 s. -- Fagligt notat nr. 2025|08

Gengivelse tilladt med tydelig kildeangivelse

Foto forside: Colorbox

Sideantal: 13

Indhold

1	Baggrund	4
2	Indledning	5
3	Metoder	6
	Sampling af data	6
4	Vandføringsdata	8
5	Estimering af koncentrationer	9
6	Metodernes styrker og svagheder	11
7	Diskussion	12
8	Referencer	13

1 Baggrund

Styrelsen for Grøn Arealomlægning og Vandmiljø (SGAV) har ønsket et overblik over de hyppigst anvendte og nyere metoder til estimering af vandkemiske koncentrationer i vandløb imellem målte værdier, og som indgår i stoftransportberegninger.

Dette notat giver sammen med notatet Thodsen et al. (2024) et overblik over den metode, der anvendes til stoftransport beregning i OverfladevandsData-basen (ODA) drevet af Aarhus Universitet. I Thodsen et al. (2024) er der desuden en detaljeret beskrivelse af interpolationsmetoden "C-lineær" samt en introduktion til metoder anbefalet af HELCOM/OSPAR.

2 Indledning

Beregning af stoftransporten i et vandløb over et givet tidsrum er en vigtig komponent i miljøovervågningen og som grundlag for opgørelse af f.eks. næringsstofftilførsler til havet. Publikationen af videnskabelige artikler og rapporter om emnet tog for alvor fart sidst i 1970'erne, og var på sit højeste i 1980'erne og ikke mindst i 1990'erne. Artikler om emnet har været publiceret kontinuerligt siden, men i et mindre omfang, og udviklingen af nye typer af metoder har været begrænset. De publicerede artikler samt et stort antal notater og rapporter siden 1970'erne omhandler metodeudvikling, metodesammenligning og oplandsstudier samt studier af udviklingstendenser i transporten af næringsstoffer og sediment.

Notatet indeholder følgende afsnit: Metoder, der kort angiver, hvilke type af metoder der anvendes hyppigt samt nogle få nyere metoder, og det indeholder yderligere korte beskrivelser af sampling af data, der anvendes til stoftransport beregninger samt oparbejdning af vandføringsdata til brug i opgørelsen af stoftransporten. Derefter følger et afsnit, der beskriver forskellige metoder til estimering af stofkoncentrationer og deres egenskaber. Til sidst i notatet er der en diskussion samt en liste med referencer.

3 Metoder

Beregning eller estimering af transporten af f.eks. næringsstoffer i et vandløb handler om at være i stand til at beregne et såkaldt bestemt integrale, som er et integrale med kendte og faste grænser for integrationen. Et bestemt integrale giver som resultat et tal. Integration er en del af emnet infinitesimalregning i matematik og kan anskues som en generalisering af summering. Et ubestemt integrale (giver som resultat en funktion, nemlig stamfunktionen) kan opfattes som en uendelig sum af infinitesimale (uendelig små) komponenter, men i estimeringen af stoftransport udnytter man, at et bestemt integrale kan approksimeres ved en sum af endeligt mange komponenter.

Hvor god approksimationen er afhænger af flere ting, bl.a.

- Sampling strategien for vandføring og stofkoncentrationer.
- Metoden til estimering af vandføring og stofkoncentrationer for umålte tidspunkter.
- Længden af tidsrummet for stoftransporten.

Dette notat vil udelukkende beskæftige sig med metoder til estimering af koncentrationer for tidspunkter, hvor der ikke foreligger målte koncentrationseværdier. Metoderne kan grupperes i fem forskellige hovedtyper, og i hver type eksisterer der et antal metoder, som er indbyrdes forskellige, men kan opfattes som variationer af typen. De fem hovedtyper er

- Ratiometoden.
- Interpolationsmetoder.
- Regressionsmetoder - rating curves.
- Smoothing teknikker.
- Surrogat regression.

I næste afsnit gives der en kort beskrivelse af disse metoder, og der omtales egenskaber og krav til metoderne. Men først ganske kort om sampling af data og lidt om oparbejdning af vandføringer.

Sampling af data

I stoftransportberegningen anvendes vandføringen og stofkoncentration. En vigtig egenskab, som ønskes ved stoftransportberegningen er at beregningen giver en værdi, som kan betragtes som værende uden bias, det vil sige giver et centralt estimat, som dermed hverken er systematisk for lavt eller for højt. Forudsætningen for det er at indsamlingen/målingen af dels vandføringer og koncentrationer er uden bias. En repræsentativ sampling uden bias kræver, at alle mulige data har eksakt samme sandsynlighed for at blive samlet i forhold til den strategi man har valgt. Dette er ikke tilfældet, da man fx typisk ikke måler hverken vandføringer og koncentrationer i løbet af weekender eller uden for normal arbejdstid på hverdage. Dette giver anledning til at man teoretisk vil omtale denne form for sampling strategi for biased. Der skal desuden gælde, at både koncentrations- og vandføringsmålinger repræsenterer hele vandløbets tværsnit samt den horisontale profil med velopblandede forhold.

Som regel har man vandføringsværdier med en høj frekvens, hvorimod koncentrationer er målt med lav frekvens. Dog skal man bemærke, at en ægte måling af vandføringen ligeledes ofte er med lav frekvens, og det er vandstanden som forefindes højfrekvent. De højfrekvente vandføringer opnås ofte ved anvendelse af en relations beregning mellem vandstand (H) og vandføring (Q) (QH-relation).

Man kan betragte vandstandsmålinger som værende en tilnærmelsesvis unbiased sampling med målinger hvert 5., 10. eller 15. minut. Ligeledes kan man betragte tidsproportionalt puljede vandprøver (fx time indsamling) som værende tilnærmelsesvis unbiased, stadigvæk hvis de puljede prøver repræsenterer tværsnittet og velopblandet forhold. Endelig bør sensormålinger omtales - de forekommer med høj frekvens, typisk hvert minut og kan betragtes som repræsentativ for en unbiased sampling i tid forudsat at sensoren programmeres således at den igangsættes på et tilfældigt valgt tidspunkt.

Men grundet, at man teoretisk set har en biased indsamling af data, så må man forvente, at stoftransporten i mere eller mindre grad er en biased beregning.

4 Vandføringsdata

Vandstandsmålinger anvendes til at estimere vandføringer således at disse også forefindes højfrekvent. Dette gøres ved at opstille en Q/H sammenhæng på basis af nogle få ægte vandføringsmålinger i et tværsnit af et vandløb over en given periode. Disse få målinger er typisk samlet i arbejdstiden på hverdage, og dermed biased. Derfor vil man teoretisk forvente at vandføringer oparbejdet til en højfrekvent serie er biased uanset om måleapparat og Q/H metoden giver unbiased værdier.

Notatet vil ikke komme nærmere ind på hvordan Q/H metoden etableres og udføres, men det skal bemærkes, at det som regel kræver en manuel procedure, hvor relationen kontrolleres og evt. justeres af en specialist, se Ovesen og Poulsen (2016).

5 Estimering af koncentrationer

I dette afsnit gives en kort og ikke detaljeret gennemgang af metodetyperne listet op i foregående afsnit. Gennemgangen vil have fokus på egenskaber ved metoderne samt beskrive hvilke datakrav metoderne har, og ikke selve de matematiske beskrivelser af metoderne. I den videnskabelige artikel (Kronvang og Bruhn, 1996) er de fleste af de ældre metoder beskrevet i detaljeret grad.

Ratiometoden, og en variant (Beale metoden), som er blevet anvendt i situationer, hvor man har betydeligt flere vandføringsmålinger end koncentrationsmålinger, og er beskrevet i Beale (1962) og Cohn (1995). Beale's metode korregerer den bias der normalt er ved at anvende ratio metoden. Ratio metoden antager, at der er en konstant ratio mellem koncentration og vandføring, og er basalt set en empirisk metode. Men metoden har ingen statistisk eller teoretisk fundament, men baseres udelukkende på indsamlet data.

Interpolationsmetoder (Kronvang og Bruhn, 1996) har ligeledes været anvendt en del (herunder i NOVANA, HELCOM og OSPAR), og det er metoder, som ikke afhænger af statistiske modeller og estimeringen af disse. Interpolationsmetoder betragtes som de mest simple sammen med ratiometoden, og den består i at trække en ret linje mellem de observerede koncentrationer og anvende linjens værdier for tidspunkter (typisk døgnværdier) mellem prøvetagninger. Metoden er empirisk funderet men uden nogen form for teoretisk og statistisk baggrund, man antager, at stofkoncentrationerne ikke er afhængige af fx vandføringsværdierne, men kun af de to koncentrationsmålinger, man interpolere over og hvor lang tid man interpolere over. Normalt er næringsstofkoncentrationer relateret til størrelsen af vandføringen, men denne statistiske viden gør man ikke brug af ved prædiktionen af koncentrationer på tidspunkter hvor der ikke er foretaget en måling. I NOVANA programmet anvendes interpolation og går under navnet C-lineær. Trapez metoden (se Kronvang og Bruhn, 1996) kan betragtes som en afart af interpolationsmetoden.

Regressionsmetoderne (rating curves) er uden tvivl de metoder, som har haft den største udbredelse og anvendelse i særdeleshed i USA og med store variationer i, hvordan regressionerne er defineret. Det er ligeledes de metoder, hvor man har set den største fremdrift i udviklingen. Man antager en sammenhæng mellem logaritmetransformerede værdier af både koncentration og vandføring. Sammenhængen kan være mere eller mindre kompleks med flere forklarende variable. Regressions metoderne er ligeledes empiriske og har ofte en teoretisk berettigelse, for eksempel for suspenderet stof ved store vandføringer som betyder en større erosion og dermed større koncentrationer af suspenderet stof, men man skal have hysteresse effekter med i ligningen. En særlig ofte anvendt regressionsligning kan findes i Cohn et al. (1992). Ligningen indeholder i alt 7 parametre, som relaterer sig til vandføring, tid og sæson. Rating curves kan med fordel kombineres for en samling af nabo oplande eller for oplande med lignede karakteristikker (Yuan, 2022). Endvidere ser man nu også anvendelse af machine learning porteføljen til estimering af koncentrationer (Lek et al., 1999; Isles, 2024).

Smoothing teknikken (WRTDS) er beskrevet i Hirsch et al. (2010). En simplere smoothing metode kunne være at anvendes Lowess eller GAM teknikkerne (Hastie et al., 2008). I WRTDS metoden består smoothing i at anvende en vægtet regressionsanalyse, for detaljer se Hirsch et al. (2010). Smoothing teknikkerne (i princippet en form for beregning af glidende gennemsnit, det vil sige kurvefitning) anvendes til at opnå et bedre fit i sammenhængen mellem koncentrationer og vandføringer, end det er muligt med lineær regression. Og i WRTDS metoden inddrages flere forklarende variable i modellen, som beskriver sæsonvariation samt en eventuel tidslig udvikling i relationen mellem koncentrationer og vandføringer.

Surrogat regressions metoden er helt ny, og man kan se et eksempel i Robertson et al. (2018). Med de nye sensorteknikker er det muligt at opnå højfrekvente og omkostningslette koncentrationsmålinger for bl.a. nitrat og turbiditet (van't Veen et al., 2025). I denne metode er ideen at anvende en surrogatvariabel for det stof, man i virkeligheden er interesseret i, f.eks. nitrat for TN eller turbiditet for TP. Der er derfor behov for at statistisk modellere en god sammenhæng mellem TN og nitrat, for eksempel ved regression med anvendelse af indsamlet data over en årrække. Efter at sensorobservationerne er rensset og kvalitetssikret (van't Veen et al., 2025) og sammenhængen mellem nitrat og TN er etableret, kan højfrekvente TN koncentrationer estimeres ved anvendelse af de højfrekvente nitratkoncentrationer og stoftransporten kan efterfølgende beregnes.

6 Metodernes styrker og svagheder

Metodernes anvendelighed afhænger af hvilken type data, man har til rådighed samt af koncentrationsmålingernes fordelingsmæssige karakteristik. De har hver især styrker og svagheder, især med hensyn til samplingfrekvensen af data. Her er nogle få kommentarer med hensyn til styrker og svagheder (i kommentarerne omtales usikkerhed/sikkerhed – dette skal opfattes som summen af bias og præcision, hvor bias er en systematisk over- eller underestimering, og præcisionen er standardafvigelsen på estimeringerne):

- Ratio metoden: Effektiv med hensyn til bias, men kan, i teorien, være upræcis, altså meget varierende estimater. Men metoden kræver mere end 500 observationer i alt over 10 år for at være tæt på unbiased, og er derfor sampling tung. Ligeledes bør man huske på, at en antagelse ved metoden er, at rationen mellem koncentration og vandføring er konstant over tid.
- Regressions metoder: Kan have en betydelig bias (men er præcis), hvis man ikke er omhyggelig (her tænkes især på prædiktions af koncentrationer ved anvendelse af modellen), men kan anvendes ved ca. 150 observationer i alt over en 10-årig periode. Metoderne kan udbygges med sæsonvariation samt en tidlig udvikling i sammenhængen. Men der er et arbejde med at fitte modellerne, og det kan ikke overlades til en automatisk procedure.
- Interpolationsmetoder: Er med sikkerhed effektive (både med hensyn til bias og præcision), når man har mange observationer, helst mere end 2000 observationer i alt over 10 år. Det er altså en sampling tung metode, hvis man ønsker rigtigt gode resultater. Metoden må betragtes som ikke særlig effektiv med hensyn til bias, hvis der er store mellemrum mellem observationer, og hvis der er storm events, som falder mellem prøvetagninger. Derfor må man forvente, at hvis man er uheldig, så kan man være langt væk fra den sande værdi, eller hvis man er heldig med sin sampling, tæt på den sande værdi. Det er risikoen ved ikke at udvikle en model, som beskriver sammenhængen mellem vandføring og koncentration og efterfølgende ikke anvende modellen. Så metoden er bedst at anvende, hvis man har relativ kort tid mellem koncentrationsmålingerne og i vandløb med langsomme ændringer i koncentrationer og vandføringer.
- Smoothing og WRTDS: God performance med hensyn til bias og præcision, men kræver mere end 200 observationer i alt per 10 år. Der er et statistisk analyse arbejde med at fitte modellerne og estimere koncentrationerne. Disse teknikker kan udbygges med en trend over tid i sammenhængen mellem vandføring og koncentration.
- Surrogat regression: Er en effektiv metode (med hensyn til bias og præcision) for datasæt, som er af moderat størrelse, det vil sige ca. 150 observationer i alt over 10 år, men der skal være en god sammenhæng mellem surrogatvariablen og den variabel der estimeres via surrogatvariablen.

Som det bemærkes, så omtales der perioder af 10 år varighed under de forskellige metoder. Det er for at sammenligne metodernes databehov. I princippet kan man nøjes med data fra perioden, hvor der skal beregnes stoftransport, til interpolation, fordi denne metode ikke anvender en statistisk model. Så her vil der være tale om et behov for 200 prøvetagninger i løbet af et kalenderår, for at få et meget præcist stoftransport estimat for det givne kalenderår. Det samme er gældende for ratiometoden. Men man må forvente, at etablering af gode rating curves vil kræve data over en årrække for at modvirke uheldige effekter af fx vejrmæssige variationer.

7 Diskussion

I dette notat er præsenteret en række metoder til beregning af stoftransport i et vandløb. Nogle af metoderne repræsenterer nye teknikker, andre ældre, som alle har været anvendt i større eller mindre grad over tid. Notatet går ikke i dybden med de matematiske definitioner af metoderne, men beskriver styrker og svagheder af metoderne.

I NOVANA programmet anvendes udelukkende lineær interpolation (C-lineær metoden) til stoftransportberegning. Denne metode er simpel at anvende, kræver ikke nogen statistisk analyse og testning, og den kan således køres automatisk når data er kvalitetssikret i databasen. Dette er metodens store fordel. Ulempen er, at stoftransporten kan i nogle enkelte få tilfælde være meget over- eller underestimeret, hvis man er uheldig med de dage, hvor der tages vandprøver. På den anden side kan man også ramme tæt på den sande stoftransport, hvis prøvetagningen blev optimal med hensyn til at ramme koncentrationsniveauet for den pågældende periode. Men usikkerheden kan være stor, især hvis der kun foreligger få koncentrationsmålinger per år og/eller er store variationer i de målte koncentrationer i løbet af et år. Men det er et generelt problem for estimering af stoftransport, at man ikke har nogen mulighed for at vide hvad den sande stoftransport er, idet man kun har relativt få koncentrationsmålinger i diskret tid, hvorimod selve transportprocessen foregår i kontinuert tid.

Siden de første rating curve metoder så dagens lys i 1970'erne er der udviklet nye regressionsmetoder (fx weigthed regression) samt smoothing og machine learning som kan estimere sammenhængen mellem vandføring og stofkoncentration, hvis standard regression ikke kan estimere sammenhængen på effektiv vis. Disse metoder kan dermed give et mere sikkert estimat for stoftransporten.

Det kunne derfor være hensigtsmæssigt at undersøge, på baggrund af dette notats betragtninger, om nogle af de mere komplicerede metoder sammenlignet med lineær interpolation, kan bidrage til forbedret beregning af stoftransport. Til dette kan foreslås et projekt, som undersøger en række af de omtalte metoder sammen med lineær interpolation i en række forskellige typer af vandløb (store og små, stabil eller stærkt varierende vandføring), for herved at kunne vurdere metodernes resultater over for hinanden, samt for at vurdere metodernes krav til ressourcer.

8 Referencer

Beale, E. M. L. (1962) Some uses of computers in operational research. *Industrielle Organisation* 31(1), 27-28.

Cohn, T. A. (1995) Recent advances in statistical methods for the estimation of sediment and nutrient transport in rivers. *Reviews of Geophysics, Supplement*, 1117-1123.

Cohn, T. A., Caulder, D. L., Gilroy, E. J., Zynjuk, L. D. og Summers, R. M. (1992) The validity of a simple statistical model for estimating fluvial constituent loads: an empirical study involving nutrient loads in Chesapeake Bay. *Water Resour. Res.* 28 (9), 2353-2363.

Hastie, T., Tibshirani, R. og Freidman, J. (2008) *The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference and Predication*. Springer.

Hirsch, R. M., Moyer, D. L. og Archfield, S.A. (2010) Weighted Regressions on Time, Discharge, and Season (WRTDS), with an Application to Chesapeake Bay River Inputs1. *JAWRA J. Am. Water Resour. Assoc.* 46, 857-880.

Isles, P. D. F. (2024) A random forest approach to improve estimates of tributary nutrient loading, *Water Research*, Volume 248, 1-15.

Lek, S., Guiresse, M. og Giraudel, J-L. (1999) Predicting stream nitrogen concentration from watershed features using neural networks. *Water Research*, Volume 33, 3469-3478.

Ovesen, N. B. og Poulsen, J. R. (2016) *Hydrometriske stationer, databehandling og beregninger*,

QH-station. Teknisk anvisning B05. DCE-Nationalt center for miljø og energi, Aarhus Universitet.

Robertson, D. M., Hubbard, L. E., Lorenz, D. L. og Sullivan, D. J. (2018) A surrogate regression approach for computing continuous loads for the tributary nutrient and sediment monitoring program on the Great Lakes, *Journal of Great Lakes Research*, Volume 44, Issue 1, 26-42.

Yuan, L. L. (2022) Improving estimates of phosphorus loads using hierarchical models. *J. Hydrol (Amst)*., 614, 1-8.

Thodsen H., Erfurt J., Tornbjerg H., Larsen S. E., Rosenkrantz Conradsen A. (2024) *Beskrivelse af stoftransportberegning*. Aarhus Universitet, DCE - Nationalt Center for Miljø og Energi, - Fagligt notat nr. 77.

van't Veen, S. G. M., Kronvang, B., Audet, J., Davidson, T.A., Jeppesen, E., Kristensen, E. A., Larsen, S. E., Laugesen, J. R., Levi, E. E., Nielsen, A. og Andersen, P. M. (2024) *SentemQC - A novel and cost-efficient method for quality assurance and quality control of high-resolution frequency sensor data in fresh waters* (in review at *Open Research Europe Journal*).

van't Veen, S. G. M., Larsen, S. E., Andersen, P. M., Kristensen, E. A., Laugesen, J. R., Ovesen, N. B. og Kronvang, B. (2025, in progress) *Uncertainty in nitrate load calculations evaluated using Monte Carlo simulations based on in situ nitrate sensors in two headwater Danish streams*.