



VÆRKTØJ TIL HÅNDBLING OG BEHANDLING AF DATA FOR MILJØFARLIGE FORURENENDE STOFFER

Teknisk rapport fra DCE – Nationalt Center for Miljø og Energi

nr. 127

2018



AARHUS
UNIVERSITET

DCE – NATIONALT CENTER FOR MILJØ OG ENERGI

[Tom side]

VÆRKTØJ TIL HÅNDTERING OG BEHANDLING AF DATA FOR MILJØFARLIGE FORURENENDE STOFFER

Teknisk rapport fra DCE – Nationalt Center for Miljø og Energi

nr. 127

2018

Martin M. Larsen
Jakob Strand

Aarhus Universitet, Institut for Bioscience



AARHUS
UNIVERSITET

DCE – NATIONALT CENTER FOR MILJØ OG ENERGI

Datablad

Serietitel og nummer:	Teknisk rapport fra DCE - Nationalt Center for Miljø og Energi nr. 127
Titel:	Værktøj til håndtering og behandling af data for miljøfarlige forurenende stoffer
Forfattere:	Martin M. Larsen & Jakob Strand
Institution:	Aarhus Universitet, Institut for Bioscience
Udgiver:	Aarhus Universitet, DCE – Nationalt Center for Miljø og Energi ©
URL:	http://dce.au.dk
Udgivelsesår:	2018
Redaktion afsluttet:	Oktober 2018
Faglig kommentering:	Pia Lassen
Kvalitetssikring, DCE:	Susanne Boutrup
Finansiel støtte:	Miljøstyrelsen
Bedes citeret:	Larsen, M.M. & Strand, J. 2018. Værktøj til håndtering og behandling af data for miljøfarlige forurenende stoffer. Aarhus Universitet, DCE – Nationalt Center for Miljø og Energi, 42 s. - Teknisk rapport nr. 127 http://dce2.au.dk/pub/TR127.pdf
	Gengivelse tilladt med tydelig kildeangivelse
Sammenfatning:	Der er udviklet 5 regneark til vurdering af data fra NOVANA overvågning af miljøfarlige forurenende stoffer. Data ekstraheres fra ODA til regnearkene eller indtastes direkte. Der foretages vurdering over for danske og EU-fastsatte miljøkvalitetskrav for ferskvand, ferskvands-biota og -sediment, og derudover OSPARs BAC baggrunds- og EAC/ERL miljøkriterier for marint biota og sediment. Alle data normaliseres og omregnes til de korrekte enheder i regnearkene. Alle omregninger er beskrevet i rapporten.
Emneord:	NOVANA, miljøkvalitetskrav, EQS, BAC, EAC, ERL, Trofisk niveau, omregning
Layout:	Grafisk Værksted, AU Silkeborg
Foto forside:	Martin M. Larsen: Hove Å udløb i Roskilde Fjord
ISBN:	978-87-7156-362-7
ISSN (elektronisk):	2244-999X
Sideantal:	42
Internetversion:	Rapporten er tilgængelig i elektronisk format (pdf) som http://dce2.au.dk/pub/TR127.pdf

Indhold

1. Baggrund	5
2. Vurderingskrav og kriterierne	6
2.1 EU fastsatte miljøkvalitetskrav (EQS)	6
2.2 Nationalt fastsatte miljøkvalitetskrav	8
2.3 OSPAR vurderingskriterier (BAC, EAC, ERL)	10
3. Dataomregninger	11
3.1 Omregning for tørstof/vådvægt i fersk- og marin biota	11
3.2 Omregning for lipid i fersk- og marin biota	12
3.3 Omregning for fødekæde niveau i fersk- og marin biota	13
3.4 Omregning for vands hårdhed (Cd og Zn i ferskvand)	13
3.5 Omregning for tørstof/vådvægt for fersk- og marint sediment	14
3.6 Omregning for organisk indhold (TOC) for fersk- og marint sediment	14
3.7 Omregning for ler-silt proxy (Al/Li) for marint sediment	14
4. Regnearkene	16
4.1 Matricer	16
4.2 Indlægning af data i "Hent data"	16
4.3 Beregninger udført i "Dataomregning"	18
4.4 Øvrige hjælpe faneblade i regnearket	22
4.5 Anvendelse af kriterier	26
4.6 Videre anvendelse af ratio data	35
4.7 Nogle bemærkninger til kriterierne	35
5. Referencer	36
6. Appendiks	38
6.1 Eksempel regneark	38
6.2 Korrelation af metaller i sediment	39
6.3 OSPAR normaliserings grundlag for sedimenter	41

[Tom side]

1. Baggrund

For Miljøstyrelsen er der udviklet et værktøj til håndtering og behandling af data fra overvågning af miljøfarlige forurenende stoffer i overfladevand. Værktøjet er udviklet i et projekt, hvor formålet er at beskrive de konkrete beregningsmetoder (primært normaliseringer og simpel statistik med pivot-tabeller), som udføres, før de målte koncentrationsniveauer sammenholdes med miljøkvalitetskrav med henblik på vurdering af tilstand i vandområderne. Dette er beskrevet i denne rapport.

Beregningsværktøjet er sat op til at anvende dataudtræk fra overfladevands-databasen (ODA). Værktøjet normaliserer og omregner data til samme enhed, som er anvendt for de fastsatte miljøkvalitetskrav eller alternative vurderingskriterier for de enkelte stoffer. Resultaterne sammenholdes med EU-fastsatte og nationalt fastsatte miljøkvalitetskrav (EQS hhv. MKK) eller vurderingskriterier fra Oslo-Paris konventioner for Nordsøen (OSPAR baggrundsassessment kriterier (BAC), miljøassessment kriterier (EAC), Canadiske Effect Range Low (ERL) sediment kriterier).

Værktøjet består af fem regneark (ferskvand, biota i ferskvand, sediment fra ferskvand, marint biota og marint sediment), hvor det er muligt at tilføje yderligere miljøkvalitetskrav eller vurderingskriterier, og lave simpel statistik (middelværdi og maksimumsværdier) inden for vandområder. De enkelte regneark omfatter de forskellige matricer (biota, vand, sediment) samt de forskellige medier fersk og marin. Pga. forskelle i den måde data er lagret i ODA og dermed kan trækkes ud fra ODA på, er det nødvendigt med separate regneark til håndtering af marine og ferske overvågningsresultater.

2. Vurderingskrav og kriterierne

I dette kapitel introduceres de forskellige kvalitetskrav, herunder hvordan de er fremkommet og hvordan de kan anvendes. Dette er grundlaget for beregningerne i regnearkene. Der lægges størst vægt på EU-fastsatte og danske miljøkvalitetskrav, men for den marine overvågning er der en lang historik med anvendelsen af OSPAR kriterier i NOVANA-rapporterne "Marine områder" (seneste Larsen og Strand, 2016), hvorfor disse også er inkluderet i værktøjet.

2.1 EU fastsatte miljøkvalitetskrav (EQS)

Der blev i 2008 med direktiv om miljøkvalitetskrav (2008/105/EF) på EU-niveau fastsat en række miljøkvalitetskrav ("environmental quality standards", EQS) for vand og biota (fortrinsvis fisk og skaldyr). I direktiv om miljøkvalitetskrav indgik tre stoffer med miljøkvalitetskrav i biota som alternativ til miljøkvalitetskrav i vand, men i 2013 blev dette antal udvidet til 11 stoffer eller stofgrupper (direktiv om miljøkvalitetskrav som ændret med direktiv 2013/39/EU om prioriterede stoffer), heriblandt PAH'erne som samlet stofgruppe (nr 28). Direktiv om miljøkvalitetskrav er implementeret i dansk lovgivning hovedsageligt i bekendtgørelse om fastlæggelse af miljømål, bekendtgørelse om overvågning og bekendtgørelse om krav til udledning af visse forurenende stoffer. På rapport tidspunktet er den nyeste bekendtgørelse om fastlæggelse af miljømål for vandløb, søer, overgangsvande, kystvande og grundvand nr. 1625 af 19/12/2017, som trådte i kraft 1. januar 2018 (Miljø- og Fødevareministeriet, 2017). I denne bekendtgørelse indgår både nationale kvalitetskrav for vand (Del B, 1.) og biota/sediment (Del B, 2.) samt EU-fastsatte krav (Del B, 3.)

For vandfasen er miljøkvalitetskravene fastsat som henholdsvis generelle kvalitetskrav og maksimumkoncentrationer for henholdsvis indlandsvande (søer og vandløb) og andet overfladevand (havvand). De generelle kvalitetskrav udtrykker miljøkvalitetskravene som årsgennemsnit (i direktiv om miljøkvalitetskrav betegnet som annual average-EQS, AA-EQS). Middelværdien skal beregnes ud fra relevante prøver taget i løbet af året (for prioriterede stoffer som udgangspunkt 1 prøve pr. måned, jf. afsnit 1.3.4 i bilag V til vandrammedirektivet (2000/60/EF)). Maksimumkoncentrationen, MAC-EQS gælder for alle enkeltmålinger.

Menneskeskabte stoffer har som udgangspunkt baggrundsværdien "0", og for disse anvendes AA-EQS eller MAC-EQS grænserne direkte for vand. Tilsvarende gælder for miljøkvalitetskrav for biota og sediment. For enkelte metaller og metallignende forbindelser (fx arsen) er kvalitetskravet den i bekendtgørelsen anførte koncentration tilføjet den naturlige baggrundskoncentration. Derudover er der for nogle metaller anført, at kvalitetskravet gælder for den biotilgængelige fraktion, samt for zink og cadmium, at der skal tages hensyn hårdhed af ferskvand, som påvirker toxiciteten af de to metaller. Kvalitetskravene for metaller i vand gælder for den opløste fraktion (<0,45 µm filtrering), hvor de for alle øvrige stoffer gælder for det totale indhold (dvs. summen af både partikelbundet + opløst fraktion).

For persistente, bioakkumulerbare og toksiske stoffer (PBT) er EQS for koncentrationer i vand ikke altid tilstrækkelige til at beskytte topprædatorer eller mennesker. Disse stoffer er ofte organiske forbindelser med en høj affinitet for

organisk materiale (fx angivet ved fordelingskoefficienten mellem octanol og vand: K_{ow}), og derfor fjernes de fra vandfasen ved adsorption til partikler eller organiske stoffer i vandsøjlen, og målinger i vandfasen vil være misvisende eller vanskelige på grund af lavt koncentrationsniveau. Da stofferne opkoncentreres i biota, er det naturligt at etablere EQS værdier for biota for PBT stoffer (måles i NOVANA i biota typerne fisk og muslinger). Når EQS i biota fastsættes, sker det efter gennemgang af økotoxikologiske data, og med sikkerhedsfaktorer afhængig af vidensniveauet for det enkelte stof, som fastsat i afsnit 1.2.6 i bilag V til vandrammedirektivet og nærmere beskrevet i EU vejledning nr. 27 (EU 2011). Der udregnes både en $EQS_{sec\ pois}$ for "secondary poisoning" og en $EQS_{hh\ food}$ for humant optag gennem fødevarer. Disse sammenlignes med hinanden og med EQS for vandfasen via bioakkumulerings betragtninger, og hvis de biologiske EQS'er giver bedre beskyttelse end vandfase EQS'en, vælges den laveste af $EQS_{sec\ pois}$ og $EQS_{hh\ food}$ som gældende EQS (som fx for kviksølv). Anvendelsen af EQS_{biota} efter Guideline 27 er opdateret og efterfølgende beskrevet mere detaljeret i Guideline 32 (EU 2014), hvor det er blevet specificeret, at EQS_{biota} gælder for fisk, dog undtaget for PAH'er (se nedenfor). Endvidere skal EQS'en gælde for det næstøverste trofiske lag (TL), dvs. TL 4 i marine områder og TL 2 eller 3 i ferskvand (EU 2014, s 36). For PAH'er (som eksempel på et stof, der kan omsættes via stofskiftet i fisk) anbefales måling i muslinger og skaldyr på TL 2 for at sikre beskyttelse af topprædatorer, der spiser muslinger (fx dykænder og mennesker).

Målinger af stabile isotoper har vist, at topprædatorer ligger på TL 4,5 i ferskvand og 5,5 i marine områder (EU 2014), dvs. for at beskytte de højeste trofiske niveauer bør overvågning foretages i dyrearter på henholdsvis TL 3,5 i ferskvandsområder og 4,5 i marine områder. Men der udføres ikke stabile isotop målinger i den danske overvågning, og endvidere indeholder fødekæden i danske farvande ikke så mange prædatorer på TL 6 (fx spækhuggere), så DCE vurderer, at TL 3 i ferskvand og TL 4 i marint vand er relevante som næsthøjeste niveauer i danske farvande. For arter, der ikke tilhører det TL, som EQS'en er fastsat for, er guidelinens anbefalingen, at koncentrationen omregnes til det samme TL som EQS'en værdien er fastsat for. For muslinger, der typisk er på TL 2, skal koncentrationerne af fx kviksølv derfor omregnes til TL 4. TL korrektion for arten x, på trofisk niveau TL(x) med trofisk magnifikations faktor (TMF) for parameteren angiver guideline 32 beregningen udført som:

$$EQS_{biota, x} = EQS_{biota} / TMF^{(4-TL(x))} \quad (EU (2014) s. 65)$$

Hvis man i stedet vil anvende de eksisterende EQS værdier, kan man justere resultaterne fra overvågningen med den tilsvarende formel:

$$conc_{TL-adj} = conc_{meas} * TMF^{(4-TL(x))} \quad (EU (2014) s. 66)$$

Da det er sjældent, at der indgår stabile isotopbestemmelser i overvågningsprogrammerne, peger EU (2014, s 63) af pragmatiske grunde også på anvendelsen af lipid eller tørstof normalisering for fisk og muslinger. EU guiden anbefaler, at der anvendes faktisk målte lipid/tørstof koncentrationer frem for generiske data fra fx fishbase.org. I tilfælde af manglede data anbefaler guidelinen lipid normalisering til 5% for fisk og 1% for muslinger. Disse normaliseringer kan anvendes uafhængigt af, om data er for koncentrationsniveauer i prøver af muskeltvæv, lever eller hele organismen. Tørstof angives

som 26% for (hele) fisk, og for muslinger henvises til EU's myndighed for fødevarer sikkerhed, EFSA værdi på 8,3% tørstof, hvilket dog ikke er særlig repræsentativt for danske muslinger (som er noget nær det laveste, der findes i Østersøens små blåmuslinger) – for danske forhold er gennemsnittet næsten det dobbelte. For de generiske værdier (dvs. hvor der ikke findes konkrete målinger på den pågældende station eller vandområde) anvender regnearkene (i prioriteret rækkefølge) middelværdier for danske målinger, OSPAR fastlagte middelværdier eller fishbase/ekspert bedømte niveauer. Det fremgår af regnearket hvilken type generisk værdi, der anvendes. Normalisering af målte data til 5% lipid niveau (for fiskeart "x") foretages efter flg. formel:

$$\text{conc}_{\text{norm, lipid}} = \text{conc}_{\text{meas}} \cdot 0,05/\text{lipid content}_x \quad (\text{EU (2014) s. 62})$$

Hvis der tages hensyn til både trofisk niveau og lipid- eller tørstof normalisering er formlen:

$$\text{conc}_{\text{TL-adj, norm}} = \text{conc}_{\text{meas}} * \text{TMF}^{(4-\text{TL}(x))} * 0,05/\text{lipid content}_x \text{ (or } 0,26/\text{dry weight}_x)$$

Lipid normalisering anbefales kun til stoffer, der opkoncentreres i fedtvæv, uafhængigt af hvilken type væv, der er målt på. Eksempelvis er både PFOS og Hg specifikt nævnt som PBT stoffer, hvor dette ikke er tilfældet. Det betyder, at der for disse to stoffer kun kan anvendes trofisk niveau-normalisering. Der er i OSPAR regi gennemgået konsekvenserne af trofisk niveau normalisering for marine områder (OSPAR, 2016), og her er anvendt en TMF på 4,0 for muslinger, med variation ud fra fundne litteratur værdier for TMF mellem 3,5 og 4,7. Det betyder, at intervallet for EQS for kviksølv i fisk på 20 µg/kg ved konvertering til EQS for muslinger bliver mellem 0,9 og 1,6 µg/kg (dvs. $20/(4,7)^2$ hhv. $20/(3,5)^2$), når det antages, at muslinger ligger på trofisk niveau 2 og den justerede EQS værdi er $1,25 \pm 0,35$. Dermed er indholdet i stort set alle muslinger i OSPAR's område højere end EQS værdien, og der tilføjes en betydelig usikkerhed på godt 25% til vurderingen alene ud fra fastlæggelsen af TMF, hertil kommer usikkerheden på det faktiske TL niveau for arten, jf. afsnit 3.3.

En yderligere detalje, som behandles i et særskilt projekt (Larsen, 2018), er, at EQS værdien for kviksølv gælder for hele fisk, og ikke musklen (standard organ for NOVANA måling af kviksølv i fisk). Usikkerheden fra denne omregning er dog langt under usikkerheden ved omregning af trofisk niveau. En gennemgang af betydningen af trofisk niveau omregning for OSPARs data kan findes i OSPAR (2016). Ved anvendelse af lipid normaliserede data til trofisk niveau omregning skal der ikke omregnes til hel fisk, da dette er implicit i lipid normaliseringen.

2.2 Nationalt fastsatte miljøkvalitetskrav

Der er fastsat danske miljøkvalitetskrav (MKK) for overfladevand (indlandsvand og andet overfladevand) i bekendtgørelse om fastlæggelse af miljømål (Miljø- og Fødevareministeriet, 2017). For de fleste metaller gælder, at de fastsatte MKK *enten* er de anførte koncentrationer tilføjet den naturlige baggrundskoncentration *eller* gælder for den biotilgængelig fraktion.

Mulighed for at tilføje den naturlige baggrundskoncentration til MKK gælder ikke for tin og krom. For krom er der angivet både værdier for Cr(VI) og Cr(III). Cr(III) er den mindst giftige og den normalt forekommende kromforbindelse (tabel 1), men der er indtil 2017 kun målt på total Cr i NOVANA, så

den laveste værdi af de to anvendes som miljøkvalitetskrav. Muligheden for at tilføje den naturlige baggrundskoncentration til det fastsatte miljøkvalitetskrav gælder også for halvmetallerne arsen, bor samt ikke-metallerne brint-overilte og chloroform.

Generelt gælder MKK for biota i vådvægt af bløddele. EU vejledning nr 32 (EU, 2014) specificerer, at EQS'er generelt gælder fisk (undtagen PAH'er, der gælder i muslinger), hvis ikke andet er angivet, men medlemsstaterne kan fastsætte EQS'er for andre matricer end dem, der er nævnt i EU direktivet. I regnearkene er MKK'erne anvendt på både fisk og muslinger, hvor data findes.

MKK for vanadium, sølv og cadmium i sediment kan tillægges naturlige baggrundskoncentrationer, eller der kan for cadmium måles den biotilgængelige fraktion i sedimentet. For nogle organiske stoffer (nonyl- og ethylphenol, 1,2,4-triazol og TCPP) er MKK i sediment fastsat i forhold til den organiske fraktion i sedimentet, og der foretages i regnearkene normalisering til den organiske fraktion i sedimentet målt som TOC indhold.

Tabel 1. Oversigt over metaller og stoffer, hvor MKK kan tilføjes naturlig baggrundskoncentration (+). Ved – er værdien uafhængig af baggrundskoncentration.

Stof	AA-EQS	MAC-EQS	Bemærkning
Sb	-	-	Antimon (ingen baggrund tillagt)
As	+	+	Arsen. Kun for andet overfladevand (marint)
Ba	+	-	Barium kun for AA-EQS
B	+	+	Bor. Alternativ øvre grænse uden baggrund defineret for AA-EQS (note 6).
Cr	-	-	Cr (som Cr(III) og Cr(VI): ingen baggrund tillagt)
H ₂ O ₂	+	-	Brintoverilte Kun for AA-EQS
Co	+	-	Cobolt kun for AA-EQS
CH ₂ O	+	+	Formaldehyd
I	+	+	Iod
Cu	+	+	Kobber. Baggrund tillægges ikke hvis der måles biotilgængelige koncentration for AA-EQS i ferskvand (note 7). Alternativ øvre grænse uden baggrund defineret (note 6).
Mn	+	+	Mangan
Mo	+	-	Molybdæn. AA-EQS: ikke indlandsvand
Sr	+	+	Strontium. AA-EQS: ikke indlandsvand
Se	+	+	Selen
Ag	+	+	Sølv
Sn	-	-	Tin (ingen baggrund tillagt)
Th	+	+	Thallium
U	+	+	Uran
V	+	-	Vanadium
Zn	+	+	Zink, særligt kvalitetskrav for blødt vand (note 8). Baggrund tillægges ikke hvis der måles biotilgængelige koncentration i ferskvand (note 7).
Ni	\$		Nikkel. EU: biotilgængelige fraktion
Pb	\$		Bly. EU: biotilgængelige fraktion

\$: EU angivet som biotilgængelig fraktion, men der er ikke angivet metoder til at måle denne fraktion.

2.3 OSPAR vurderingskriterier (BAC, EAC, ERL)

Oprindeligt opstillede OSPAR vurderingskriterier for både vand, biota og sediment, men efter den første Quality Status Report fra Nordsøen i 1993 blev monitorering af miljøfarlige stoffer i vandsøjlen stort set indstillet (Tyskland har dog fortsat nogen monitorering af vandsøjlen), og vurderingskriterier er efterfølgende kun udviklet for biota og sediment. De første vurderingskriterier blev udviklet i 1996 (OSPAR, 1997), og omfattede baggrundskoncentrationer (BC) for især metaller og PAH'er. For stoffer, der ikke forekommer naturligt, men kun som menneskeskabte kemikalier (PCB'er, DDT og andre pesticider), er baggrundskoncentrationen pr. definition 0. Ved værdier tæt på baggrundsværdier betragtes området som ikke-forurenet af mennesker. For at muliggøre vurdering af, om målte stofkoncentrationer var skadelige for miljøet, blev der sideløbende udviklet økotoksikologiske vurderingskriterier (EAC). Disse baserede sig på en gennemgang af økotoksikologiske data fra litteraturen, og satte to grænser: EAC-low, hvorunder det var usandsynligt, der vil ske skade på økosystemet og EAC-high, hvorover det ikke kunne udelukkes, at der ville ske skader på økosystemet. De udviklede BC og EAC grænser blev anvendt i den første Quality Status Report 2000 (OSPAR, 2000).

Efterfølgende er der udviklet Background Assessment Criterie (BAC), som består af BC værdien + usikkerhed fra analyserne.

EAC værdierne blev opdateret i 2004 (OSPAR, 2004), og omdøbt til Environmental Assessment Criteria og er baseret på en tilgang, der ligger tæt op ad EU's tilgang ved fastlæggelse af EQS, men som dog ikke helt svarer til den (bl.a. forskellige sikkerhedsfaktorer). Siden har der været flere forsøg i OSPAR på, ved anvendelse af EU's EQS guidelines, at opdatere EAC'erne yderligere, men i mange tilfælde er koncentrationerne endt med at blive så lave, at de lå under BAC niveauerne og derfor er blevet forkastet.

Igennem de sidste år er de anvendte kriterier blevet strammet op, så kun kriterier, hvor oprindelsen er dokumenteret, bibeholdes. Der er anvendt kriterier, der indgår i OSPAR (2017) assessment report og præsenteret på webtoollet (<http://dome.ices.dk/OSPARMIME2017/main.html>) i regnearket.

3. Dataomregninger

Alle resultater omregnes i fanebladet "dataomregning", så de findes normaliseret til tørstof, vådvægt, lipidindhold og trofisk niveau. På vurderings-fanebladene anvendes den relevante værdi ud fra følgende: For vand parameter og prøvefraktion; for biota parameter og organ og for sediment parameter og normalisator, så den passer med definitionen af MKK/EQS eller OSPAR kriterium. Dette er beskrevet nærmere i afsnit 4.

Bemærk at data under detektionsgrænsen baseres på den rapporterede detektionsgrænse. Bekendtgørelse Nr. 833 af 27. juni 2016 og nr. 1001 af 29/06/2016 foreskriver, at man anvender den halve kvantifikationsgrænse ved beregning af middelværdier, hvis koncentrationen er lavere end kvantifikationsgrænsen (for vandområdeplanperioden 2015-2012 gælder dette jvnf. Bekendtgørelse 1001, bilag 3, del C, afsnit 1). Kvantifikationsgrænsen er defineret som 3x detektionsgrænsen (jf. analysebekendtgørelsen bek. 1146 (2017)). Generelt anbefaler analysekvalitetsbekendtgørelsen, at detektionsgrænse beregnes ud fra en kontrolprøve på lavt niveau, hvis det er muligt. Detektionsgrænsen beskriver en værdi, som med 95% sandsynlighed ikke er overskredet (3xstandard afvigelsen på blind), hvorimod kvantifikationsgrænsen ligger på et niveau, hvor analyseusikkerheden stort set kan angives som en expanderet relativ usikkerhed på maksimalt 30-50%. Problematikken omkring resultater under detektionsgrænsen kan håndteres på forskellige måder, se fx Larsen et al (2017), fra at sætte den til 0, hvis et stof aldrig er detekteret til den halve detektionsgrænse (eller som bek./EU den halve kvantifikationsgrænse, hvilket vil være 1,5x detektionsgrænsen).

Anvendelse af den rapporterede detektionsgrænse i nærværende beregninger vil dog give et rimeligt øvre bud på ratioen til MKK eller andre vurderingskriterier, medmindre alle resultater er under kvantifikationsgrænsen og dermed skulle have været erstattet med tal der er 1,5x detektionsgrænsen. For værdier over detektionsgrænsen vil de målte værdier altid være et bedre estimat end den halve kvantifikationsgrænse, og der findes ikke i databaserne nogle fastsættelser af kvantifikationsgrænser som kan anvendes til beregningerne efter EU og bekendtgørelsernes metode. Det betyder, at for resultater under kvantifikationsgrænsen kan der laves en fejl på op til 33% for lave værdier ved summering af enkelt stoffer, der skal summeres for at lave sammenligne med en sum af fx PCB'er. Da detektionsgrænserne i kvalitetsbekendtgørelsen er sat til mindst 10x under kvalitetskriterierne, hvor det er muligt er det kun et problem for summer af stofgrupper, og ikke for individuelle stoffer med en EQS/MKK defineret.

Beregningsformlerne anvendt for de enkelte omregninger i Excel er beskrevet i kapitel 4.3. Bemærk at der er anvendt en dansk Excel sprogversion, hvis regnearket læses ind i en engelsk Excel version vil de engelske formelnavne stå i regnearket, men resultaterne er selvfølgelig de samme.

3.1 Omregning for tørstof/vådvægt i fersk- og marin biota

For langt de fleste overvågningsdata er der data for samtidig måling af tørstof, dvs. der findes en parameter (TS%), som kan anvendes til at omregne mellem tørstof (TS) og vådvægt (VV):

$$[\text{mg/kg VV}] = [\text{mg/kg TS}] \times \text{TS\%}/100\%$$

Tørstof for muslinger ligger typisk mellem 8 og 25%, for fiskemuskel 20-25% og for fiskelever 10-50%.

For marine data har OSPAR på basis af data indrapporteret til ICES fastlagt en række middel/median tørstofværdier på arts- og organniveau. Disse er baseret på data fra hele Nordsøen og Nordatlanten. For danske marine områder har DCE tilsvarende beregnet en middel- og medianværdi baseret på de data, der er tilgængelige i ODA for miljøfarlige stoffer (MFS) i biota (dvs. ca. 2010-2016) for ferske fisk, marine fisk og muslinger.

Den anvendte tørstof står i en kolonne for sig, og anvendelsen er prioriteret som følger:

1. Faktisk målt værdi
2. Dansk middelværdi for art-organ kombination
3. OSPAR middelværdi for art-organ kombination
4. Estimat fra EU guideline 32

Default værdierne (pkt. 2 - 4 ovenfor) er opsummeret på et defaultomregnings-faneblad.

3.2 Omregning for lipid i fersk- og marin biota

Lipid indhold er rapporteret i ODA som Lipid% (bliver indført i ferskvandsbiota fremadrettet), og kan anvendes til at omregne mellem vådvægt (VV) og lipidvægt (LV):

$$[\text{mg/kg VV}] = [\text{mg/kg LV}] \times \text{Lipid\%}/100\%$$

Lipid måles som enten "ekstraherbart lipid" eller "dedikeret (total) lipid". Ekstraherbart lipid er lipidindholdet i det ekstrakt, der bruges til analyse for PCB'er. Dedikeret (total) lipid bestemmes på en delprøve beregnet til lipidbestemmelse, hvilket giver et mere "korrekt" lipidindhold, da mængden af ekstraherbart lipid kan afhænge af ekstraktionsmetoden for den pågældende stofgruppe. Forskellen mellem de to metoder er normalt <10%, og normalt vil der derfor ikke være et stort tab i præcision ved at anvende ekstraherbart i stedet for total lipid, men hvis der findes data for "totalt lipid" er det disse, der bør anvendes.

I de tilfælde, hvor der "kun" er målt ekstraherbart lipid, har der ofte været begrænset prøvemængde, og der har derfor ikke kunnet foretages bestemmelse af total lipid uden at gå væsentligt på kompromis med detektionsgrænser for de organiske målinger. I disse tilfælde må den ekstraherbare lipid siges at være direkte koblet til de kemiske analyser og derfor den korrekte at anvende. Problemet med manglende prøvemateriale er blevet minimeret med de puljede prøver, der anvendes i det nuværende marine NOVANA program, men frem til 2010 blev der målt på lever fra individuelle fisk, og dermed på prøver ned til 1 gram, som er mængden der anvendes til total lipid bestemmelse. I det ferske program er der frem til 2016 kun målt for Hg i muskel og uden lipidbestemmelse.

Den anvendte lipid står i en kolonne for sig, og anvendelsen er prioriteret som følger:

1. Faktisk målt værdi for total-lipid
2. Faktisk målt værdi for ekstraherbar lipid
3. Dansk middelværdi for art-organ kombination
4. OSPAR middelværdi for art-organ kombination
5. Standard tal fra EU guideline 32.

Default værdierne (pkt. 3 - 5 ovenfor) er opsummeret på et defaultomregnings-faneblad.

3.3 Omregning for fødekæde niveau i fersk- og marin biota

Der er i EU's guidance dokument 32 (EU, 2014) listet hvilke EQS'er i direktivet, der relaterer sig til toppredatorer (Hg, HBCDD, hexachlorbenzen, hexachlorbutadien, dicofol). For disse er guidance dokumentets anbefaling, at man overvåger arter lige under top-predatorernes trofiske niveau, som er omkring TL 4 i ferskvand og TL 5 i marint vand.

Der er ingen data i NOVANA programmet, som kan anvendes direkte til fastlæggelse af trofisk niveau (såsom C/N isotop ratioer), og for nogle arter, fx aborre i søer, ændrer det trofiske niveau sig med alderen fra "græsæder" til kødæder. Dertil kommer, at omregningen mellem trofiske niveauer er meget usikker, hvilket betyder, at normalisering til trofisk niveau vil bidrage med væsentlig større usikkerhed (faktorer på 10-100 eller mere) end usikkerheden for de målte parametre (typisk 10-50%). Omregningen foregår som beskrevet ovenfor (afsnit 2.1) til TL 3 for ferskvands områder og TL 4 for marine områder (undtagen PAH'er, der omregnes til TL 2, hvis de måles i muslinger). Der laves vurderinger i regnearket både på de normaliserede data og fødekædeniveau omregnede data, så brugeren (eller Miljø- og Fødeministeriet generelt) kan vurdere, om usikkerheden ved omregningen er for stor til at de TL omregnede værdier kan anvendes.

3.4 Omregning for vands hårdhed (Cd og Zn i ferskvand)

For at tage højde for den øgede ionstyrke i hårdt vand, og dermed mindre følsomhed for metal ionerne er EQS for cadmium (Cd) og MKK for zink (Zn) afhængige af vandets hårdhed (udtrykt ved indholdet af CaCO_3). For zink er der MKK'er for henholdsvis hårdt og blødt vand, mens der for cadmium er EQS i fem hårdhedsklasser. Fra 2016 er calcium (Ca) og alkalinitet derfor medtaget som støtteparametre i MFS-målingerne i ferskvand.

Hvis der ikke findes samtidig målte data for Ca, kan indholdet enten estimeres som en middelværdi af eksisterende nyere målinger, eller der kan anvendes data for hårdhed i grundvandet i området, selvom disse sandsynligvis giver en overestimering af Ca indholdet i overfladevand. I regnearket er der ikke lavet en proxy for Ca indhold, så det skal tilføjes manuelt, hvis Ca ikke er målt. I regnearket anvendes den mest restriktive grænse for blødt vand, hvis der ikke er tilgængelige data for Ca-indhold. Ca data udtrækkes separat og kopieres (eller skrives) ind på fanebladet "Hent Data". Sammenkoblingen mellem parametre og MFS data fra ODA sker ud fra dato og klokkeslet, så der kan opstå fejl, hvis flere prøver er udtaget på samme tid ved flere stationer. Det kontrolleres, at der ikke er fejl ved at kontrollere om stationsnavnet er korrekt på fanebladet "Dataomregning". Da MKK for cadmium kun er angivet for højeste hårdhed (mest Ca) på fanebladet "Kriterier", beregnes en Ca-faktor ud fra de 5 klasser som angivet i tabel 2. Den beregnede faktor ganges

på den målte værdi, og på fanebladet "MKK kriterier" anvendes denne omregnede værdi til sammenligning med EQS kriteriet for klasse 5.

Tabel 2. Faktorer og hårdhedsklasser for Cd EQS for CaCO₃ eller Ca målinger.

Klasse	CaCO ₃ grænse	Ca grænse	EQS (mg/l)	Faktor
I	30	12	<0,08	3,125
II	40	16	0,08	3,125
III	50	20	0,1	2,778
IV	100	40	0,15	1,667
V	200	80	0,25	1

For zink skelnes der mellem blødt vand (CaCO₃<24) og hårdt vand, med MKK på 3,1 hhv. 7,8 mg/l. Hårdtvandskriteriet anvendes, så blødt vand ganges med en faktor 2,52.

3.5 Omregning for tørstof/vådvægt for fersk- og marint sediment

Modsat biota er det ikke direkte muligt at sætte en default omregning for tørstofindholdet i sediment, selvom der er en kraftig korrelation mellem sediment type (dvs. aluminium og lithium indhold eller <63 µm fraktion og TOC).

3.6 Omregning for organisk indhold (TOC) for fersk- og marint sediment

Mange miljøfarlige stoffer bindes let til kulstofkæder, eksempelvis i organisk materiale som alger i marint vand og blade/humus stoffer i ferskvand. Indholdet af total organisk kulstof (TOC) indikerer hvor stort indholdet af organisk materiale er. Niveauet er angivet i % af sedimentindholdet, og kan ikke bruges som markør for miljøfarlige stoffer direkte (da disse normalt forekommer i godt en milliontedel af TOC niveauerne). Der er en god korrelation for marine sedimenter mellem TOC og ler-silt fraktionen (og Al/Li indholdet), da TOC typisk er små partikler, der sedimenterer samme steder som ler-silt fraktionen. TOC indholdet i rent sand er normalt under detektionsgrænsen for TOC, og derfor anvendes forholdet mellem målt TOC indhold og det normale indhold (2,5% for OSPAR) direkte.

For marine sedimenter ligger forholdet mellem glødetab og TOC typisk imellem 2 og 4 (svarende til at C-indholdet i det organiske materiale, der glødes væk, er 25-33% af totalvægten), men det varierer afhængig af område, så en værdi på 3,5 (se appendiks 2) er anvendt som proxy for omregningen af glødetab til TOC, hvor TOC ikke er målt (eller målt under detektionsgrænsen).

I sedimenter fra ferskvand er der ikke målt TOC i det nuværende NOVANA program, hvilket gør det svært at foretage omregninger svarende til dem, der er beskrevet for MKK i marint sediment. Det forventes, at den samme relation findes i ferskvandssedimenter, og der derfor i et fremtidigt overvågningsprogram, hvor der måles TOC, bør normaliseres til denne.

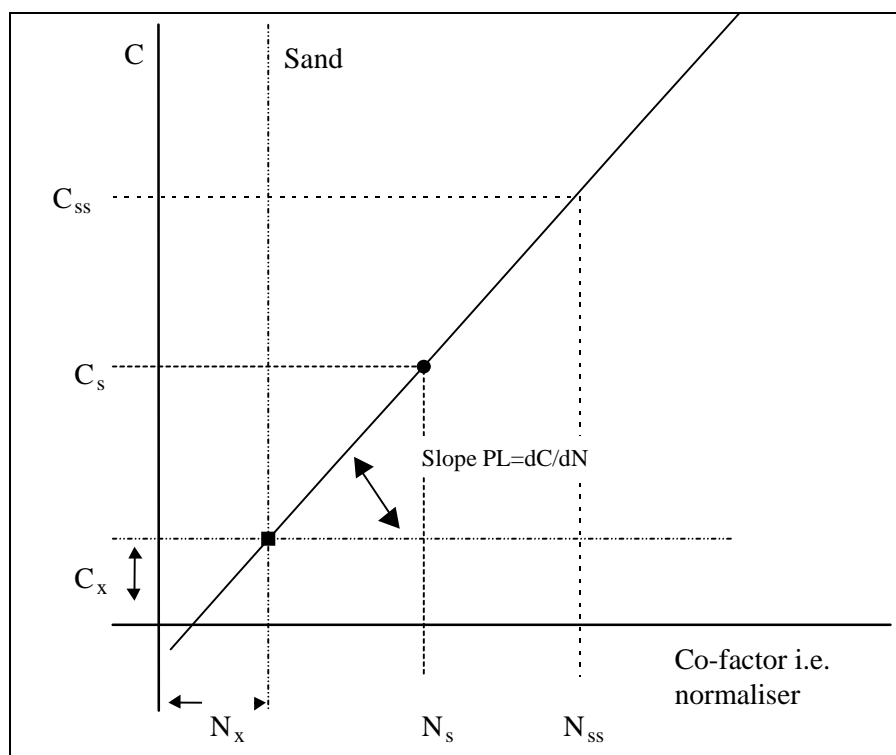
3.7 Omregning for ler-silt proxy (Al/Li) for marint sediment

Omregningen af metalkoncentrationer til 5% eller 5,8% (total oplukning) Al eller 52 mg/kg Li er baseret på OSPARs guideline for sediment OSPAR (2004). Normalisering går generelt godt for marine områder, men der er ikke den

samme sammenhæng i ferskvandssedimenter (se appendix 2), så den er bør kun anvendes for marine prøver.

Normaliseringen går ud fra en lineær sammenhæng mellem det naturlige indhold i sediment og metal koncentrationen (figur 1).

Figur 1. Normalisering af en parameter med koncentration C_s ved indhold af normalisator N_s , hvor sand med normalisator indhold N_x indeholder koncentrationen C_x af parameteren, og der normaliseres op via lineær interpolation til et normalisator indhold N_{ss} , hvilket giver en normaliseret koncentration på C_{ss} . (OSPAR, 2002).



Det nederste punkt illustrerer indholdet af parameterens koncentration C_x i rent sand, med koncentrationen af normalisatoren N_x i sand. Dette er "baggrundskoncentrationen" af normalisator (dvs. Al, Li) og analyseparameteren (fx Pb) i sand. Dette er bestemt i OSPAR regi ved at sigte sedimentprøver fra steder med lille forventet antropogent bidrag, og derefter analysere sand fraktionen, efter den er skyllet med et organisk opløsningsmiddel for at fjerne organisk kulstof indholdet. For en prøve, som vi vil normalisere til (N_{ss} 5% Al eller 52 mg/kg Li) kan det normaliserede koncentrationsniveau af analyseparameteren altså beregnes som C_{ss} .

$$C_{ss} = (C_s - C_x) \frac{N_{ss} - N_x}{N_s - N_x} + C_x \quad (\text{OSPAR, 2002 s.61})$$

Værdierne for N_x og C_x er taget fra OSPAR (se appendix 2), da der kun er udført test for danske forhold i tre prøver fra NOVANA 2000 sediment programmet (Larsen, 2001). Disse data ligger nogenlunde på OSPARs niveau.

Det skal bemærkes, at hvis der måles i meget sandede sedimenter, er der en risiko for, at N_s (altså målt normalisator værdi) er mindre end N_x (altså OSPAR normalisator værdi i rent sand), og dermed bliver brøken negativ, og afhængig af C_x vil C_{ss} også blive negativ. Derfor vil værdier, hvor N_s eller C_s er mindre end N_x eller C_x være "ikke-valid" (I.V.). Dette markeres i kolonne AK-AL for TOC, Al hhv. Li normaliseringerne i fanebladet "Dataomregning".

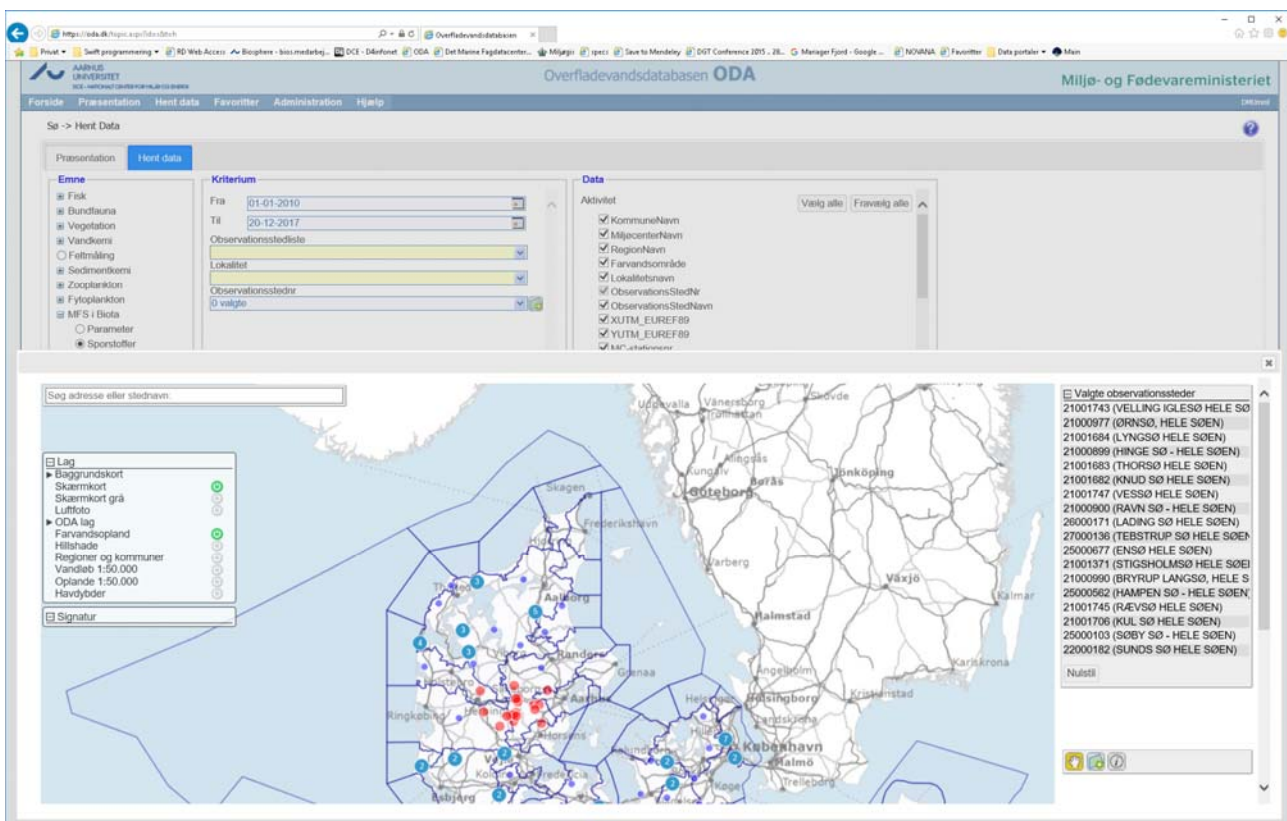
4. Regnearkene

4.1 Matricer

Der er fem regneark, et for vand (kun ferskvand - dog er der to eksempler da ODA ekstraktionen indeholder forskellige overskrifter for søer og vandløb), to for biota (fersk hhv. marin) og to for sediment (fersk hhv. marin). Princippet i alle er, at data hentes fra ODA, og omregningerne og vurderingen foregår på separate faneblade. Data fra andre kilder kan skrives ind, men kvaliteten af vurderingen vil afhænge af, hvor mange supplerende data, der er tilgængelig. Da stofnavnet bruges som nøgle, skal alle stoffer staves på præcis den samme måde som på fanebladet "Kriterier" for at virke (alle navnene kan findes på fanebladet CAS_nr). Regnearkene for biota og sediment er fortrinsvis testet for marine områder og søer.

4.2 Indlægning af data i "Hent data"

Værktøjet er opbygget med udgangspunkt i, at der udtrækkes data fra ODA. Afgrænsning af geografiske områder eller tidsperiode kan foretages i ODA (figur 2). Udtræk kræver adgang til ODA. Efter log ind vælges i "Hent Data" menuen, om det er data fra sø, vandløb eller hav, man vil hente.

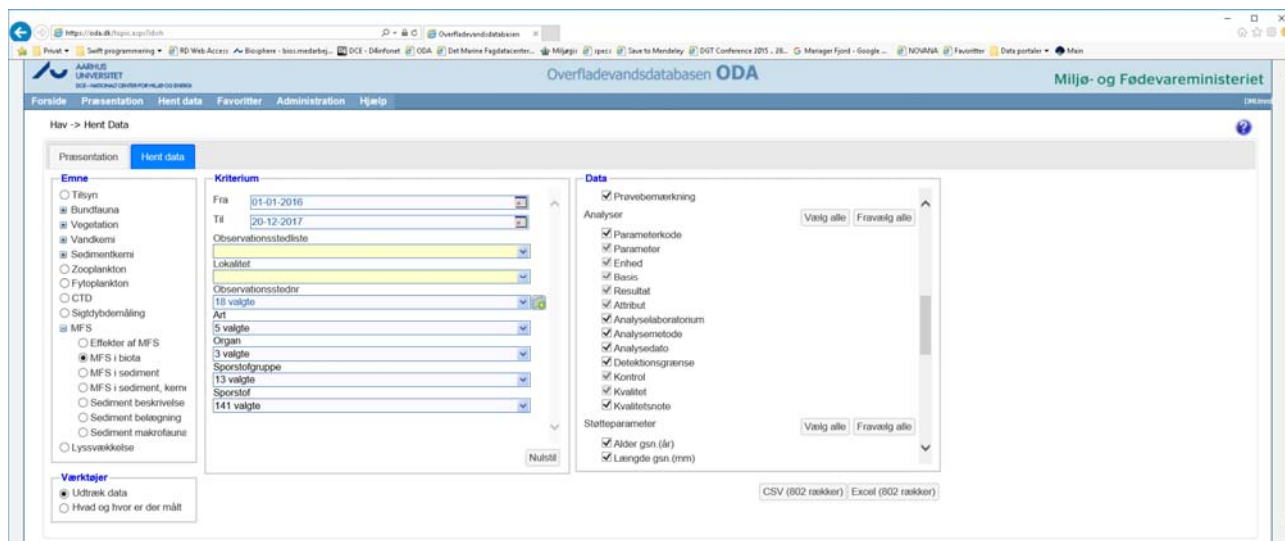


Figur 2. Eksempel på udvælgelse af MFS sporstoffer (eksempel Hg) for søer i det midtjyske søhøjland i perioden 2010-2017 ved "point and click" fra baggrundskort (den grønne mappe ud fra Observationsstednr). Nederst (udenfor skærm) trykkes på "afslut" knappen for at vælge stationerne. Der kan også vælges fra listerne (gule drop down menuer). I begge tilfælde holdes "Ctrl" knappen nede for at vælge flere stationer samtidig, på kortet zoomes indtil de lyseblå prikker med mere end en station opløses til individuelle stationer.

Alle parametre og ekstra information trækkes ud, og hentes som et regneark (Figur 3: "Excel (xxx rækker)" knappen, hvor xxx angiver antallet af datalinjer i regnearket, dvs. 0 hvis der ikke er data og ellers antallet af parametre • antallet af stationer), der herefter kopieres ind på fanebladet "Hent data". Bemærk at man ikke kan blande vandløb og søer i et regneark direkte, da der er forskellige kolonner for de to typer ferskvande, men det er samme regneark, der anvendes som udgangspunkt for begge typer ferskvand. Omregningen mellem de forskellige relevante enheder foregår på fanebladet "Dataomregning", som beskrevet i kapitel 2. En oversigt over alle kolonner og deres anvendelse er angivet i appendiks 1, hvor det også fremgår, hvilke data der som minimum skal hentes for at alle vurderinger kan foretages.

Generelt er minimums datatyperne, der skal ekstraheres observationsstedNr og observationsstedNavn, MC-stationsnr, (start)dato, parameterkode, parameter, resultat, enhed, attribut, basis og detektionsgrænse, samt de nødvendige støtteparametre. For biota herudover latinsk navn og organ og for sediment ekstraktion (for metaller skelnes der mellem total incl. HF og HNO₃ oplukning). Udover de nødvendige data typer er det også praktisk at ekstrahere koordinaterne for sener at kunne illustrere resultatet af beregningerne og vurderingerne på kort, og stationsnumre/ID, som normalt anvendes for at gøre vurderingen af dataene nemmere.

For marine biota prøver skal der ud over default værdierne sættes flueben i feltet "Parameterkode" (figur 3) under "Analyser" næstnederst i "Data" feltet. Herudover vælges støtteparametre nederst i "Data" feltet: Som minimum "Toerstof total (pct)", "Fedtvægt ekstraherbar" og "Fedtvaegt total" (der kan også bare trykkes på "Vælg alle"). For ferskvand er støtteparameteren, der skal anvendes, calcium. For sediment er støtteparametrene aluminium, lithium, sedimentfraktion <63 µm, tørstof og TOC/Glødetab (ikke alle tilgængelige for ferskvands sediment).

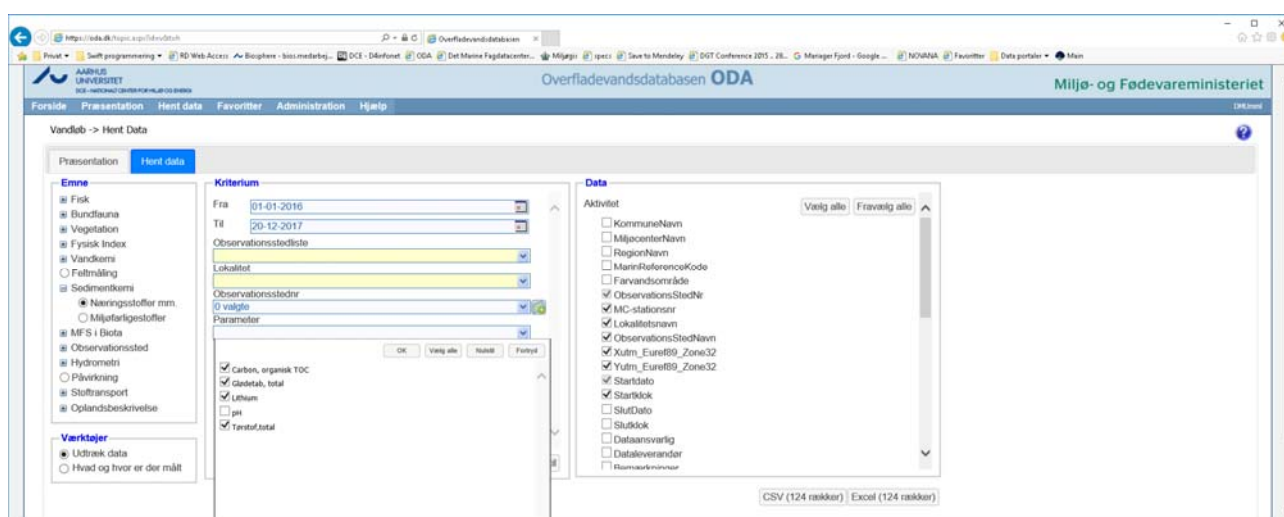


Figur 3. Udtræk af 2016 og 2017 data fra marine prøver – under data er "vælg alle" valgt for alle muligheder i rullefeltet (her ses kun analyser og støtteparametre), for kriterium er alle valgt for observationsstednummer, osv.

For ferskvandsprøver (søer og vandløb) skal normaliseringsparametre udtrækkes for sig, da de er registreret under "Parametre" for biota og under "Næringsstoffer mm." for sediment. De relevante ekstra parametre er calcium for vand, tørstof for biota samt tørstof, glødetab, lithium og TOC for sediment (figur 4).

Bemærk at der i eksempel regnearket er udregnet et gennemsnit for søer og vandløb og lagt ind på "Hent data Næringsstoffer" siden, så man kan anvende det direkte på data frem til 2018 uden at foretage den ekstra ekstraktion. Det består derfor af 3 kolonner: *ObservationsStedNr*, *Type* som angiver, om det er en sø eller et vandløb og *Resultat*, som giver gennemsnitskoncentrationen af Ca for alle målinger. Gennemsnitskoncentrationen er beregnet ud fra hårdhed, hvis der er målt total hårdhed, Ca+Mg koncentrationen (omregnet til molær, lagt sammen og regnet tilbage til Ca i mg/l) eller bare Ca koncentrationen, hvis det er det eneste målte. Der er 1051 observationsstednumre inkluderet i det anvendte datasæt, baseret på 11767 målinger i 1023 vandløb og 541 målinger i vandløb i 26 søer.

Hvis der foretages udtræk af nyere data (efter 2018) kan de tilhørende normaliseringsdata sættes ind på "Hent data Næringsstoffer" fanebladet, og kun de målinger, som hører til datasættet, vil herefter blive brugt (ikke historiske data). Der er kun behov for to kolonner, A-kolonnen med *ObservationsStedNr* og en kolonne med calcium koncentrationerne i mg/l (evt. $40 \times (\text{Ca}/40 + \text{Mg koncentrationen}/24)$, eller tilbageregnet fra total hårdhed $\times 0,178$ (hårdhed til CaCO_3) $\times 40$). Kolonnen skal hedde "Resultat". Hvis data udtrækkes fra ODA, skal man kopiere *observationsstedNr* kolonnen hen som første kolonne ved indsætning.



Figur 4. Udvalgelse af støtteparametre for sediment i vandløb (Næringsstoffer mm.). Kun Calcium anvendes hvis der ikke skal tages hensyn til magnesiums bidrag til total hårdheden, eller hvis der ikke kun er målt total hårdhed på nogle stationer.

4.3 Beregninger udført i "Dataomregning"

Dette afsnit beskriver de beregningsformler, der er anvendt for dataomregningerne i fanebladet "Dataomregning", og som er beskrevet i kapitel 3. Biota-beskrivelsen gælder både for både data fra ferskvand og marine data, for så vidt at data kan findes i ferskvandsprogrammet (pt indgår fx lipid ikke i NOVANA for ferskvand). For sediment er der lidt større forskel, så her er ferskvand og marint sediment beskrevet separat. Formler fra Excel er i nedenstående skrevet med fonten *courier* for at gøre det nemmere at skelne dem fra selve teksten.

Normaliseringsparametrene trækkes for marin biota direkte ud fra ODA, men for marint sediment er data tilgængelig for hele NOVANA perioden (de er ikke med i ferskvand før 2015), så her laves et faneblad "normaliseringsdata" baseret på en pivot tabel, hvor tørstof, glødetab, TOC, aluminium og lithium

udvælges som funktion af observationsstedNr, og gennemsnittet beregnes (i de fleste tilfælde er der kun et datapunkt pr. station pr. år). Herfra kan de findes ved et HOPSLAG.

4.3.1 Omregning for tørstof/vådvægt i biota (fersk og marin)

Excel formel til beregning af anvendt tørstof indhold (kolonne AD) fra målte værdier af tørstof eller ved opslag i tabellen for tørstof (Defaultomregning baseret på art-organ i kolonne AA2)

```
AD2=HVIS (X2>0; X2; LOPSLAG (AA2; DefaultOmregning!$C$3:$E$78; 2))
```

Beregning (rød tekst) af den vådvægts baserede koncentration, hvis resultatet ikke er i vådvægt allerede

```
AG2=HVIS (T2="Vådvægt "; V2*AF2; V2*AF2*AD2/100)
```

Beregning (rød tekst) af den tørstof baserede koncentration, hvis resultatet er i vådvægt:

```
AH2=HVIS (T2="Vådvægt "; V2*AF2*100/AD2; V2*AF2)
```

Omregning for lipid i biota (marin)

Excel formel til beregning af anvendt lipid indhold (kolonne AE) fra målte værdier af total lipid (kolonne Z), ekstraherbar lipid (kolonne Y) eller ved opslag i tabellen for lipid, hvis lipid ikke er målt (Defaultomregning baseret på art-organ i kolonne AA2)

```
AE2=HVIS (Z2>0; Z2; HVIS (Y2>0; Y2; LOPSLAG (AA2; DefaultOmregning!$C$3:$E$78; 3; FALSK)) )
```

Excel formel til beregning af lipid korrigeret koncentration fra vådvægt i kolonne AG og evt. andre faktorer i kolonne AF:

```
AI2=AG2*AF2*100/AE2
```

4.3.2 Omregning for fødekæde niveau i biota (fersk og marin)

Det er målet, at der i ferskvand anvendes biota på trofisk niveau 3 og i havvand niveau 4, så i feltet AM2 (grønne ulåste felt, navngivet TrofiskNiveauMål) indsættes 3 for ferskvand og 4 for havvand. Hvis det er en sø/vandløb, hvor det højeste trofiske niveau ikke er 4, eller marint miljø, hvor højeste trofiske niveau ikke er 5, kan mål-niveauet ændres. Der anvendes samme målsatte trofiske niveau for alle data i regnearket. Overskriften i kolonne AG viser valget for TL= TrofiskNiveauMål

Da der pt. ikke er målt lipid i biota fra ferskvand er kolonnerne AE og AI, der i marine biota prøver anvendes til lipidnormalisering, tomme i ferskvandsarket.

Omregning (rød tekst) af den målte koncentration til det anvendte TrofiskNiveauMål (TL) (AJ2) sker ud fra opslag i "Kriterier" for TMF af parameteren (kolonne AB), opslag i DefaultOmregning af TL for art-organ (kolonne AA) (marin), ud fra koncentrationen i µg/kg VV (kolonne AG) – hvis ingen TMF

eller TL kan findes sættes, resultatet til $\mu\text{g}/\text{kg}$ VV koncentrationen. Som kontrol indeholder kolonne AK opslaget for TMF og kolonne AL opslaget for TL:

```
AJ2=HVIS (ER.TAL (LOPSLAG (AB2;Kriterier!$AG$2:$AL$18;6;FALSK));HVIS (ER.TAL (LOPSLAG (AA2;DefaultOmregning!$C$3:$H$27;6;FALSK));AG2*LOPSLAG (AB2;Kriterier!$AG$2:$AL$18;6;FALSK)^(TrofiskNiveauMål-LOPSLAG (AA2;DefaultOmregning!$C$3:$H$27;6;FALSK));AG2);AG2).
```

4.3.3 Omregning for vands hårdhed (Cd og Zn i ferskvand)

Excel beregningsformel for faktoren (kolonne T indeholder Ca niveauet):

```
Y2=HVIS (ER.TAL (U2);HVIS (U2>80;1;HVIS (U2<20;0,25/0,08;HVIS (U2<40;0,25/0,09;0,25/0,15)));0,25/0,08)
```

For zink skelnes der mellem blødt vand ($\text{CaCO}_3 < 24$) og hårdt vand med MKK på henholdsvis 3,1 og 7,8 mg/l. I excelarket er der anvendt MKK for hårdt vand, så koncentrationen i blødt vand ganges med en faktor 2,52.

Excel beregningsformel for faktoren (kolonne T indeholder Ca niveauet):

```
Z2=HVIS (ER.TAL (U2);HVIS (U2<(24/2,5);7,8/3,1;1);1)
```

Der er målt i $\mu\text{g}/\text{l}$ eller mg/l . Der foretages omregning mellem enheder med en faktor (kolonne Z), så alle har enheden $\mu\text{g}/\text{l}$:

```
AA=HVIS (K2="mg/l";1000;1)
```

Der er tre resultat kolonner baseret på den målte værdi i kolonne Q:

AB: korrektion til $\mu\text{g}/\text{l}$ = $N2 * AA2$

AC: Korrektion til Ca klasse = $AB2 * Y2$ (kun for cadmium, ellers ikke relevant (i.r.))

AD: Korrektion til Zn klasse = $AB2 * Z2$ (kun for zink, ellers i.r.).

4.3.4 Omregning for tørstof/vådvægt for sediment (marint og fersk)

Excel beregningsformel for omregning (forklaring på kolonner):

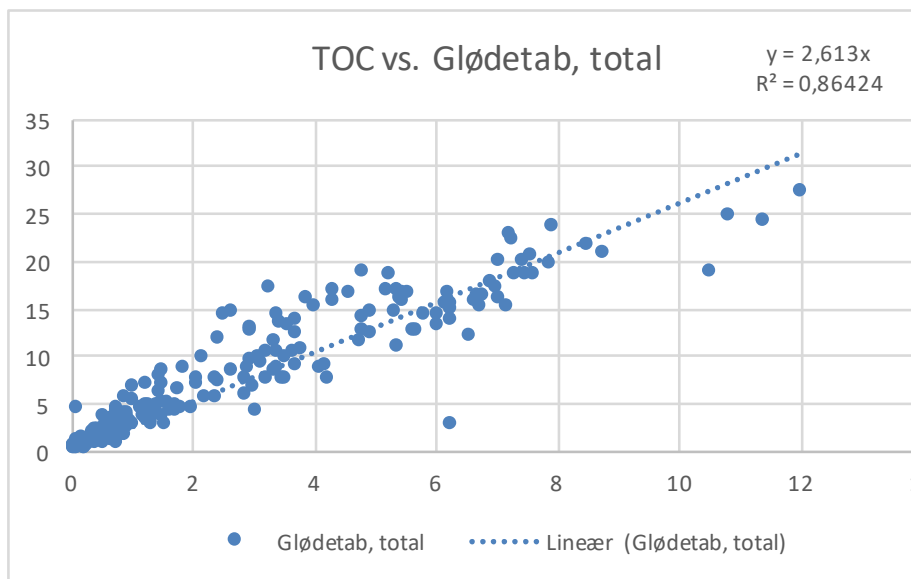
Først omregnes til tørstof for alle sedimenter (normalt er alle resultater fra T2 tørstof, så det er bare en kopiering af "Resultat" fra ODA), Inklusiv omregning til mg/kg TS, dvs. hvis indholdet af organotinforbindelser er angivet som Sn-indhold ganges med forholdet mellem Sn og organotin molekylet (opslag), og der ganges med 1000 for mg/kg (TOC, $< 63\mu\text{m}$ fraktion, glødetab og tørstof i % korrigeres ikke!):

```
AG=HVIS (M2="vådvægt";T2*AF2*100/AD2;T2*AF2)
```

4.3.5 Omregning for organisk indhold (TOC) for sediment (marint)

Organisk indhold i sediment måles enten som Total Organisk Carbon (TOC), hvor carbonater først fjernes med saltsyre behandling, og derefter måles C indholdet ved afbrænding i ren iltatmosfære. En billigere indikator for organisk indhold er glødetab, hvor organisk materiale fjernes ved opvarming til 450°C, så karbonater ikke fjernes. Der er normalt en sammenhæng mellem TOC og glødetab, som dog afhænger af karakteren af det organiske materiale, der findes på lokaliteten. Generelt er forholdet mellem C og det organiske materiale, der forsvinder, en faktor 2,6 i danske sedimenter (227 stationer målt fra 1998 til 2015, figur 5). Der er pt ikke TOC (f_{oc}) data for ferskvand, men korrektionen vil foregå på samme måde som for marine sedimenter.

Figur 5. Lineær regression mellem TOC og glødetab for 227 sediment prøver fra 1998 – 2015 (ODA udtræk). Outliere kan skyldes forskellige typer af fremherskende organisk materiale.



Alle normaliseringsparametrene slås op fra "Normaliseringsdata" fanebladet for hver stednummerID, og hvis det ikke findes TOC, anvendes glødetabet divideret med en faktor 2,6.

```
Glødetab:W=HOPSLAG(D2;Normaliseringsdata!$4:$11;5)
```

```
TOC: X=HOPSLAG(D2;Normaliseringsdata!$4:$11;4)
```

Anvendt TOC beregnes her efter fra kolonne W og X:

```
AE= HVIS (ER.TAL (X2) ;X2;HVIS (ER.TAL (M2) ;M2/2,6;"-"))
```

4.3.6 Omregning for ler-silt proxy (Al/Li) og TOC for sediment (marin)

OSPAR udviklede til QSR 2010 et sæt normaliserings parametre (OSPAR, 2008), som fastsætter N_x eller C_x , S_{C_x} eller S_{N_x} , V_{C_m} og N_{ss} (appendix 7.3). Disse anvendes som beskrevet i afsnit 3.7 til at omregne den målte koncentration C_x til koncentrationen ved den normaliserede C_{ss} koncentration, givet som koncentrationen, hvor Normaliseringsparameteren er N_{ss} . For metaller anvendes normalt Al eller Li som normalisator, for danske farvande anbefales Li jvnf. Larsen (2002). Organiske parametre omregnes baseret på TOC (eller den "an-

vendte TOC” beskrevet ovenfor). For de organiske forbindelser og TOC regnes normaliseringskurven med at gå igennem (0,0), hvorimod der forventes et vist niveau i sand for metallerne af både parameter og normalisator og skæring for sand er derfor i (N_x , C_x).

Først hentes aluminium (Al) og lithium (Li) data fra normaliseringsdata fanebladet:

Aluminium: $Y = \text{HOPSLAG}(D2; \text{Normaliseringsdata}!\$4:\$11; 3)$

Lithium: $Z = \text{HOPSLAG}(D2; \text{Normaliseringsdata}!\$4:\$11; 7)$

Omregning via formelen (afsnit 3.7) foretages herefter ved:

$$C_{ss} = (C_s - C_x) \frac{N_{ss} - N_x}{N_s - N_x} + C_x$$

TOC-normaliseret: $AH = (\text{AG2} - \text{LOPSLAG}(\text{AA2}; \text{DefaultOmregning}!\$AB\$2:\$AI\$47; 4)) * (\text{LOPSLAG}(\text{"Carbon, org. TOC-Fysisk analyse uden ekstraktion"}; \text{DefaultOmregning}!\$AB\$2:\$AI\$47; 8) - \text{LOPSLAG}(\text{"Carbon, org. TOC-Fysisk analyse uden ekstraktion"}; \text{DefaultOmregning}!\$AB\$2:\$AI\$47; 4)) / (\text{AE2} - \text{LOPSLAG}(\text{"Carbon, org. TOC-Fysisk analyse uden ekstraktion"}; \text{DefaultOmregning}!\$AB\$2:\$AI\$47; 4)) + \text{LOPSLAG}(\text{AA2}; \text{DefaultOmregning}!\$AB\$2:\$AI\$47; 4)$

Al-normaliseret: $AI = (\text{AG2} - \text{LOPSLAG}(\text{AA2}; \text{DefaultOmregning}!\$AB\$2:\$AI\$47; 4)) * (\text{LOPSLAG}(\$AO\$1; \text{DefaultOmregning}!\$AB\$2:\$AI\$47; 8) - \text{LOPSLAG}(\$AO\$1; \text{DefaultOmregning}!\$AB\$2:\$AI\$47; 4)) / (\text{Y2} - \text{LOPSLAG}(\$AO\$1; \text{DefaultOmregning}!\$AB\$2:\$AI\$47; 4)) + \text{LOPSLAG}(\text{AA2}; \text{DefaultOmregning}!\$AB\$2:\$AI\$47; 4)$

Li-normaliseret: $AJ = (\text{AG2} - \text{LOPSLAG}(\text{AA2}; \text{DefaultOmregning}!\$AB\$2:\$AI\$47; 4)) * (\text{LOPSLAG}(\$AR\$1; \text{DefaultOmregning}!\$AB\$2:\$AI\$47; 8) - \text{LOPSLAG}(\$AR\$1; \text{DefaultOmregning}!\$AB\$2:\$AI\$47; 4)) / (\text{Z2} - \text{LOPSLAG}(\$AR\$1; \text{DefaultOmregning}!\$AB\$2:\$AI\$47; 4)) + \text{LOPSLAG}(\text{AA2}; \text{DefaultOmregning}!\$AB\$2:\$AI\$47; 4)$

Hvor AA er parametren, DefaultOmregning!\$AB\$2:\$AI\$47 er området med opslag af C_x , N_x og N_{ss} (hhv. kolonne 4 og 8), AG2 er resultatet af stoffet i mg/kg TS, og normalisator værdien for TOC, Al og Li står i henholdsvis kolonne AE, Y og Z.

4.4 Øvrige hjælpe faneblade i regnearket

Værktøjet er baseret på ”hjælpedata” i en række ”hjælpefaneblade”, fx CAS-nr. i fanebladet CAS_nr. Disse data kan vedligeholdes af brugerne selv, fx hvis der skal tilføjes nye stoffer (tabel 3). Det anbefales, at der tilknyttes en bemærkning til de felter, der rettes, så det bliver sporbart, hvad der er ændret i forhold til det oprindelige regneark. Siderne er låst, så der ikke kan ændres uden kendskab til koden for de enkelte hjælpe faneblade. Koden er fremsendt til Miljøstyrelsen sammen med regnearkene, og kan rekvireres hos dem.

Tabel 3. Oversigt over hjælpefaneblade.

Fane	Funktion
Hent data Næringsstoffer [kun ferskvand (sø & vandløb)]	Baggrundsværdier for Calcium på alle stationer, der anvendes til fastlæggelse af faktorer for Zn og Cd baseret på hårdhedskategorier. Basisregneark indeholder alle data frem til maj 2018.
Dataomregning	Omregning af målte værdier til korrekt enhed og normalisering eller hårdhedskorrektion
Default Omregning [kun biota og sediment]	Værdier, der anvendes til omregning mellem tørstof-vådvægt-lipid., hvis der ikke findes målte værdier for tørstof, lipid (biota) eller TOC/Al/Li (sediment)
Kriterier	Anvendte vurderingskriterier, der kan tilføjes nye ved oplåsning af regnearket (husk at sortere). Kravene er gennemgået nedenfor i 4.4.1 – 4.4.4
CAS_nr	Oversættelse af analyseparametre til CAS numre (STANDAT kodeliste std00018 for MFS marint [kolonne A-F] og Stancode kodeliste 1008 for ferskvand [kolonne K-X])
Områder	Oversættelse af stationer til vandområder der anvendes til pivot tabellerne og gennemsnit/maximums koncentrationer fundet i alle prøver fra hvert område. Bemærk at denne side er lavet i GIS ved at sammenkoble stationslisten med vandområdenumre fra Miljøgis, og der er enkelte Stationer, der ikke er med i ODAs stationsliste udtrukket maj 2018 (fx ObservationsStedNr 58000192, Køge Å, opst. Brogade).

Nedenfor er overskrifterne på de enkelte Kriterie faneblade gennemgået. Hele tabellen er ikke gengivet, kun et lille udvalg for at vise hvordan bemærkninger og kriterier er registret.

Hvis der manuelt skal tilføjes områder for at beregne gennemsnit for et vandområde, skal der tilføjes Observationsstednr i kolonne B (heltal), lokalitet i kolonne C (tekst), vandområdeID i kolonne L (heltal) og (vandområde) navn i kolonne M (tekst). For overskuelighedens skyld anbefales det også at angive i kolonne A om det er en sø- eller vandløbsstation.

4.4.1 Krav for ferskvand - vand

For ferskvand er alle miljøkvalitetskrav hentet fra bekendtgørelse om fastlæggelse af miljømål (2017) (faneblad "Kriterier"). Miljøstyrelsen har oplyst, at der ikke forventes justering af nogle af de anvendte MKK ved opdateringen af bekendtgørelsen i starten af 2018 (SVANA, 2017). Kolonne A-G er låst, da værdierne i disse kolonner er hentet fra bekendtgørelsen. Kolonne D er en sammentrækning af paramter og type, så der kan skelnes mellem total og opløst fraktion, hvis der er forskellige kriterier. Kolonne H er til indtastning af baggrundskoncentration, hvor dette er relevant (dvs. for de fleste metaller, brintoverilte og formaldehyd jf. tabel 4). Hvis der indtastes en baggrundskoncentration, vil den blive fratrukket resultatet på "Dataomregnings fanebladet" før sammenligning med EQS eller MAC-EQS (i stedet for at lægge den til MKK).

Der er i enkelte tilfælde ikke defineret en MAC-EQS værdi (Chloroform og DEHP), i disse tilfælde er der anvendt 10x AA-EQS værdien. Generelt er forholdet mellem AA-EQS og MAC-EQS for de 85 definerede EQS værdier <5 for ~20% og <=10 for ~80%. I to tilfælde (benz(ghi)perylen og Hg er der ikke defineret en AA-EQS. Endelig er der fastsat en baggrundsværdi for kobber på

2,9 µg/l ud fra forskellen mellem biotilgængelig og total kobber grænseværdierne. Ud over de indskrevne EQS værdier er der 27 parametre i datasættet frem til 2018, som ikke har definerede EQS eller MKK grænseværdier.

Bemærk at regnearket er låst, bortset fra baggrundsværdier, manglende EQS værdier generelt og de to tentative MAC-EQS hhv. AA_EQS værdier.

Tabel 4. Oversigt over kriterier Faneblad for vand.

A	B	C	D	E	F	G	H	I
Type	Parameter	Type	Parameter-Type	enhed	AA-EQS	MAC-EQS	Baggrundskonc	Bemærkning
DK MKK	1-Methylpyren	Total	1-Methylpyren-Total	µg/l	-	-	0	Ingen krav i Bek1625(2017)
DK MKK	17Beta-østradiol	Total	17Beta-østradiol-Total	µg/l	0,0001	4,6	0	Nationalt fastsat MKK Bek1625(2017)

4.4.2 Krav for ferskvand - biota

For ferskvandsbiota anvendes MKK og EQS fra bekendtgørelse om fastlæggelse af miljømål (Miljø og Fødevarerministeriet, 2017) (faneblad "Kriterier". OSPAR værdierne er ikke relevante for ferskvand og indgår derfor ikke i regneark for ferskvandsbiota. Den danske miljøkvalitetsbekendtgørelse indeholder en række specifikke danske kriterier (MKK) men også implementering af EU's ændringsdirektiv (2013/39/EU), som er angivet som EQS under "Type" (kolonne H). EQS værdierne anvendes typisk også ved internationale vurderinger (OSPAR/HELCOM), hvorimod de danske MKK'er sjældent anvendes uden for Danmark.

Bemærk at data frem til 2018 næsten udelukkende er kviksløv i fiskemuskel (eller hele fisk for enkelte arter). Data for øvrige parametre er typisk af ældre dato eller fra særlige overvågningsprogrammer.

Tabel 5. Uddrag fra fanebladet "kriterier" for biota (fersk og marint) – MKK og EQS værdier.

A	B	C	D	E	F	G	H	I
Type	Parameter	organ	param-organ	enhed	basis	Værdi	Type	Bemærkning
DK MKK	Antracen	Alle Bløddele	Antracen-Alle Bløddele	µg/kg	Vådvægt	2400	MKK	Bek1625(2017)
DK MKK	Bly	Alle Bløddele	Bly-Alle Bløddele	µg/kg	Vådvægt	110	MKK	Bek1625(2017)

4.4.3 Krav for ferskvand - sediment

For ferskvandssediment anvendes MKK fra bekendtgørelse om fastlæggelse af miljømål (Miljø og Fødevarerministeriet, 2017) (faneblad "Kriterier". Ved seneste revisionen af bekendtgørelsen er der sket ændringer for (øgning) af MKK for cadmium fra 1. januar 2018, som er bygget ind i regnearket. OSPAR værdierne er ikke relevante for ferskvand og indgår derfor ikke i regnearket for ferskvandssediment. Der er ikke fastlagt EU kriterier for sediment, men der er QS for sediment i nogle af de underliggende EQS dossier, som ikke er taget ind i vandrammedirektivet på nuværende tidspunkt.

Bly og cadmium værdierne er ændret fra 2018 i forhold til den gamle bekendtgørelse om fastlæggelse af miljømål (bek. 439, 2016). Der er ikke noget specifikt krav til dimethylnaphthalener, men kravet gælder summen af mono-, di- og trimethylnaphthalener. Datasættet viser dog, at de højeste koncentrationer ofte måles for dimethylnaphthalenerne.

Tabel 6. Uddrag fra faneblad "kriterier" for sediment MKK værdier (Ferskvand E, Marine F).

A	B	C	D	E	F	G	H	I
Parameter	Note	enhed	Basis	Ferskvand	Marint	Baggrund	Type	Bemærkning
124-triazol	8	mg/kg	Tørstof	5,5	0,55	0	MKK	Bek1625(2017) conc x Foc indgår ikke i NOVANA
Antracen		mg/kg	Tørstof	0,024	0,0048	0	MKK	Bek1625(2017)
Bly		mg/kg	Tørstof	163	163	0	MKK	Bek1625(2017) OBS Marint rettet til 163 fra 33 i 2018

4.4.4 Krav og kriterier for marin biota

Der er fire opdelinger med kriterier for marin biota i faneblad "Kriterier". Første sæt er nationalt fastsatte MKK fra Miljø og Fødevarestyrelsen (2017) – som deles med ferskvand (tabel 5, ovenfor). Herudover er der i OSPAR defineret dels baggrunds assessment kriterier (tabel 7) og Environmental Assessment Criteria (tabel 8). I alle tilfælde er der en kolonne med parameter-organ kombinationen, så der kan skelnes mellem muslinger, fiske muskel og fiske lever for kriterierne (mest relevant for OSPAR og EU).

Tabel 7. Uddrag fra fanebladet kriterier for biota - OSPAR BAC værdier.

K	L	M	N	O	P	Q	R	S
Type	Parameter	Organ	param-organ	enhed	basis	Værdi	Type	Bemærkning
OSPAR BAC	Benz[a]anthracen	Alle Bløddele	Benz[a]anthracen-Alle Bløddele	µg/kg	Tørvægt	2,5	BAC	OSPAR 2017
OSPAR BAC	Benzo(a)pyren	Alle Bløddele	Benzo(a)pyren-Alle Bløddele	µg/kg	Tørvægt	1,4	BAC	OSPAR 2017

Tabel 8. Uddrag fra fanebladet "kriterier" for biota - OSPAR EAC værdier.

U	V	W	X	Y	Z	AA	AB	AC
ID	Parameter	Organ	param-organ	enhed	basis	Værdi	Type	Bemærkning
OSPAR EAC	Antracen	Alle Bløddele	Antracen-Alle Bløddele	µg/kg	Vådvægt	290	EAC	OSPAR 2017
OSPAR EAC	Benz[a]anthracen	Alle Bløddele	Benz[a]anthracen-Alle Bløddele	µg/kg	Vådvægt	80	EAC	OSPAR 2017

4.4.5 Kriterier for marint sediment

Der er to opdelinger med kriterier for marint sediment i faneblad "Kriterier". Første sæt (tabel 6, ovenfor) er nationalt fastsatte MKK fra Miljø og Fødevarestyrelsen (2017), som deles med ferskvand.

Det andet sæt vurderingskriterier (tabel 9) er OSPARs BAC og ERL eller EAC værdier, som er normaliseret til Al (eller Li) for metallerne og TOC for de organiske parametre.

Generelt anbefaler det marine fagdatacenter at anvende Li for metaller og TOC for organiske parametre i danske farvande, men da OSPAR normalt anvender Al, der ikke er så god for danske sedimenter, er det muligt at sætte disse i de grønne felter V2 for organiske (default sat til TOC) og V3 for metallerne (default sat til Li) på "kriterier" fanebladet. For hver enkelt parameter kan man evt. ændre den generelt satte normalisator i kolonne N og O ved at overskrive feltet. Hvis der skrives andet end de 4 "lovlige" normalisatorer, vil regnearket ikke fungere for den givne parameter.

Tabellen indeholder både indlandsvand (ferskvand) og andet (marine) kriterier, i nogle tilfælde er de ens, for andre er de meget lavere i marine områder. Nogle organiske stoffer (124-triazol fx) omregnes til OC (organisk carbon).

Table 9. Uddrag fra fanebladet "kriterier" for sedimenter - OSPAR BAC og ERL/EAC værdier.

K	L	M	N	O	P	Q	R
Type	Parameter	Enhed	basis BAC	basis ERL/EAC	BAC	EAC/ERL	Bemærkning
OSPAR BAC-ERL	Cadmium	mg/kg	Li	Li	0.31	1.2	OSPAR 2017
OSPAR BAC-ERL (Chrysen)	Crysen/triphenylen	mg/kg	TOC	TOC	0.02	0.384	OSPAR 2017
OSPAR BAC-EAC	DDE, p,p'	mg/kg	TOC	TOC	0.00009	0.0033	OSPAR 2017

4.5 Anvendelse af kriterier

Resultaterne i dataomregningsfanebladet sammenholdes med de i fanebladet "Kriterier" angivne miljøkvalitetskrav og vurderingskriterier (tabel 4-9 ovenfor). Hvis der foretages ændringer i/tilføjelser til "Kriterier" fanebladet, vil disse afspejle sig med det samme i vurderings-fanebladene for de pågældende parametre. For ferskvand er både EQS og MKK'er fastlagt i den danske bekendtgørelse, og der er dermed kun et vurderings-faneblad for vand og sediment ("DK-MKK"). For biota er der nogle parametre, der kun er MKK'er fastlagt for, og andre hvor der kun er EQS'er. Da EQS'erne indgår sideløbende med MKK'erne er de behandlet på samme fane. For de marine biota er der MKK'er, EQS'er og en del OSPAR vurderingskriterier ("DK-MKK" og "OSPAR BAC-EAC"). For marint sediment er der kun MKK'er og OSPAR vurderingskriterier. Disse findes derfor fordelt ud over to faneblade, et for MKK (og EQS) og et for OSPAR kriterier ("DK-MKK" og "OSPAR BAC-EAC"). Nogle af OSPAR kriterierne er sammenfaldende med EQS, og er derfor gentaget på begge faneblade.

Alle målte værdier sammenlignes med det gældende miljøkrav eller vurderingskriterie som ratio, dvs. <1 er under miljøkravet og >1 er over miljøkravet, efter normalisering og evt. omregning til samme enhed som kvalitetskravene. Der er små forskelle mellem de enkelte vurderingsfaneblade, afhængig af prøvetypen, så de gennemgås individuelt ligesom kriterierne for de enkelte matricer blev det ovenfor.

4.5.1 Vurdering for ferskvand – vand

Der anvendes miljøkvalitetskrav EQS og MKK for ferskvand, og der sammenholdes med både de generelle miljøkvalitetskrav (årgennemsnit, AA-MKK/EQS) og maksimumskoncentrationer (MAC-MKK/EQS).

I pivot-tabellen (faneblad "MKK oversigt") for ferskvandsdata (faneblad "DK MKK") skal man være opmærksom på, at AA-EQS og MKK gælder, hvis der er data for mindst et helt år, og disse gælder for middelværdien af de målte data (anbefalet overvågningsfrekvens for fysisk-kemisk kvalitetselementer for Stoffer på listen over prioriterede stoffer er 1 måned jævnfør vandrammedirektivet 2000/60/EF, bilag V). Bemærk at middelværdien af ratioerne til AA-EQS/MKK mellem parametrene *ikke* kan anvendes til vurdering af målsætningsopfyldelse for et område, da enkelte parametre kan være langt overskredne og andre kan ligge tæt på 0 og dermed udligne de høje værdier. Den højeste målte værdi for hele datasættet skal vurderes i forhold til MAC-EQS/MKK, og derfor kan den højeste værdi af maksimumsværdierne af ratioerne anvendes til at dokumentere målsætningsopfyldelse af MAC for hele

området, hvis den er under 1. Hvis den er større end 1, kan man for de enkelte parametre se, hvilke det er, der hindrer målsætningsopfyldelsen. Opsumringen i kolonne O og P er farvekodet, så værdier <1 er grønne. For værdier over 1 er der en farveskala fra gul til rød (rød når ratioen er over ca. 5, men afhænger lidt af de største afvigelser for området).

Vurderingen af resultater i forhold til kravene findes på fanebladet "DK MKK", og indeholder både MKK og EQS (eksempel transponeret for at kunne vises på en side, tabel 10). Kolonne A-E er information om prøven, F er den målte værdi (i µg/l) og G er kombinationen af parameter og prøvefraktion for at kunne slå op i "Kriterier" efter AA-EQS og MAC-EQS værdien (kolonne K og L). Kolonne H er parameteren alene og J det vandområde, som prøven er indsamlet fra (anvendes som udgangspunkt for pivottabel på "MKK oversigt", se nedenfor). Selve ratioerne beregnes i O og P, og er beskrevet nedenfor. Kolonnerne med ratioer er farvekodet, så <1 er grønne, mellem 1 og 2 er gule og over 2 er røde.

Formlen for beregning af AA-EQS ratioen "Ratio ave", hvor resultaterne for Dataomregning kolonne AB er Calcium korrigerede værdier for cadmium, tilsvarende AC Calcium korrigerede værdier for zink og endelig µg/l værdier i AA (se 4.3.4) er:

```
O2=HVIS (H2="Cadmium";HVIS (ER.TAL (K2);Dataomregning!ACB/K2;"-");HVIS (H2="Zink";Dataomregning!AC2/K2;HVIS (ER.TAL (K2);Dataomregning!AA2/K2;"-")))
```

Formlen for Ratio MAC "Ratio Max" beregningen ligner til forveksling, men regner i forhold til kolonne L (MAC-EQS) i stedet for K (AA-EQS)

```
M2=HVIS (H2="Cadmium";HVIS (ER.TAL (L2);Dataomregning!AB2/L2;0);HVIS (ER.TAL (L2);Dataomregning!AA2/L2;0))
```

Bemærk at AA-EQS sammenligningen ikke kan anvendes direkte her, men i stedet skal sammenholdes for middelværdien af et helt år (anbefalet overvågningsfrekvens for fysisk-kemisk kvalitetselementer for Stoffer på listen over prioriterede stoffer er 1 måned jvnf vandrammedirektivet 2000/60/EF, bilag V).

Med pivot tabellen i fanebladet "MKK oversigt" foretages direkte sammenligning med MAC-EQS inden for et vandområde, men også her er det relevant om nogle af de målte parametre og prøvetagninger for et område er over grænseværdien (dvs. Ratio >1). Dette summeres op i fanebladet "MKK oversigt" (tabel 10).

Tabel 10. Eksempel på resultat af databehandling for ferskvands vandløbsdata (OBS: Transponeret fra regnearket, faneblad DK MKK).

A	Lokalitetsnavn	Følstrup Bæk	Følstrup Bæk	Følstrup Bæk	Følstrup Bæk
B	ObservationsStedNr	48000006	48000006	48000006	48000006
		Følstrup Bæk, OS	Følstrup Bæk, OS	Følstrup Bæk, OS	Følstrup Bæk, OS
C	ObservationsStedNavn	STENHOLTS MØLLE	STENHOLTS MØLLE	STENHOLTS MØLLE	STENHOLTS MØLLE
D	Vandområde nr	41174	41174	41174	41174
E	Startdato	20170327	20170327	20170327	20170327
F	Resultat µg/l	0,64	0,24	11	57
G	Parameter-Prøvefraktion	Kobber-Opløst - filtrat fra filtrering	Nikkel-Opløst - filtrat fra filtrering	Zink-Opløst - filtrat fra filtrering	Barium-Opløst - filtrat fra filtrering
H	Parameter	Kobber	Nikkel	Zink	Barium
I	Observationssted	48000006	48000006	48000006	48000006
J	Vandområde nr	41174	41174	41174	41174
K	AA-EQS	1	4	7,8	19
L	MAC-EQS	2	34	8,4	145
				Nationalt fastsat AA-EQS afh af hårdhed ,	
		Nationalt fastsat biotilgængelig eller +baggrund BEK1625(2017)	EU fastsat krav biotilgængelig fraktion BEK1625(2017)	biotilgængeligt eller +baggrund BEK1625(2017)	Nationalt fastsat+baggrund BEK1625(2017)
M	MKK bemærkning				
N	Resultat µg/l	0,64	0,24	11	57
O	Ratio ave	0,6	0,1	1,4	3,0
P	Ratio max	0,3	0,0	1,3	0,4

I eksemplet (tabel 11) er det kun resultatet af zink målinger, der er vist (faneblad "MKK oversigt" (Det grønne B1 felt er en drop down menu, hvor man kan vælge parametrene enkeltvis eller alle ("all")). De tre første kolonner fra pivottabellen indeholder vandområde nummeret (som ikke er defineret for 58000192!), observationsstednummeret, der oversættes til et stednavn i kolonne I og antallet af resultater der indgår i middelværdien. De første to stationer har kun 2 og 3 prøvetagninger, og derfor lever AA-EQS ratio middelværdien ikke op til de månedlige prøvetagninger for prioriterede stoffer (men i øvrigt kun Svinninge Å er <1), for de øvrige målinger er zink altid over gennemsnittet for AA-EQS og MAC-EQS ratioen er altid over 1 og derfor lys grøn-gul-røde nuancer.

Farvekodningen er mørk grøn under ratio 1, lys grøn, gul og farveskiftende til rød over ved ratioer lig med eller over 1 (skalaen tilpasser sig den højeste værdi af ratioen for hele datasættet, så hvor den skifter til rød afhænger af data).

I toppen er en opgørelse over antallet af vandområder (H1) analyseret, og hvor mange af værdierne for AA-EQS-ratioen, der i middel var under 1 (J1) og tilsvarende hvor mange MAC-EQS-ratioer, der var under 1 (K1). Den højeste ratio for alle dataene for MAC-EQC er vist nederst i kolonne F.

Tabel 11. "MKK Oversigt". Pivottabel behandling af data /uddrag). Bemærk kun opsummeringen vist: AA-EQS accept OG MAC-EQS accept.

A	B	C	H	I	J	K
Parameter	Zink		22	#stationer... EQS:	12	7
Row Labels	Obs.sted	n	Vandområde	Stednavn	AA-EQS accept	MAC-EQS accept
0	51000636	2	0	Svinninge Å	0,89	1,12
#N/A	58000192	3	#N/A	DALBY SØ	1,15	1,67
34142	49000155	12	34142	AMMENDRUP Å	2,25	6,90
43418	50000145	12	43418	MAGLEMOSERENDE	2,85	3,69
40778	50000405	13	40778	USSERØD Å	1,43	4,64

4.5.2 Vurdering for ferskvand - biota

Der anvendes kun nationalt fastsatte og EU miljøkvalitetskrav for biota i ferskvand, og der er stort set kun kviksølv målinger frem til 2018. Tabel 12 viser resultatet for et mindre udvalg af fisk fra søer.

Kolonne A-N i fanebal DK MKK" gengiver prøvens data og anvendt MKK, i kolonne O er den målte værdi angivet, og ratioen til MKK (Kolonne L) er beregnet i kolonne P, og korrigeret til trofisk niveau 3, fordi det er ferskvands-system i kolonne Q. Da aborren i de størrelser, der normalt fanges, er en top-predator betyder omregning til trofisk niveau 3 en reduktion i kviksølv indholdet (ca. en faktor 5) fra det teoretiske trofiske niveau på 4,2 (fundet i DefaultOmregning fanebladet) og med en trofisk magnificeringsfaktor på 4 (TMF, også fra DefaultOmregning fanebladet). Der er typisk indsamlet og undersøgt fem fisk fra hver sø, så hver sø optræder fem gange i fanebladet "DK MKK". Som for ferskvand - vand samles data med en pivot tabel i fanebladet "DK MKK oversigt" (se nedenfor).

Ratio beregnes ud fra det simple forhold mellem målt værdi (omregnet til µg/kg vådvægt) og MKK både med (kolonne Q) og uden transformation til TL = 3 (Kolonne P). Ligesom for ferskvand-vand er formlen:

$$M2=HVIS(ER.TAL(L2);Dataomregning!O2/L2;"-")$$

For nogle stofgrupper anbefaler den tekniske vejledning (EU 2014), at der omregnes til trofisk niveau 4 for marin og trofisk niveau 3 for ferskvand. Denne omregning foretages på Dataomregnings fanebladet og anvendes til beregning i kolonne Q:

$$N2=HVIS(ER.TAL(L2);Dataomregning!AJ2/L2;"-")$$

Tabel 12. Eksempel på resultat af databehandling for ferskvands biota (OBS: Transponeret fra fanebladet "DK MKK").

A	Lokalitetsnavn	NORSSØ	LUND FJORD	TØMMERBY FJORD	TØMMERBY FJORD
B	ObservationsStedNr	1000044	1000095	1000125	1000125
		NORS SØ - HELE	LUND FJORD HELE	TØMMERBY FJORD	TØMMERBY FJORD
C	ObservationsStedNavn	SØEN	SØEN	HELE SØEN	HELE SØEN
D	Xutm_Euref89	476319	502559	499073	499073
E	Yutm_Euref89	6320842	6329632	6323836	6323836
F	Vandområdenr	14	323	400	400
G	Dato	20120827	20110830	20160817	20160817
H	Latinsk navn	Perca fluviatilis	Perca fluviatilis	Perca fluviatilis	Perca fluviatilis
I	Organ	Muskel	Muskel	Muskel	Muskel
J	Parameter	Kviksølv	Kviksølv	Kviksølv	Kviksølv
K	Param-organ	Kviksølv-Muskel	Kviksølv-Muskel	Kviksølv-Muskel	Kviksølv-Muskel
L	MKK	20	20	20	20
M	MKK type	EQS	EQS	EQS	EQS
		Bek1625(2017) bør korrigeres for muskel-hel fisk faktor			
N	MKK bemærkning	fisk faktor	fisk faktor	fisk faktor	fisk faktor
O	Resultat µg/kg	231	124	111	81
P	Ratio	11,6	6,2	5,6	4,1
Q	Ratio TL=3	2,2	1,2	1,1	0,8

Opsummeringen af data fra vurderingen i fanebladet "DK MKK" samles i en pivot tabel i fanebladet "DK MKK oversigt", og resultaterne farvekodes. Et udvalg af kolonnerne er vist i tabel 13. Selvom der er mest røde nuancer i udsnittet, kan man i toppen (N1 og K2) se, at 3 prøver eller ca. 3% af de 102 områder i alt (K1) faktisk har Max Ratioen <1. Når der anvendes omregning til TL=3 gælder det over 1/3 af vandområderne.

Tabel 13. "MKK Oversigt". Pivottabel behandling af data (uddrag). Bemærk kun opsummeringen vist: AA-EQS accept OG MAC-EQS accept.

B	C	D	K	L	N	O
			102	Vandområder... EQS: % overholdt	3 2,9%	36 35,3%
			Vandområde	Stednavn	Max Ratio	Max Ratio TL=3
Latinsk navn	Obs.nr	n				
Perca fluviatilis	1000044	5	14	NORSSØ	14,60	2,77
Gasterosteus aculeatus	15000115	5	23	TOFTE SØ	2,60	1,72
Perca fluviatilis	30000163	5	39	FÅRESØEN	44,10	8,36
Esox lucius	30000168	2	42	GROV SØ	24,20	5,27
Perca fluviatilis	38000034	5	52	JELS OVERSØ	5,80	1,10

4.5.3 Vurdering for ferskvand -sediment

Der anvendes kun nationalt fastsatte miljøkvalitetskrav for sediment i ferskvand, da der ikke er sediment EQS værdier fra EU, og OSPAR's kriterier kun gælder for marint sediment.

Data fra dataomregningssiden vises, og alle resultater vises som mg/kg TS (4. række i tabel 14, da den er transponeret – 6. Kolonne i regnearket, da ikke alle kolonner er medtaget i tabellen) i faneblad "DK MKK". For de fleste parametre anvendes mg/kg værdien direkte til sammenligningen, men for vanadium kan der fratrækkes en baggrundsværdi. For seks organiske stoffer (ethinyløstradiol, methylnaftalener, nonylphenol, octylphenol, 1,2,4-triazol og tris(2-chlor-1-methylethyl)fosfat (TCPP)) er der angivet en "koncentration x Foc" (organisk fraktion). Disse er tolket som indhold i den organiske fraktion, dvs. koncentration x 100%/TOC indhold i %. Da der ikke er målt TOC i ferskvandssedimenter endnu, anvendes en proxy på 5% TOC (svarende til normaliseringsniveauet i OSPAR). Det betyder, at der anvendes en faktor 20 til Foc. Beregningen af koncentration x Foc er foretaget på fanebladet "Dataomregning" og findes i kolonne AD. For methylnaphthalenerne er det summen af methylnaphthalener (dvs 1-methylnaphthalen + 2-methylnaphthalen + dimethylnaphthalener + trimethylnaphthalen). Der foretages en summering af disse fire stoffer på fanebladet "Dataomregning" og resultatet indsættes i stedet for den målte koncentration af dimethylnaphthalener, og MKK for summen af methylnaphthalener angives for dimethylnaphthalener. Det betyder, at i fanebladet "Dataomregning" er dimethylnaphthalen summen af methylnaphthalener, og derfor det rigtige tal, der skal sammenholdes med MKK værdien. I 4. Kolonne af tabel 14 ses resultatet, idet det første resultat (0,32 mg/kg) erstattes af det anvendte resultat 6,538, hvor der er tillagt 0,007 for de tre øvrige målte methylnaphthalener og ganget med 20 for Foc konvertering. Bemærk at dimethylnaphthalener normalt er den mest betydende af methylnaphthalenerne, så selv om der ikke er målt andre methylnaphthalener vil den normalt være dækkende for niveauet af methylnaphthalener. For octylphenol i kolonne 5 er der ganget med en faktor 20 for Foc konverteringen.

Det skal bemærkes, at der i bekendtgørelse om fastlæggelse af miljømål for ethinyløstradiol i sediment er angivet både en værdi for mg/kg VV og koncentration x Foc, og forholdet imellem disse to er også 20, svarende til den normalisering, der foretages i regnearket, når der ikke er foreliggende data for TOC (eller glødetab – se marine sedimenter).

Modsat metaller i marine områder er der ingen korrelation mellem Al eller ler-silt indhold og de enkelte metaller, og derfor foretages der ikke normalisering i forhold til disse parametre. Der findes en kraftig korrelation mellem de eksisterende data for bly-kobber og zink i vandløb, og lidt mindre i søer, hvor det i stedet er cadmium-kobber-zink og arsen der er stærkt korreleret. Bly og kviksølv er også svagere korreleret, mens krom, aluminium og <63 µm fraktionen i søer ikke er korreleret til de øvrige metaller (se appendiks 2).

Tabel 14. Eksempel på resultat af databehandling sediment ferskvandsdata (OBS: Transponeret fra fanebladet "DK MKK").

Lokalitetsnavn	TØMMERBY FJORD	TØMMERBY FJORD	TØMMERBY FJORD	TØMMERBY FJORD
ObservationsStedNr	1000031	1000031	1000031	1000031
MC-stationsnr	VIB004-001	VIB004-001	VIB004-001	VIB004-001
Startdato	20161031	20161031	20161031	20161031
Resultat mg/kg	11,00000052	0,290000014	0,32	0,01
Parameter	Bly	Cadmium	Dimethylnaphthalener	Octylphenol
MC-stationsnr	VIB004-001	VIB004-001	VIB004-001	VIB004-001
MKK mg/kg	163	2,3	0,478	39,3
Type	MKK	MKK	MKK	MKK
MKK bemærkning	Bek1625(2017)	Bek1625(2017) - baggrund marint	Bek1625(2017) conc x Foc - sum af mono, di og conc x Foc trimethylnaphatalener	Bek1625(2017)
Anvendt mg/kg TS	11,000	0,290	6,538	0,200
Ratio MKK	0,1	0,1	13,4	0,0

Formlen anvendt til beregning af "Anvendt mg/kg" er:

```
M2 = HVIS (ER.TAL (LOPSLAG ($H2;Krite-
rier!$A$2:$I$100;2;FALSK) );HVIS (LOPSLAG ($H2;Krite-
rier!$A$2:$I$100;2;FALSK) =6;F2-LOPSLAG ($H2;Krite-
rier!$A$2:$I$100;7;FALSK) ;HVIS (LOPSLAG ($H2;Krite-
rier!$A$2:$I$100;2;FALSK) =8;Dataomreg-
ning!AD2;HVIS (LOPSLAG ($H2;Krite-
rier!$A$2:$I$100;2;FALSK) =9;Dataomregning!AD2;F2) ) ) ;F2)
```

Der kontrolleres først, om der er en note til parameteren (angivet i B-kolonnen i fanebladet "Kriterier"), hvis det er note 6 (baggrund kan tillægges) fratrækkes baggrundsværdien fra kolonne G på "Kriterier" fanebladet (aktuelle baggrundsværdi indsættes i de grønne felter), hvis den er note 8 eller 9 tages den omregnede værdi for Foc (gange med 20) samt sum af dimethylnaphthalener + øvrige methylnaphthalener, og hvis der ingen noter er det mg/kg TS værdien der anvendes.

Beregning af ratio til MKK er herefter simpel, da alle omregninger ligger i kolonne M:

```
K2 = HVIS (ER.TAL (J2) ;M2/J2; "-" )
```

Hvor kolonne J indeholder opslaget efter et MKK for den givne parameter (hvor summen af methylnaphthalener er "Dimethylnaphthalen" angivet som parameter på "Kriterier" fanebladet, som vist under bemærkninger).

Der foretages efterfølgende en aggregering af data ved hjælp af en pivottabel. Da der kun er en type MKK, vurderes ratioen mellem det målte (og normaliserede) tal direkte med MKK'erne, og den maksimale ratio vises på fanebladet, hvis der er udtaget flere prøver på en station/område.

Tabel 15. "Opsummering DK MKK" Pivottabel behandling af data (uddrag).

Rækkenavne	Maks. af Ratio MKK	Antal af Ratio MKK	Max Ratio
VIB004-001	13,68	53	13,7
Antracen	0,06	1	0,1
Bly	0,07	1	0,1
Cadmium	0,13	1	0,1
Dimethylnaphthalener	13,68	1	13,7

4.5.4 Vurdering for marin biota

Der er anvendt tre typer miljøkvalitetskrav og -kriterier for marin biota (se tabel 16): Nationalt fastsatte marine miljøkvalitetskrav (DK MKK), EU's biota-EQS værdier og OSPARs BAC/EAC kriterier. Da der er lidt forskel i behandlingen af dem, har de fået hvert sit faneblad med vurderinger, som tager hensyn til forskellene i måden, de skal bruges.

Tabel 16. Oversigt over beregningsfaneblade marint biota.

Fane	Funktion
DK MKK	Sammenligning af data med MKK og EQS
OSPAR BAC-EAC	Sammenligning af data med OSPAR BAC og EAC værdier

Tabel 17. Eksempel på resultat af databehandling for MKK i marine biota data (OBS: Transponeret fra fanebladet "DK MKK").

A	Lokalitetsnavn	Langerak	Langerak	Langerak	Langerak
B	ObservationsStedNr	90000911	90000911	90000911	90000911
C	ObservationsStedNavn	LIM-3718-2	LIM-3718-2	LIM-3718-2	LIM-3718-2
D	Xutm_Euref89	574599	574599	574599	574599
E	Yutm_Euref89	6316500	6316500	6316500	6316500
F	MC-stationsnr	LIM-3718-2	LIM-3718-2	156	LIM-3718-2
G	Dato	20151027	20151027	20151027	20151027
H	Latinsk navn	Mytilus edulis	Mytilus edulis	Mytilus edulis	Mytilus edulis
I	Delprøvenummer	14558	14558	14559	14558
J	Organ	Alle bløddele	Alle bløddele	Alle bløddele	Alle bløddele
K	Parameter	Bly	Cadmium	Kviksølv	Antracæn
L	Param-organ	Bly-Alle bløddele	Cadmium-Alle bløddele	Kviksølv-Alle bløddele	Antracæn-Alle bløddele
M	MKK	110	160	20	2400
N	MKK type	MKK	MKK	4	MKK
O	MKK bemærkning	Bek1625(2017)	Bek1625(2017)	4	Bek1625(2017)
P	Resultat µg/kg VV	163,9	89,4	19,0944	0,5
Q	Ratio	1,5	0,6	0,95	0,0
R	Tario TL=4	1,5	0,6	30,55	0,0

Der foretages kun simpel sammenligning for at beregne ratioen mellem resultat og MKK:

$$R2=HVIS (ER.TAL (M2) ; M2/M2 ; " - ")$$

Resten af kolonnerne A til P er hentet fra fanebladet "Dataomregning". For Ratio TL=4 anvendes den omregnede koncentration for trofisk niveau 4, og modsat ferskvand er TL = 2 for blåmuslinger, så korrektionen er en faktor 30 til TL = 4. Bemærk at kun kviksølv omregnes til TL = 4, de øvrige metaller biokoncentreres ikke (eller biokoncentrationsfaktoren er ikke fastlagt af EU):

$$R2=HVIS (ER.TAL (M2) ; Dataomregning!AJ2/M2 ; " - ")$$

Ligesom for ferskvand anvendes en pivottabel på data (fanebladet "Oversigt MKK"), men der er ofte ikke særligt mange data for de enkelte vandområder, og som for ferskvand-vand vælger man parameteren (eller "All") i B1 (lysegrønne felt). Modsat ferskvand ser vi igen her, at ved konvertering til TL=4 stiger den målte værdi af især muslinger (TL=2) voldsomt, så ratioen er ca. 30, hvorimod skrubber (*Platichthys flesus*) ligger på TL=4, så der er ingen forskel efter konverteringen. I eksemplet i tabel 18 er vist kviksølv, fordi det er den

parameter, der omregnes til trofisk niveau. Skal overblikket haves for alle med værdier sættes B1 til All.

Også som for ferskvand er antallet af vandområder og stationer vist i K1 og K2, og antallet af prøver (stationer), der overholder EQS/MKK, dvs. har ratio mellem målt værdi og MKK <1, er angivet i N1 og tilsvarende %-andel i K2. Det tilsvarende efter konvertering til TL=4 er vist i O1 og O2.

Tabel 18. Eksempel fra fanebladet "MKK Oversigt". Pivottabel behandling af data (uddrag). Bemærk kun opsummeringen vist: AA-EQS accept OG MAC-EQS accept.

B	C	D	K	L	N	O
Kviksølv			31	Stationer... EQS:	31	0
			58	% overholdt	46,6%	0,0%
		Values	Vandområde	Stednavn	Max Ratio	Max Ratio TL=4
Latinsk navn	Obs.nr.	n				
Mytilus edulis	FRB65	2	1	FRB65	2,36	75,62
Mytilus edulis	KBKLYN	1	6	KBKLYN	3,91	125,24
	M31	3		M31	1,59	50,94
Platichthys flesus	MCR230010	2	11	MCR230010	6,77	6,77
Mytilus edulis	STOVJS51014	1	25	STOVJS51014	0,51	16,42

Fanebladet "OSPAR BAC-EAC" fungerer på samme måde som "DK MKK", men sammenligner med OSPAR BAC (baggrundsværdier) og EAC (OSPAr's tidligere udgave af "EQS" lignende værdier).

4.5.5 Vurdering for marin sediment

Tabel 19. Oversigt over beregningsfaneblade marin biota.

Fane	Funktion
DK MKK	Sammenligning af data med MKK
OSPAR BAC-EAC	Sammenligning af data med OSPAR BAC og EAC værdier efter normalisering

For vurdering af marin sediment i forhold til nationalt fastsatte MKK er det kun normalisering af data for organiske parametre i forhold til indhold af organisk stof (TOC), der er relevant. Denne normalisering foretages direkte i fanebladet "DK MKK" under ratio (kolonne N):

```
N=IF(ISNUMBER(J2);IF(K2="OC";(Dataomregning!AG2*100/Dataomregning!AE2)/J2;Dataomregning!AG2/J2);"-")
```

For OSPAR-vurderingerne i forhold til BAC, EAC og ERL anvendes i stedet fanebladet "Dataomregning", og der sammenlignes med BAC værdien og EAC/ERL værdier fra "kriterier" fanebladet, hvor den ønskede normalisator (Al, Li, TOC eller tørvægt) også er angivet (se 4.4.5 ovenfor).

De normaliserede værdier i kolonne AG for mg/kg TS, AH for 2,5% TOC, AI for 8% Al og AJ for 52 mg/kg Li fra fanebladet "Dataomregning" anvendes direkte i fanebladet "OSPAR BAC-EAC-ERL" ved sammenligningen med OSPARs BAC (kolonne Q) og ERL/EAC værdier (kolonne R), og farveskalaen blå (under BAC) –grøn (over men tæt på ERL) og gul (over ERL, sandsynligvis påvirkning) anvendes på resultatet (tabel 20):

Q:=IF (M2<>"i.d."; IF (M2="A1";Dataomregning!\$AI2/K2; IF (M2="TOC";Dataomregning!\$AH2/K2; IF (M2="Li";Dataomregning!\$AJ2/K2;Dataomregning!\$AG2/K2))) ; "-")

R:=IF (N2<>"i.d."; IF (N2="A1";Dataomregning!\$AI2/L2; IF (N2="TOC";Dataomregning!\$AH2/L2; IF (N2="Li";Dataomregning!\$AJ2/L2;Dataomregning!\$AG2/L2))) ; "-")

Table 20 Eksempler på resultater af databehandling fra fanebladet "DK MKK" for OSPARs vurderingskriterier (OBS: Transponeret fra fanebladet).

H	Parameter	Cadmium	Kviksølv	Tributyltin (TBT)
I	CAS_nr	7440439	7439976	688733
J	mg/kg TS	0.17	0.238	0.006344
K	BAC	0.31	0.07	i.d.
L	ERL/EAC	1.2	0.25	0.0008
M	BAC basis	Li	Li	i.d.
N	EAC/ERL basis	Li	Li	TOC
O	Bemærkning	OSPAR 2016	OSPAR 2016	i.d.
P	<i>i.d.= Ikke defineret</i>			
Q	Ratio BAC	1.0	6.4	-
R	Ratio EAC	0.3	1.8	5.9

4.6 Videre anvendelse af ratio data

De frembragte ratioer kan anvendes direkte via "oversigts" fanebladene for maksimal værdier, eller i en "CHASE" model for aggregering af de enkelte parametre på en måde som minimerer muligheden for at "fortynde" parametre med høje ratioer ved at måle mange med lave ratioer.

CHASE anvendes pt. i HELCOM på miljøfarlige stoffer, og kan kombinere både indenfor og imellem matricer. Nærmere beskrivelse af CHASE kan findes i Andersen et al (2016).

4.7 Nogle bemærkninger til kriterierne

Man skal være opmærksom på, at de gældende kan blive miljøkvalitetskrav ændret, så regnearkene skal opdateres, hvis der sker ændringer i de etablerede miljøkvalitetskrav, eller i OSPARs vurderingskriterier, ligesom nye miljøkvalitetskrav eller vurderingskriterier bør tilføjes. Kriterierne i denne rapport og de tilhørende regneark er fra OSPARs 2016 rapport, og miljøkvalitetskravene fra december 2017.

Der er enkelte "stavefejl" på fanebladet "Kriterier", som skyldes STANDAT eller STANCODE listen og det faktum at kriterierne hentes ved at sammenligne teksten fra ODA og "Kriterier" fanebladet. Det drejer sig om naphthalen, som er stavet naphthalen. Man skal også være opmærksom på, at det er nonylphenoler, ikke nonylphenol eller Nonylphenol (NP), der anvendes.

Bemærk, at dimethylnaphthalen i regnearkene erstattes af summen af methyl-naphthalener før vurdering foretages.

5. Referencer

Bemærk: Alle links til dokumenter fungerede ultimo 2017, men kan ikke garanteres at virke fremadrettet.

Andersen, Jesper H.; Murray, Ciarán; Larsen, Martin Mørk; Green, Norman; Høgåsen, Tore; Dahlgren, Elin; Garnaga-Budré, Galina; Gustavson, Kim; Haarrich, Michael; Kallenbach, Emilie M.F.; Mannio, Jaakko; Strand, Jakob; Korpi-nen, Samuli. (2016) Development and testing of a prototype tool for integrated assessment of chemical status in marine environments. I: Environmental Mo-nitoring and Assessment, Bind 188, 115, 2016.

Miljø- og Fødevarerministeriet (2016) BEK nr 1001 af 29/06/2016. Bekendtgø-relse om overvågning af overfladevandets, grundvandets og beskyttede områders tilstand og om naturovervågning af internationale naturbeskyttel-sesområder

Miljø- og Fødevarerministeriet (2017) BEK nr 1625 af 19/12/2017. Bekendtgø-relse om overvågning af overfladevandets, grundvandets og beskyttede områders tilstand og om naturovervågning af internationale naturbeskyttel-sesområder (erstatter BEK 439 fra 2016)

Bak, J. & Larsen, M.M. 2014: Baggrunds niveau for barium, zink, kobber, nik-kel og vanadium i fersk- og havvand. Notat fra DCE – Nationalt Center for Miljø og Energi. 9. december 2014

OSPAR (1998) Report of the Third OSPAR Workshop on Ecotoxicological As-sessment Criteria The Hague: 25-29 November 1996.
<https://www.ospar.org/documents?v=6878>

OSPAR Commission (2000). Quality Status Report 2000. OSPAR Commission, London. 108 + vii pp. <https://www.ospar.org/documents?v=6913>

OSPAR (2002) JAMP Guidelines for Monitoring Contaminants in Sediments. 2015 Update. Agreement 2002-16.
<https://www.ospar.org/documents?d=32743>

OSPAR (2004) OSPAR/ICES Workshop on evaluation and update of BRCs and EACs. <https://www.ospar.org/documents?v=6989>

OSPAR (2008) CEMP Assessment Manual. Co-ordinated Environmental Monitoring Programme Assessment Manual for contaminants in sediment and biota. Monitoring and Assessment Series 379
<https://www.ospar.org/documents?v=7115>

EU (2011) Common Implementation Strategy for the Water Framework Di-rective (2000/60/EC) Guidance Document No. 27. Technical Guidance For Deriving Environmental Quality Standards. Technical Report - 2011 - 055

OSPAR (2016) Mercury assessment in the marine environment. Assessment criteria comparison (EAC/EQS) for mercury. Hazardous Substances & Euthrophication Series 679, ISBN 978-1-911458-09-8
<https://www.ospar.org/documents?v=35403>

OSPAR (2017) OSPAR assessment using data extracted from DOME on 30 January 2018 (<http://dome.ices.dk/OSPARMIME2017/main.html>)

EU (2014) Common Implementation Strategy for the Water Framework Directive (2000/60/EC) Guidance Document No. 32 ON BIOTA MONITORING (THE IMPLEMENTATION OF EQSBIOTA) UNDER THE WATER FRAMEWORK DIRECTIVE. Technical Report - 2014 – 083. ISBN 978-92-79-44634-4, doi: 10.2779/833200. (<https://circabc.europa.eu/sd/a/62343f10-5759-4e7c-ae2b-12677aa57605/Guidance%20No%2032%20-%20Biota%20Monitoring.pdf>)

Miljø- og Fødevarerministeriet (2017) BEK nr. 1625 af 19/12/2017 Bekendtgørelse om fastlæggelse af miljømål for vandløb, søer, overgangsvande, kystvande og grundvand

EU (2000) EUROPA-PARLAMENTETS OG RÅDETS DIREKTIV 2000/60/EF af 23. oktober 2000 om fastlæggelse af en ramme for Fællesskabets vandpolitiske foranstaltninger

EU (2008) EUROPA-PARLAMENTETS OG RÅDETS DIREKTIV 2008/105/EU af 16. december 2008 om miljøkvalitetskrav inden for vandpolitikken, om ændring og senere ophævelse af Rådets direktiv 82/176/EØF, 83/513/EØF, 84/156/EØF, 84/491/EØF og 86/280/EØF og om ændring af Europa-Parlamentets og Rådets direktiv 2000/60/EF

EU (2013) EUROPA-PARLAMENTETS OG RÅDETS DIREKTIV 2013/39/EU af 12. august 2013 om ændring af direktiv 2000/60/EF og 2008/105/EF for så vidt angår prioriterede stoffer inden for vandpolitikken

Larsen, M.L. & Pedersen, B. 2001: Tungmetaller – normalisering af sedimentdata. – I: Henriksen et al. 2001: Marine områder 2000 - Miljøtilstand og udvikling. NOVA 2003. Danmarks Miljøundersøgelser. – Faglig rapport fra DMU nr. 375, s. 65-71. http://www.dmu.dk/1_viden/2_Publikationer/3_fagrapporter/rapporter/FR375.pdf

Larsen, Martin Mørk; Strand, Jakob (2016) **Miljøfarlige stoffer og biologiske effekter**. I Videnskabelig Rapport nr. 208, Marine områder 2015: NOVANA. red. / Jens Würigler Hansen. Aarhus Universitet, DCE - Nationalt Center for Miljø og Energi, 2016. s. 101-119. <http://dce2.au.dk/pub/SR208.pdf>

Larsen, MM, Strand, J & Boutrup, S (2017) **Udredning af metode til databehandling og datavurdering af miljøfarlige stoffer i vand, sediment og biota fra vandløb, søer og kystvande**, 34 s., jan. 12, 2017. Notat fra DCE - Nationalt Center for Miljø og Energi. http://dce.au.dk/fileadmin/dce.au.dk/Udgivelser/Notater_2017/Notat_MFS_databehandling_131212_rev_170112.pdf

Larsen M.M. (2018) Omregningsmetoder for miljøfarlige stoffer i fisk. Med særlig fokus på Kivksølv, Faglig rapport fra DCE, under udarbejdelse

6. Appendiks

Gennemgang af de individuelle regneark i appendiks 1 og oversigt over korrelationsanalyser for metaller i sediment fra søer og vandløb i appendiks 2.

6.1 Eksempel regneark

De 5 eksempel regneark dækker følgende dataudtræk.

6.1.1 Ferskvand_sø publicer.xls/Ferskvand_vandløb publicer.xls

Ferskvands vand består faktisk 2 eksempler, et for sø og et for vandløb. Regnearket er det samme, der er bare indsat data fra sø hhv. vandløbs programmet. På grund af forskelligt indhold i ODA for søer og vandløb kan man ikke behandle søer og vandløb i samme regneark, da kolonnerne har forskelligt indhold og overskrift. De data, der anvendes i regnearkene er dog ens, så regnearket kan læse de rigtige kolonner uanset om det er sø eller vandløbsdata der indsættes – så længe det er enten eller.

Vandløbs datasættet består af med metal data fra 2013 til 2018, der repræsenterer op til 27 vandområder.

Sø datasættet består af 2021 resultater fra op til 10 vandområder, fortrinsvis metaller men også PAH'er og flygtige dichlor-forbindelser, målt fra 1971 til 2007. Der var ikke nyere data til rådighed på udtrækstidspunktet.

6.1.2 Biota_fersk publicer.xls

Regnearket indeholder alle data frem til 2017, i alt 105 vandområder og 560 linier resultater for kviksølv i filet (det eneste der indtil 2017 er målt).

6.1.3 Ferskvand sediment publicer.xls

Regnearket indeholder sø-data fra 2011-2016 fra region Sjælland og region Hovedstaden, i alt 2167 resultater.

6.1.4 Biota_marint publicer.xls

Regnearket indeholder alle data fra 2015, pt. det seneste år hvor alle data for NOVANA marint er blevet indberettet. I alt 4444 resultater, fra 31 farvandsområder (flere repræsenteret med flere stationer).

6.1.5 Marint_sediment publicer.xls

Regnearket indeholder alle data fra 2015, pt. det seneste år hvor alle data for NOVANA marint er blevet indberettet. I alt 2791 resultater, fra 25 farvandsområder (flere repræsenteret med flere stationer).

6.2 Korrelation af metaller i sediment

For marine sedimenter ses en kraftig korrelation mellem de fleste metaller og Li, Al og <63 µm sedimentfraktionen (ler-silt). Et tilsvarende forhold gør sig ikke gældende for ferskvand, hvorfor det vurderes ikke at være en fordel at normalisere ferskvandssedimenter for metaller for ler-silt.

Korrelation af metaller i vandløbssedimenter. Ingen signifikante korrelation til <63 µm sedimentfraktion eller aluminium (Al) observeret.

	Al	As	Pb	Cd	Cr	Cu	Hg	Ni	<63	Zn
Al	1									
As	0,421	1								
Pb	0,204	0,783	1							
Cd	0,369	0,939	0,746	1						
Cr	0,278	0,087	0,099	0,036	1					
Cu	0,031	0,938	0,729	0,942	0,027	1				
Hg	0,065	0,807	0,729	0,603	0,078	0,564	1			
Ni	0,501	0,170	0,132	0,217	0,096	0,024	0,189	1		
<63	0,093	0,170	-0,045	0,042	0,021	0,064	-0,004	0,115	1	
Zn	0,252	0,949	0,812	0,926	0,065	0,928	0,697	0,196	0,091	1

Aluminium vs. <63 µm fraktion for vandløbssedimenter (n=xxx, data fra ODA 2010-2016). Der er ingen sammenhæng, og derfor bør Al ikke anvendes som proxy for <63 µm fraktionen, ligesom der ikke er nogen sammenhæng mellem hverken Al eller <63µm fraktionen og de enkelte metaller.

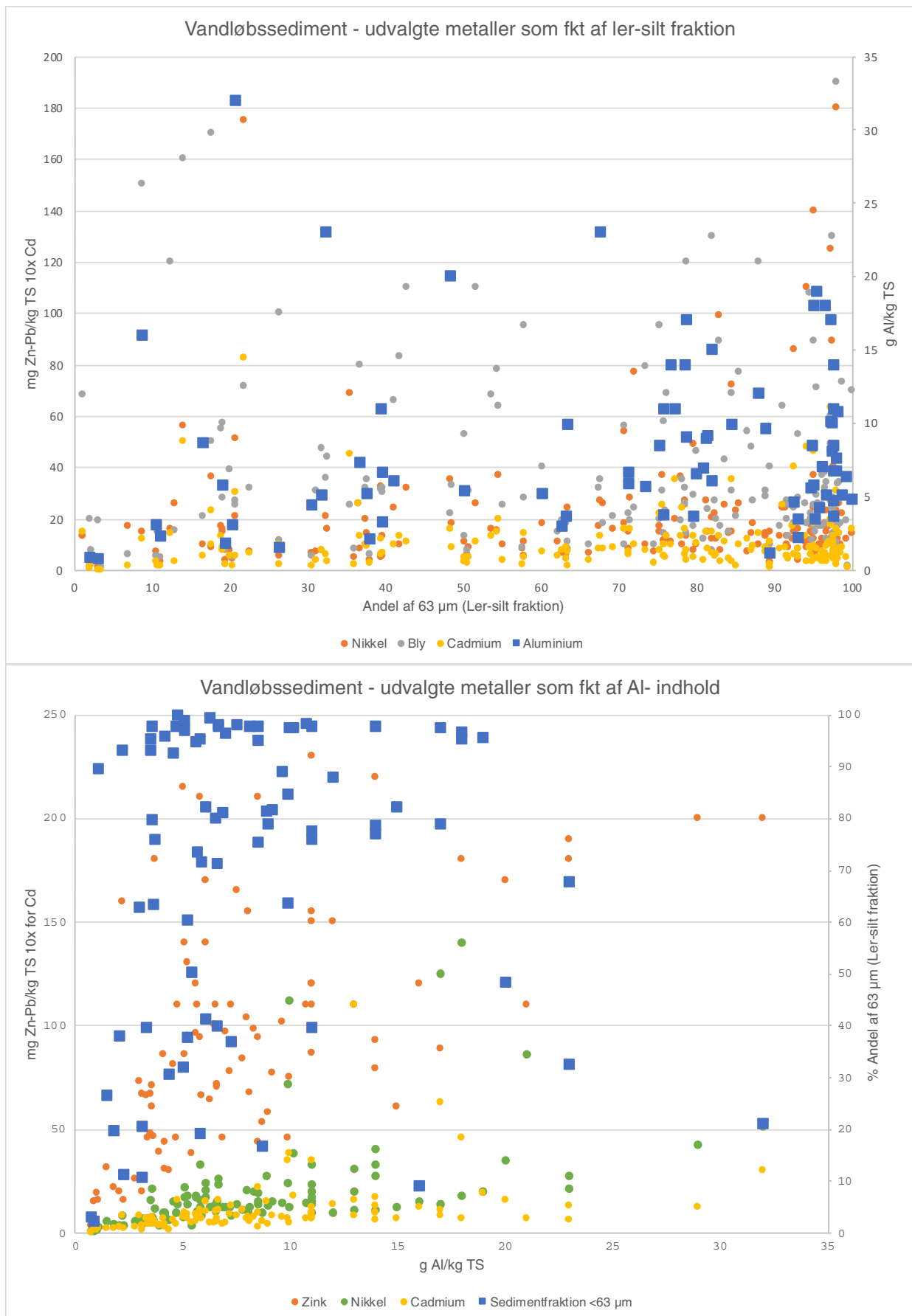
Korrelation af metaller i søsedimenter. Der er ikke værdier for <63µm sedimentfraktion eller aluminium i datasættet fra ODA 2010-2016.

	Bly	Cadmium	Kobber	Kviksølv	Nikkel	Zink
Bly	1					
Cadmium	0,302	1				
Kobber	0,907	0,324	1			
Kviksølv	0,637	0,831	0,700	1		
Nikkel	0,481	0,808	0,454	0,718	1	
Zink	0,932	0,430	0,935	0,728	0,606	1

Korrelation af metaller i marinesedimenter (n=227, ODA data fra 2010-2016).

	TOC	Glødetab	Aluminium	Lithium	Arsen	Bly	Cadmium	Kobber	Kviksølv	Nikkel	Zink
TOC	1										
Glødetab	0,939	1									
Aluminium	0,466	0,508	1								
Lithium	0,640	0,751	0,731	1							
Arsen	0,552	0,649	0,554	0,768	1						
Bly	0,701	0,745	0,501	0,701	0,575	1					
Cadmium	0,800	0,798	0,372	0,516	0,490	0,670	1				
Kobber	0,653	0,711	0,396	0,574	0,505	0,769	0,658	1			
Kviksølv	0,400	0,408	0,214	0,290	0,304	0,725	0,455	0,623	1		
Nikkel	0,710	0,810	0,643	0,909	0,784	0,777	0,668	0,669	0,416	1	
Zink	0,772	0,825	0,534	0,738	0,637	0,844	0,742	0,859	0,576	0,823	1

Se også figur 5 ovenfor for sammenhængen mellem TOC og glødetab.



Figur 6. Øverst: <63 µm fraktion vs aluminium, Ni, Pb og Cd for vandløbssedimenter (n=189, data fra ODA 2010-2016). Nederst: Aluminium vs. <63 µm fraktion, Zn, Ni og Cd for vandløbssedimenter (n=105, data fra ODA 2010-2016). Der er ingen sammenhæng, og derfor bør Al ikke anvendes som proxy for <63 µm fraktionen, ligesom der ikke er nogen god sammenhæng mellem hverken Al eller <63µm fraktionen og de enkelte metaller.

6.3 OSPAR normaliserings grundlag for sedimenter

Som optakt til OSPARs 2010 Quality Status Report blev der lavet en gennemgang af sediment data for normalisering som beskrevet i afsnit 3.7. Der er også set på hvordan usikkerheden kan beregnes, dette er dog ikke udbygget i regnearket for sediment, men usikkerhedsfaktorerne er angivet nedenfor som S_{Cm} og S_{Nm} (absolutte usikkerheder for stof og normalisator x) og V_{Cm} er den relative variationskoefficient.

Par	ParDescription	Enhed	Digestion	C _x or N _x	S _{Cx} or S _{Nx}	S _{Cm} or S _{Nm}	V _{Cm}	Nss
CB101	2,2',4,5,5'-pentachloro-biphenyl	µg/kg	nn	0	0,05	0,05	0,1	
CB118	2,3',4,4',5-pentachloro-biphenyl	µg/kg	nn	0	0,05	0,05	0,1	
CB138	2,2',3,4,4',5'-hexachloro-biphenyl	µg/kg	nn	0	0,05	0,05	0,1	
CB153	2,2',4,4',5,5'-hexachloro-biphenyl	µg/kg	nn	0	0,05	0,05	0,1	
CB180	2,2',3,4,4',5,5'-heptachloro-biphenyl	µg/kg	nn	0	0,05	0,05	0,1	
CB28	2,4,4'-trichlorobiphenyl	µg/kg	nn	0	0,05	0,05	0,1	
CB52	2,2',5,5'-tetrachlorobiphenyl	µg/kg	nn	0	0,05	0,05	0,1	
SCB7	Sum 7 CB	µg/kg	nn	0	0,05	0,2	0,1	
DIELD	dieldrin	µg/kg	nn	0	0,05	0,05	0,1	
DDEPP	DDE (p,p')	µg/kg	nn	0	0,05	0,05	0,1	
HCHG	gamma-HCH (gamma-hexachlorocyclohexane)	µg/kg	nn	0	0,05	0,05	0,1	
CORG	organic carbon	%	nn	0	0,05	0,05	0,1	2,5
AL		g/kg	Ps	4	4	0,5	0,05	50
LI		mg/kg	Ps	4	5	2	0,03	52
AS		mg/kg	Ps	3	1,5	0,5	0,05	
CD		mg/kg	Ps	0,03	<u>0,06</u>	0,02	0,06	
CR		mg/kg	Ps	13	6	3	0,08	
CU		mg/kg	Ps	1	1,5	0,5	0,05	
HG		mg/kg	Ps	0,03	0,04	0,02	0,05	
NI		mg/kg	Ps	2,5	1,1	3	0,08	
PB		mg/kg	Ps	2	2,2	3	0,08	
ZN		mg/kg	Ps	8	9	3	0,03	
HCB	hexachlorobenzene	µg/kg	nn	0	0,05	0,05	0,1	
TBTIN	tributyltin (TBT)	µg/kg	nn	0	0,05	0,05	0,1	
ANT	anthracene	µg/kg	nn	0	5	3	0,1	
BAA	benzo[a]anthracene	µg/kg	nn	0	5	3	0,1	
BAP	benzo[a]pyrene	µg/kg	nn	0	5	3	0,1	
BGHIP	benzo[ghi]perylene	µg/kg	nn	0	5	3	0,1	
CHR	chrysene	µg/kg	nn	0	5	3	0,1	
FLU	fluoranthene	µg/kg	nn	0	5	3	0,1	
ICDP	indeno[1,2,3-cd]pyrene	µg/kg	nn	0	5	3	0,1	
NAP	naphthalene	µg/kg	nn	0	3	3	0,1	
PA	phenanthrene	µg/kg	nn	0	5	3	0,1	
PYR	pyrene	µg/kg	nn	0	3	3	0,1	
TRI	triphenylene	µg/kg	nn	0	3	3	0,1	
MF63	Fraction <63 µm	%	nn	0	0,5	0,5	0,03	115
MF20	Fraction <20 µm	%	nn	0	0,5	0,5	0,03	85
MF16min	Fraction <16 µm after mineralisation	%	nn	0	0,5	0,5	0,03	55
AL		g/kg	TOT	14	6	0,5	0,03	58

AS		mg/kg	TOT	5	3	0,5	0,06	
CD		mg/kg	TOT	0,03	0,06	0,5	0,08	
CR		mg/kg	TOT	13	6	0,5	0,05	
CU		mg/kg	TOT	3	1	0,5	0,06	
HG		mg/kg	TOT	0,03	0,04	0,02	0,05	
LI		mg/kg	TOT	7	5	2	0,05	52
NI		mg/kg	TOT	4	2,2	3		
PB		mg/kg	TOT	9	3	3	0,08	
ZN		mg/kg	TOT	13	5	3	0,03	
AL		g/kg	Pw	3	2,2	0,5	0,03	40
AS		mg/kg	Pw	1,5	1,5	0,5	0,06	
CD		mg/kg	Pw	0,03	0,06	0,02		
CR		mg/kg	Pw	10	6	3	0,05	
CU		mg/kg	Pw	1	1	0,5	0,06	
HG		mg/kg	Pw	0	0,04	0,02	0,05	
LI		mg/kg	Pw	3	2	2	0,05	40
ZN		mg/kg	Pw	8	9	3	0,03	
AL		g/kg	nn	4	4	0,5	0,03	50
AS		mg/kg	nn	3	1,5	0,5	0,06	
CD		mg/kg	nn	0,03	0,06	0,02	0,08	
CR		mg/kg	nn	13	6	3	0,05	
CU		mg/kg	nn	1	1	0,5	0,6	
HG		mg/kg	nn	0	0,04	0,02	0,005	
LI		mg/kg	nn	4	5	2	0,05	52
NI		mg/kg	nn	2,5	1,1	3	0,08	
PB		mg/kg	nn	2	2,2	3	0,08	
ZN		mg/kg	nn	8	9	3	0,03	
HG		mg/kg	Pe	0,03	0,04	0,02	0,05	
NONE	no	g/g	nn	0	0	0	0	1
SPA3r	Sum of 3r PAH, 2 compounds	µg/kg	nn	0	6	6	0,1	
SPA4r3	Sum of 4r PAH, 3 compounds	µg/kg	nn	0	9	9	0,1	
SPA4r4	Sum of 4r PAH, 4 compounds	µg/kg	nn	0	12	12	0,1	
SPA6r	Sum of 6 PAH, 2 compounds	µg/kg	nn	0	6	6	0,1	

[Tom side]

VÆRKTØJ TIL HÅNDBLÆRING OG BEHANDLING AF DATA FOR MILJØFARLIGE FORURENENDE STOFFER

Der er udviklet 5 regneark til vurdering af data fra NO-VANA overvågning af miljøfarlige forurenende stoffer. Data ekstraheres fra ODA til regnearkene eller indtastes direkte. Der foretages vurdering over for danske og EU-fastsatte miljøkvalitetskrav for ferskvand, ferskvands-biota og -sediment, og derudover OSPARs BAC baggrunds- og EAC/ERL miljøkriterier for marint biota og sediment. Alle data normaliseres og omregnes til de korrekte enheder i regnearkene. Alle omregninger er beskrevet i rapporten.