



Sveriges lantbruksuniversitet  
Swedish University of Agricultural Sciences

KompetensCentrum för Kemiska  
Bekämpningsmedel (CKB)

Gustaf Boström, Nicholas Jarvis, Mikaela Gönczi och Jenny Kreuger

# **Förslag till ny beräkningsmetod för predikterade miljökoncentrationer (PEC) för växtskyddsmedel i ytvatten**

**Underlagsrapport till Växtskyddsrådet 2019**

---

**Kompetenscentrum för kemiska bekämpningsmedel  
Sveriges lantbruksuniversitet**

**Uppsala 2019**

**Centre for Chemical Pesticides  
Swedish University of Agricultural Science**

---

KompetensCentrum för Kemiska Bekämpningsmedel

**CKB**

**Förslag till ny beräkningsmetod för predikterade miljökoncentrationer (PEC) för växtskyddsmedel i ytvatten**

Underlagsrapport till Växtskyddsrådet 2019

Kompetenscentrum för kemiska bekämpningsmedel, CKB  
Sveriges lantbruksuniversitet, SLU. 2019

# Innehållsförteckning

Sammanfattning.....	1
1. Inledning.....	3
2. Metod.....	3
2.1 Beräkning av PEC CKB – grunder.....	3
2.2 Beräkning av FOCUS PEC Step 1.....	5
2.3 Beräkning av slutgiltigt PEC CKB – med substansspecifikt $K_{foc}$ .....	5
2.4 PEC och $K_{foc}$ från EFSA Conclusions.....	6
2.5 PEC och doser från Kemikalieinspektionens produktgodkännande.....	6
2.6 Jämförelse av olika PEC mot miljöövervakningsdata (MEC).....	6
2.6.1 Miljöövervakningsdata.....	6
2.6.2 Statistik som beräknas.....	7
2.7 Analys av känslighet för förändringar i $K_{foc}$ .....	8
2.8 Avgränsningar.....	8
3. Resultat.....	9
3.1 Jämförelse av olika PEC mot miljöövervakningsdata (MEC).....	9
3.1.1 Korrelationer med 43 substanser.....	11
3.1.2 Korrelationer med 20 substanser.....	13
3.2 PEC CKB för substanser som sällan detekteras.....	19
3.3 Analys av känslighet för förändringar i $K_{foc}$ .....	20
4. Diskussion.....	21
5. Slutsatser.....	24
6. Tackord.....	24
7. Referenser.....	25
8. Bilagor.....	26
Bilaga 1 – Substanslistor.....	26
Bilaga 2 – Kvoter mellan percentiler av uppmätta halter och PEC CKB.....	28
Bilaga 3 – Beräknad statistik.....	30

# Sammanfattning

Kemikalieinspektionen driver ett långsiktigt projekt för att utreda om miljöriskbedömningen för växtskyddsmedel kan förenklas, så att fokus i arbetet kan läggas på de substanser där det är mest osäkert om de kan godkännas eller inte. Jordbruksverket har genom medel från Växtskyddsrådet, där Jordbruksverket och Kemikalieinspektionen samverkar, gett ett uppdrag till Kompetenscentrum för kemiska bekämpningsmedel (CKB) vid Sveriges lantbruksuniversitet att undersöka om det går att ta fram en ny enkel metod för beräkningar av predikterade koncentrationer i ytvatten (PEC) motsvarande FOCUS Step 1 men mer kopplad till verkliga förhållanden, utan att äventyra skyddsnivån som bedömningen ger. Uppdraget har även inkluderat att jämföra de beräknade koncentrationerna för varje substans mot uppmätta koncentrationer från det nationella miljöövervakningsprogrammet för växtskyddsmedel (NMÖ) 2009-2017 för att göra en bedömning av skyddsnivån.

En enkel ekvation för estimering av ytvattenkoncentrationerna, PEC (Predicted Environmental Concentration,  $\mu\text{g/l}$ ), i små avrinningsområden med en veckas tidsupplösning föreslås. Med olika antaganden och schablonvärdena baserade på resultat från den nationella miljöövervakningen av växtskyddsmedel kan ekvationen förenklas till:

$$PEC = 0,5 D$$

Den fältdos,  $D$ , som använts för beräkningar av PEC CKB har tagits fram utifrån uppgifter från den nationella miljöövervakningen. PEC CKB har också beräknats med den maximalt godkända årliga fältdosen från Kemikalieinspektionens produktgodkännande, för 20 substanser.

Formeln har förfinats med substansspecifika  $K_{\text{foc}}$ -värden genom att den formel för  $F_w$  (andelen av den applicerade mängden som hamnar i ytvattnet snarare än i sediment) som används i beräkningarna för FOCUS Step 1 har använts. Det är PEC-värdet beräknat med den genomsnittliga årliga fältdosen från den nationella miljöövervakningen och inklusive  $F_w$  som i rapporten kallas för PEC CKB.

$$PEC = 0,5 D F_w$$

Jämförelserna med miljöövervakningsdata (Measured Environmental Concentrations, MEC) grundar sig på tre olika dataset:

1. **87 substanser** som har ingått i de kemiska analyserna och haft en registrerad användning inom NMÖ 2009-2017
2. **43 substanser** som har minst en 90:e percentil av uppmätta halter (MEC) och har använts minst 20 gånger under perioden 2009-2017
3. **20 substanser** som har minst en 90:e percentil av uppmätta halter (MEC) och har använts minst 20 gånger under perioden 2009-2017 och där vi har data från Kemikalieinspektionens produktgodkännande.

Resultaten visar att den förslagna metoden för beräkning av estimerade halter i ytvatten i små avrinningsområden med en veckas tidsupplösning (PEC CKB) ger en bra uppskattning av de högsta halterna som kan uppmätas i den nationella miljöövervakningens typområden, utan att vara överdrivet konservativt.

Alla uppmätta halter samt 99:e percentil av MEC och alla olika PEC-värden (PEC CKB, FOCUS PEC Step 1, PEC Step 3 (EFSA) samt PEC Step 3/4 (KemI)) visas i samma figur för de 87 substanser som inkluderats i studien. PEC CKB ligger i många fall mellan PEC Step 3/4 och Step 1 men i 26-55 % av

fallen ligger PEC CKB under PEC Step 3/4. I jämförelse med uppmätta halter så ligger PEC CKB i de allra flesta fall över 99:e percentilen av MEC och i de flesta fall även över den maximalt uppmätta koncentrationen inom NMÖ 2009-2017.

Statistiska korrelationsberäkningar har gjorts för jämförelse mellan alla beräknade percentiler av MEC och PEC CKB (beräknat dels med den genomsnittliga årliga hektardosen som använts inom NMÖ 2009-2017 och dels med den maximalt godkända dosen från Kemikalieinspektionens produktgodkännande, samt med och utan faktorn  $F_w$ ). Jämförelser har också gjorts mellan alla percentiler av MEC och PEC Step 3 eller 4 från Kemikalieinspektionens produktgodkännande (för 20 substanser) samt direkt mot de olika doserna och direkt mot  $F_w$ .

I rapporten redovisas bara korrelationer mot 99:e percentilen av MEC då den generellt sett gav de bästa resultaten. Alla percentiler av MEC-värden och alla beräknade PEC-värden finns i excelfilen ”Rådatarapport 2019-06-27.xlsx” som levererats till Växtskyddsrådets sekretariat. Samtliga korrelationskoefficienter samt andra beräknade mått på sambanden redovisas i Bilaga 3.

Metoden som föreslås för beräkning av estimerade halter i ytvatten (PEC CKB) kan ses som en variant på FOCUS Step 1 där den effektiva utspädningen justeras utifrån information från den nationella miljöövervakningen i Sverige. Resultaten visar att de uppskattade koncentrationerna i ytvatten blir lägre och att fler produkter därmed skulle kunna miljöriskbedömas utan att behöva gå vidare till de mer komplicerade Step 3-beräkningsmetoderna.

Innan PEC CKB eller en liknande metod skulle kunna användas inom den miljöriskbedömning som görs i produktgodkännandet behöver dock ett antal identifierade frågetecken adresseras. Det handlar t.ex. om skyddsnivå, hur risk för vindavdrift ska hanteras samt om de miljöövervakningsdata som använts kan anses vara representativa för samtliga situationer, t.ex. för grödor som inte odlas inom typområdena.

Resultaten från studien tyder på att korrelationen mellan PEC CKB och uppmätta halter är relativt god, trots att den föreslagna beräkningsmetoden är mycket enkel och kräver minimalt med inputdata. Dock finns självklart en del spridning i dataunderlaget och man skulle kunna arbeta för att få en ännu bättre samstämmighet mellan predikterade och uppmätta halter genom att göra fler faktorer ämnesspecifika.

# 1. Inledning

För att ett växtskyddsmedel ska få användas behöver de ingående aktiva substanserna vara godkända på EU-nivå av EU-kommissionen och de enskilda produkterna som ska säljas i Sverige vara godkända av Kemikalieinspektionen. Företagen tar fram omfattande underlag bland annat om substansernas inneboende egenskaper, effektivitet, hälso- och miljöeffekter samt gör simuleringar med modeller som underlag för miljöriskbedömningen. De godkännande myndigheterna granskar och bedömer underlaget samt beslutar om godkännande. Detta är ett mycket omfattande arbete både för företagen och för myndigheterna.

Kemikalieinspektionen driver ett långsiktigt projekt för att utreda om miljöriskbedömningen för växtskyddsmedel kan förenklas, så att fokus i arbetet kan läggas på de substanser där det är mest osäkert om de kan godkännas eller inte. Växtskyddsrådet, där Jordbruksverket och Kemikalieinspektionen samverkar, har gett ett uppdrag till Kompetenscentrum för kemiska bekämpningsmedel (CKB) vid Sveriges lantbruksuniversitet att undersöka om det går att ta fram en ny enkel metod för beräkningar av predikterade koncentrationer i ytvatten (PEC) motsvarande FOCUS Step 1 men mer kopplad till verkliga förhållanden, utan att äventyra skyddsnivån som bedömningen ger. Uppdraget har även inkluderat att jämföra de beräknade koncentrationerna för varje substans mot uppmätta koncentrationer från det nationella miljöövervakningsprogrammet för växtskyddsmedel för att göra en bedömning av skyddsnivån.

## 2. Metod

### 2.1 Beräkning av PEC CKB – grunder

En enkel ekvation för estimering av ytvattenkoncentrationerna, PEC (Predicted Environmental Concentration,  $\mu\text{g/l}$ ), i små avrinningsområden med en veckas tidsupplösning är:

$$PEC = \frac{\sum_{i=1}^{i=n} A_i D_i M_i}{A_c q}$$

där  $n$  är antalet besprutade fält under veckan,  $A$  är fältarean ( $\text{m}^2$ ),  $D$  är fältdosen ( $\text{mg/m}^2$ ),  $M$  är andelen av den applicerade dosen som förloras till ytvatten,  $q$  är avrinningen under veckan (m) och  $A_c$  är avrinningsområdets area ( $\text{m}^2$ ). Om vi antar att både  $D$  och  $M$  är konstanta, får vi:

$$PEC = \left[ \frac{A_s}{A_c q} \right] D M$$

där  $A_s$  är den besprutade arean under veckan ( $\text{m}^2$ ), vilket i sin tur också kan beskrivas som:

$$A_s = \frac{f A_c}{N_s}$$

där  $f$  är andelen av avrinningsområdets yta som är besprutad varje år och  $N_s$  är sprutsäsongens längd i veckor. Detta ger:

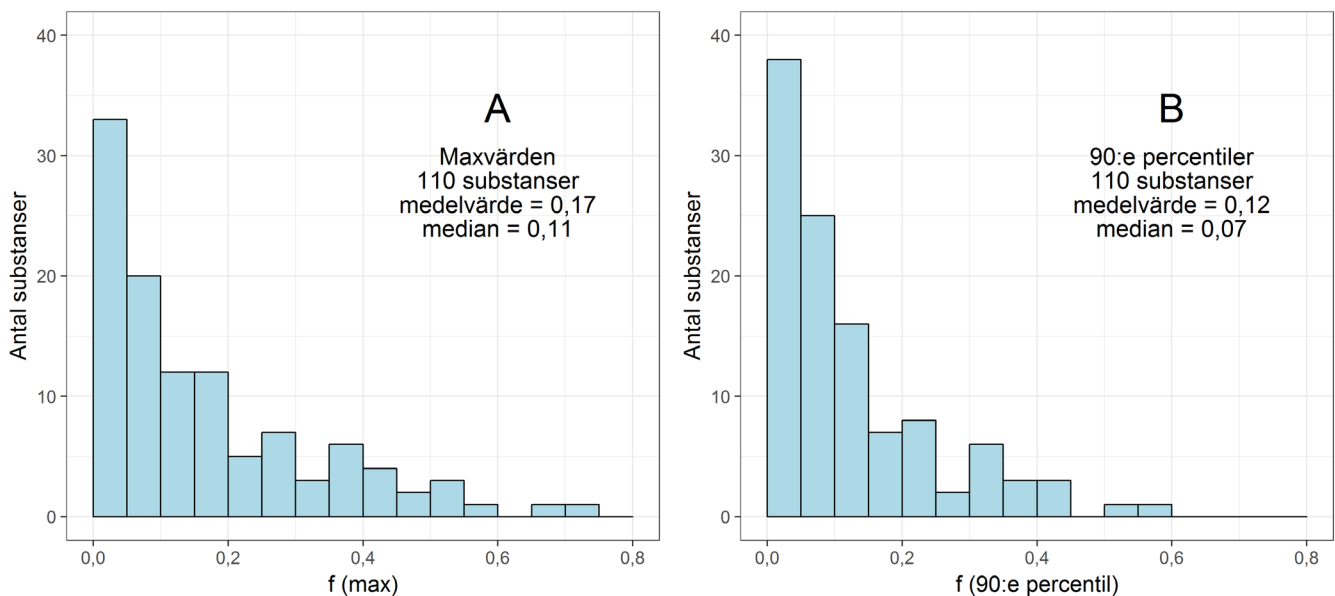
$$PEC = \left[ \frac{f}{N_s q} \right] D M$$

Termerna  $\left[\frac{A_s}{A_c q}\right]$  och  $\left[\frac{f}{N_s q}\right]$  i de ovanstående ekvationerna är effektiva utspädningsfaktorer som tillåter extrapolering från fältskalan till ett helt avrinningsområde.

Värden för de ingående parametrarna har satts utifrån generell kunskap baserad på resultat från typområdena vilka undersöks inom den nationella miljöövervakningen av växtskyddsmedel. Vi väljer här värden som kan anses definiera en värsta-falls situation.

- $f = 0,2$

Andelen av avrinningsområdet som är besprutad varje år kan variera kraftigt mellan de olika substanserna beroende på bl.a. vilken gröda de används i. Andelen kan också variera mellan olika områden och från år till år för samma substans. Utifrån data från den nationella miljöövervakningen har  $f$ -värdet per substans, år och område beräknats. I Figur 1 visas histogram av de maximala värdena (A) och 90:e percentilen (B) av områdets andel som besprutats ( $f$ ) beräknat per substans, område och år. Schablonvärdet 20 % har valts som ett genomsnittsvärde som dock är konservativt för de flesta substanserna.



**Figur 1.** Histogram över substansers maximala (A) och 90:e percentil (B) andel av de fyra typområdenas avrinningsområde som besprutats ( $f$ ), beräknat per substans, område och år.

- $N_s = 4$

Sprutsäsongens längd har satts till 4 veckor. Detta kan variera mellan olika substanser och mellan områden och år. Ju kortare säsong desto mer värsta-fall.

- $q = 0,001$  m/vecka

Avrinningen per vecka varierar kraftigt beroende på väder. Det är ofta ganska låg avrinning under sommarperioden. 0,001 m/vecka är en mycket låg avrinning. Ju lägre värde som anges desto mer värsta fall.

- $M = 0,01$

Andelen av den applicerade dosen som förloras till ytvatten varierar mycket beroende på substansegenskaperna samt från tillfälle till tillfälle beroende på markförhållanden samt väder. Baserat på tidigare studier där miljöövervakningsdata använts så är 1 % värsta-

fallsförhållanden. Förluster till ytvatten för flertalet substanser ligger långt under detta värde (Boström et al., 2017; Graaf et al., 2010).

Med de ovanstående schablonvärdena kan den ovanstående ekvationen skrivas om till:

$$PEC = 0,5 D$$

Den fältdos,  $D$ , som använts för beräkningar av PEC CKB har tagits fram utifrån uppgifter från den nationella miljöövervakningen 2009-2017 (se avsnitt 2.6 nedan). I miljöövervakningens typområden genomförs årligen en inventering av odling och användning av växtskyddsmedel genom intervjuer med lantbrukarna inom respektive område. Utifrån dessa uppgifter har en genomsnittlig fältdos beräknats för varje substans (g aktiv substans / behandlad areal / år). Om samma fält har behandlats flera gånger på ett år, har arealen inte räknats flera gånger.

PEC CKB har också beräknats med den maximalt godkända årliga fältdosen från Kemikalieinspektionens produktgodkännande, för 20 substanser.

## 2.2 Beräkning av FOCUS PEC Step 1

FOCUS Step 1 är den metod som används för registrering av växtskyddsmedel som ett första kraftigt värsta-falls-steg för att beräkna PEC (FOCUS, 2001) vid fältkanten. Den formel som används är:

$$PEC = \left[ \frac{A_f}{A_w Z_w} \right] D M F_w$$

där  $A_f$  är fältarean,  $A_w$  och  $Z_w$  är arean ( $m^2$ ) och djup (m) på vattenrecipienten och  $F_w$  är andelen av den applicerade mängden som hamnar i vattnet snarare än i sediment. Denna parameter beräknas med en enkel jämvikts adsorptionsekvation som beror på ämnets  $K_{oc}$ -värde ( $cm^3/g$ ) och konstanta värden för vattendjupet (= 0,3 m), tjockleken av adsorberande sediment,  $Z_s$  (= 0,01 m), volymvikt,  $\gamma$  (= 0,8  $g/cm^3$ ), och organisk kolhalt,  $f_{oc}$  (= 0,05  $kg/kg$ ):

$$F_w = \frac{Z_w}{Z_w + (Z_s \gamma K_{oc} f_{oc})}$$

Recipienten antas ha en yta som är tio gånger mindre än fältarean. Dessa antaganden betyder att faktorn  $A_f/(A_w Z_w)$  i praktiken sätts till 33,3  $m^{-1}$ . Förluster till ytvatten i FOCUS sker både via vindavdrift och ytavrinning/dränering. Det antas att 10 % av dosen hamnar i recipienten via ytavrinning/dränering (d.v.s.  $M = 0,1$  i detta fall). Därutöver tillkommer förluster till ytvatten via vindavdrift men vi bortser från denna transportväg här. Resultatet av alla dessa antaganden blir:

$$PEC = 3,33 D F_w$$

vilket ger koncentrationer i ytvatten som är en faktor 6,66 gånger högre (= 3,33/0,5) än metoden för PEC CKB, om  $F_w$  sätts till 1 (d.v.s. att allt hamnar i vattnet och ingen andel i sedimentet). Man får också komma ihåg att FOCUS Step 1-beräkningarna även inkluderar vindavdrift så att de faktiska PEC blir ännu högre i praktiken.

## 2.3 Beräkning av slutgiltigt PEC CKB – med substansspecifikt $K_{foc}$

Formeln för att beräkna PEC har gjorts generell så att den ska kunna användas vid registreringen när man inte vet hur stor andel av ett avrinningsområde som produkten kommer sprutas på eller hur stor



andel som kommer förloras till ytvattnet. Det går dock att justera formeln med mer substansspecifika parametrar. Vi har här använt den formel för  $F_w$  (andelen av den applicerade mängden som hamnar i ytvattnet snarare än i sediment) som används i beräkningarna för FOCUS Step 1 för att korrigera den koncentration som beräknas med PEC CKB enligt:

$$PEC = 0,5 D F_w$$

Detta gör att metoden för det föreslagna PEC CKB blir mer jämförbar med metoden för FOCUS Step 1. För detta krävs substansspecifika  $K_{foc}$ -värden.

Det är PEC-värdet beräknat med den genomsnittliga årliga fältdosen från den nationella miljöövervakningen och inklusive  $F_w$  som i fortsättningen kallas för PEC CKB.

## 2.4 PEC och $K_{foc}$ från EFSA Conclusions

EFSA Conclusions för 219 substanser gicks igenom av CKB i ett projekt finansierat av Naturvårdsverket 2018 och publicerades i en underlagsrapport ”Jämförelser av PEC och PNEC från EFSA med riktvärden och uppmätta halter av växtskyddsmedel i ytvatten” (Berggren et al., 2018). PEC Step 3 för scenarierna D1 och D4, vilka är de som är mest relevanta för svenska förhållanden, noterades och har använts även i detta projekt. Även  $K_{foc}$ -värden som används i denna rapport har tagits från den tidigare sammanställningen av EFSA conclusions.

## 2.5 PEC och doser från Kemikalieinspektionens produktgodkännande

2017 genomförde CKB ett projekt finansierat av Naturvårdsverket där växtskyddsmedel som regelbundet överskrider sina riktvärden för ytvatten undersöktes för bakomliggande orsaker till detta. Resultaten publicerades i CKB rapport 2017:2 (Boström et al., 2017). I samband med det arbetet tillhandahöll Kemikalieinspektionen underlag som använts vid produktgodkännandet för de utpekade 12 substanserna, bl.a. PEC. I detta projekt har de tillhandahållit PEC och kringinformation, bl.a. doser, för ytterligare 10 substanser för att ge ett bredare underlag även med substanser som inte anses som lika problematiska för vattenmiljön.

## 2.6 Jämförelse av olika PEC mot miljöövervakningsdata (MEC)

### 2.6.1 Miljöövervakningsdata

De olika PEC-värdena som behandlas i denna rapport har jämförts med analysdata från den nationella miljöövervakningen av växtskyddsmedel i jordbruksområden (NMÖ) (Lindström et al, 2015; Nanos & Kreuger, 2015). Data har tagits från den ordinarie provtagningen (maj-november) i de fyra s.k. typområdena i Skåne, Halland, Östergötland och Västergötland under åren 2009-2017. Dessa år valdes eftersom de kemiska analysmetoderna varit relativt oförändrade under denna period, med avseende på detektions- och kvantifieringsgränser samt hanteringen av spårhalter. Typområdena har valts ut för att representera små avrinningsområden (8-16 km<sup>2</sup>) med intensivt jordbruk (85-92 % åkermark) i de fyra olika jordbruksregionerna de är belägna i.

I NMÖ:s typområden (bäckar) sker tidsintegrerad provtagning med hjälp av automatiska ISCO-provtagare som tar ett delprov var 90:e minut under en vecka. Dessa samlingsprov visar medelkoncentrationen för de substanser som passerat i vattendraget under veckan.

De uppmätta halterna har därefter rensats, per år och område, så att bara uppmätta halter från de år då någon användning av substansen skett i området har behållits. Detta eftersom man inte kan förvänta

sig att uppmäta några betydande halter av en substans om den inte använts och för att dessa nollvärden inte ska påverka den följande beräkningen av percentiler.

Sammanlagt fanns underlagsdata för 87 substanser som både har ingått i de kemiska analyserna och haft en registrerad användning inom NMÖ 2009-2017.

Ur alla uppmätta halter (Measured Environmental Concentration, MEC) har sedan olika percentiler av MEC (Maxhalt; 99:e, 97,5:e, 95:e och 90:e percentil) beräknats för varje substans. Beräkningarna baseras på samtliga värden, dvs inklusive nollvärden (halter under detektionsgränsen). Så kallade spårhalter, halter mellan detektionsgräns och kvantifieringsgräns är rapporterade som numeriska värden och har också ingått i beräkningarna av percentilerna.

## 2.6.2 Statistik som beräknas

För att bedöma samstämmigheten mellan de predikterade halterna (PEC) och uppmätta halter i miljön (MEC) så beräknas fyra olika statistiska mått:

- Mean Absolute Error (MAE):

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |MEC_{Si} - PEC_{Si}|$$

Där "n" är det totala antalet substanser som ingår i analysen, "MEC<sub>Si</sub>" är en percentil för uppmätta halter i miljön för den "i:onde" substansen Si och "PEC<sub>Si</sub>" är den predikterade halten i miljön för samma substans.

MAE är medelvärdet av absolutvärdena för skillnaderna mellan den uppmätta halten och den predikterade halten för alla substanser. I punktdiagrammen som visas i resultatavsnittet så kan MAE tolkas som medelavståndet mellan punkterna och 1:1-linjen, både i horisontellt och vertikalt led.

MEC<sub>Si</sub> som testas i denna rapport är de beräknade percentilerna av uppmätta halter (Maxhalt; 99 %; 97,5 %; 95 % och 90 %). PEC<sub>Si</sub> som testas i denna rapport är PEC CKB beräknat med genomsnittliga årliga fältdoser från den nationella miljöövervakningen, PEC CKB beräknat med den maximala årliga fältdosen från Kemikalieinspektionens produktgodkännande och PEC Step 3/4 från Kemikalieinspektionens produktgodkännande.

- Bias:

$$Bias = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (MEC_{Si} - PEC_{Si})$$

Bias är medelvärdet av skillnaderna mellan den uppmätta halten och den predikterade halten för alla substanser. Bias kan vara positivt eller negativt, medan MAE bara kan vara positivt. Bias indikerar därmed om modellen (de predikterade halterna) har en tendens att systematiskt över- eller underskatta de uppmätta halterna.

- Root Mean Square Error (RMSE):

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (MEC_{Si} - PEC_{Si})^2}$$

RMSE har en mindre rättfram tolkning än MAE och Bias eftersom skillnaden mellan MEC och PEC för varje substans kvadreras innan ett medelvärde beräknas och kvadratroten tas ur detta medelvärde. Kvadreringen av skillnaderna gör att stora fel får en väldigt stor effekt på RMSE och det är därmed känsligt för outliers. RMSE är dock ett ofta använt mått på samstämmigheten mellan predikterade och observerade värden.

- Korrelationskoefficient (Pearsons's):

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (MEC_{Si} - \overline{MEC})(PEC_{Si} - \overline{PEC})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (MEC_{Si} - \overline{MEC})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (PEC_{Si} - \overline{PEC})^2}}$$

Korrelationskoefficienten är ett mått på styrkan och riktningen på det linjära förhållandet mellan två variabler och varierar mellan -1 och 1 där  $\pm 1$  indikerar starkast möjliga förhållande (alla punkter i ett diagram ligger på en rät linje) och 0 indikerar att det inte finns något linjärt förhållande.

De olika statistikmåten bör bara användas för att jämföra "modeller" som har beräknats med samma substanser och med samma typ av referensstatistik (samma percentil av MEC), annars riskerar man felaktiga tolkningar. På grund av detta har två olika delmängder av substanserna valts ut för korrelationsanalyserna (Bilaga 1)

1. 43 Substanser som har minst en 90:e percentil av uppmätta halter (MEC) och har använts minst 20 gånger under perioden 2009-2017
2. 20 substanser som har minst en 90:e percentil av uppmätta halter (MEC) och har använts minst 20 gånger under perioden 2009-2017 och där vi har data från Kemikalieinspektionens produktgodkännande.

Både MEC och PEC-värden har logtransformerats (bas 10) innan de statistiska måten har beräknats, för att inte stora värden (höga halter) ska få oproportionerligt stor påverkan på resultaten.

## 2.7 Analys av känslighet för förändringar i $K_{foc}$

De två parametrarna i formeln för PEC CKB som är substansspecifika är dos och  $K_{foc}$ .  $K_{foc}$  som anges för samma substans kan variera kraftigt beroende av under vilka förhållanden mätningarna gjorts. En enkel variant av känslighetsanalys har gjorts för att visa hur skillnader i  $K_{foc}$  som används i beräkningarna av PEC CKB påverkar resultaten. Som tidigare nämnts har  $K_{foc}$  från EFSA Conclusions använts och dessa har sedan multiplicerats med 1,1; 1,2; 1,5 och 2,0 för att se hur detta påverkar PEC CKB.

## 2.8 Avgränsningar

Inom den nationella miljöövervakningen analyseras ett mindre antal nedbrytningsprodukter, främst för substanser som har en kort halveringstid. Nedbrytningsprodukter har dock inte inkluderats i denna analys, bland annat på grund av svårigheten med att bestämma hur stor andel av modersubstansen som omvandlas till den specifika nedbrytningsprodukten.

### 3. Resultat

Alla underlagsdata samt grundläggande resultat finns i Excel-filen ”Rådatarapport 2019-06-27.xlsx” levererad till Växtskyddsrådets sekretariat 2019-06-28. Till leveransen bifogas även dokumentet ”Förklaring av parametrar i rådatarapport 2019-06-27.docx”.

#### 3.1 Jämförelse av olika PEC mot miljöövervakningsdata (MEC)

Jämförelserna grundar sig på tre olika dataset (se Bilaga 1):

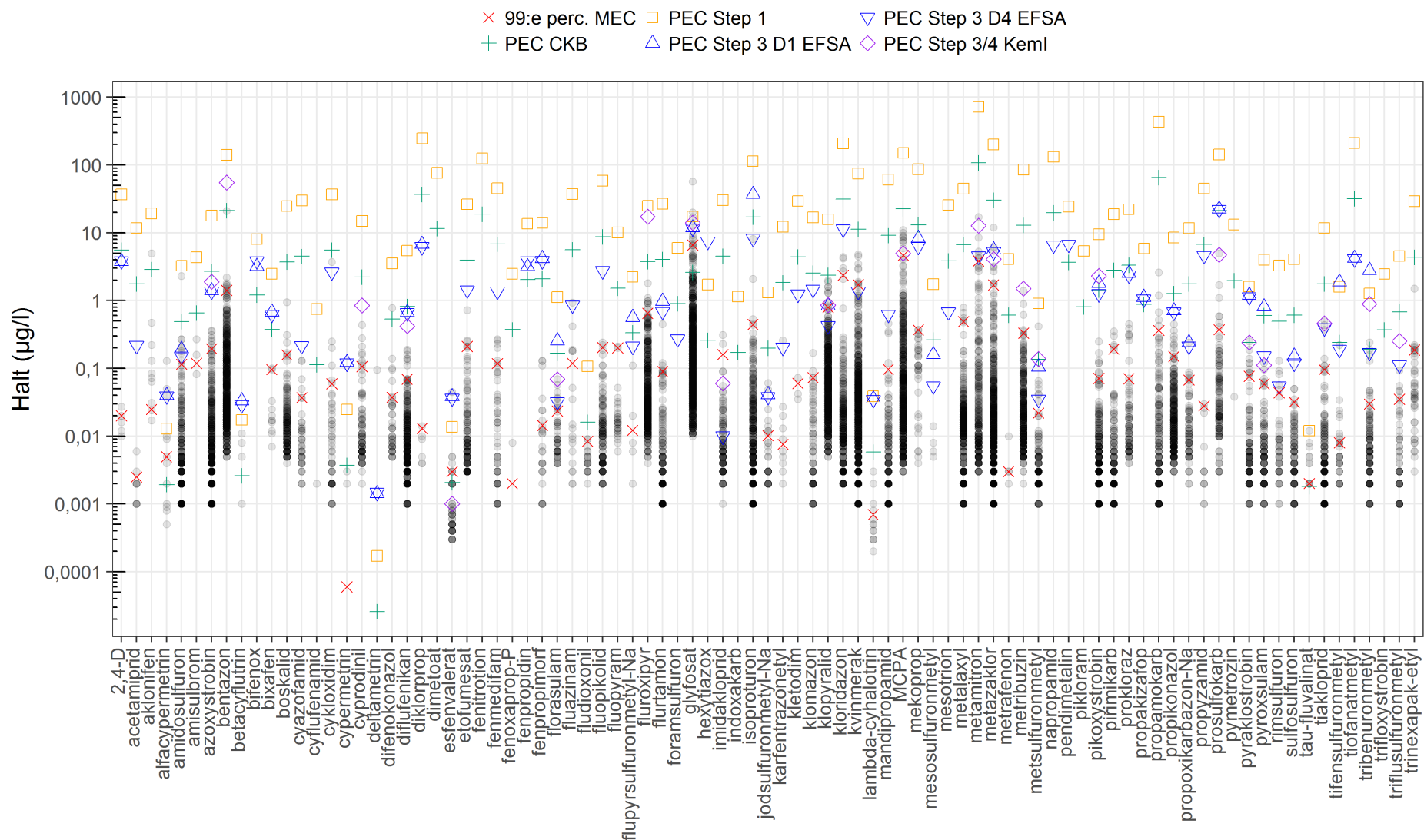
4. **87 substanser** som har ingått i de kemiska analyserna och haft en registrerad användning inom NMÖ 2009-2017
5. **43 substanser** som har minst en 90:e percentil av uppmätta halter (MEC) och har använts minst 20 gånger under perioden 2009-2017
6. **20 substanser** som har minst en 90:e percentil av uppmätta halter (MEC) och har använts minst 20 gånger under perioden 2009-2017 och där vi har data från Kemikalieinspektionens produktgodkännande.

I Figur 2 plottas alla uppmätta halter samt 99:e percentil av MEC och alla olika PEC-värden i samma figur för de 87 substanser som inkluderats i studien. Här kan man se att det så kallade ”tiered approach” följs för de flesta substanserna, alltså att lägre steg i riskbedömningen (Step 1) ger högre PEC-värden än de följande Step 3-, eller Step 4-beräkningarna. Detta gäller dock inte alla substanser (t.ex. alfa-cypermethrin och hexyiazox) där PEC Step 3 är högre. Det är dock viktigt att komma ihåg här att PEC Step 1 som redovisas i diagrammet är beräknat som  $PEC_{CKB} * 6,66$  och inkluderar inte vindavdrift, vilket är en mycket trolig förklaring.

Vad gäller PEC CKB så ligger resultaten i många fall mellan PEC Step 3 och Step 1 men det finns ett flertal undantag där PEC CKB även ligger under PEC Step 3. För 21 av 38 substanser (55 %) ligger PEC CKB under PEC Step 3 D1 från EFSA, för 16 av 62 (26 %) ligger PEC CKB under PEC Step 3 D4 från EFSA och för 6 av 22 (27 %) ligger PEC CKB under PEC Step 3 eller 4 från Kemikalieinspektionens godkännande. I jämförelse med uppmätta halter så ligger PEC CKB dock i de allra flesta fall över 99:e percentilen av MEC och i de flesta fall även över den maximalt uppmätta koncentrationen inom NMÖ 2009-2017. Se Bilaga 2 för kvoter mellan alla beräknade percentiler av MEC och PEC CKB där kvoter över 1 (percentil av uppmätt halt är högre än PEC CKB) har markerats.

Jämförelser har gjorts mellan alla beräknade percentiler av MEC och PEC CKB beräknat dels med den genomsnittliga årliga hektardosen som använts inom NMÖ 2009-2017 dels med den maximalt godkända dosen från Kemikalieinspektionens produktgodkännande, samt med och utan faktorn  $F_w$  som justerar för fördelning mellan vatten och sediment. Jämförelser har också gjorts mellan alla percentiler av MEC och PEC Step 3 eller 4 från Kemikalieinspektionens produktgodkännande samt direkt mot de olika doserna och direkt mot  $F_w$ .

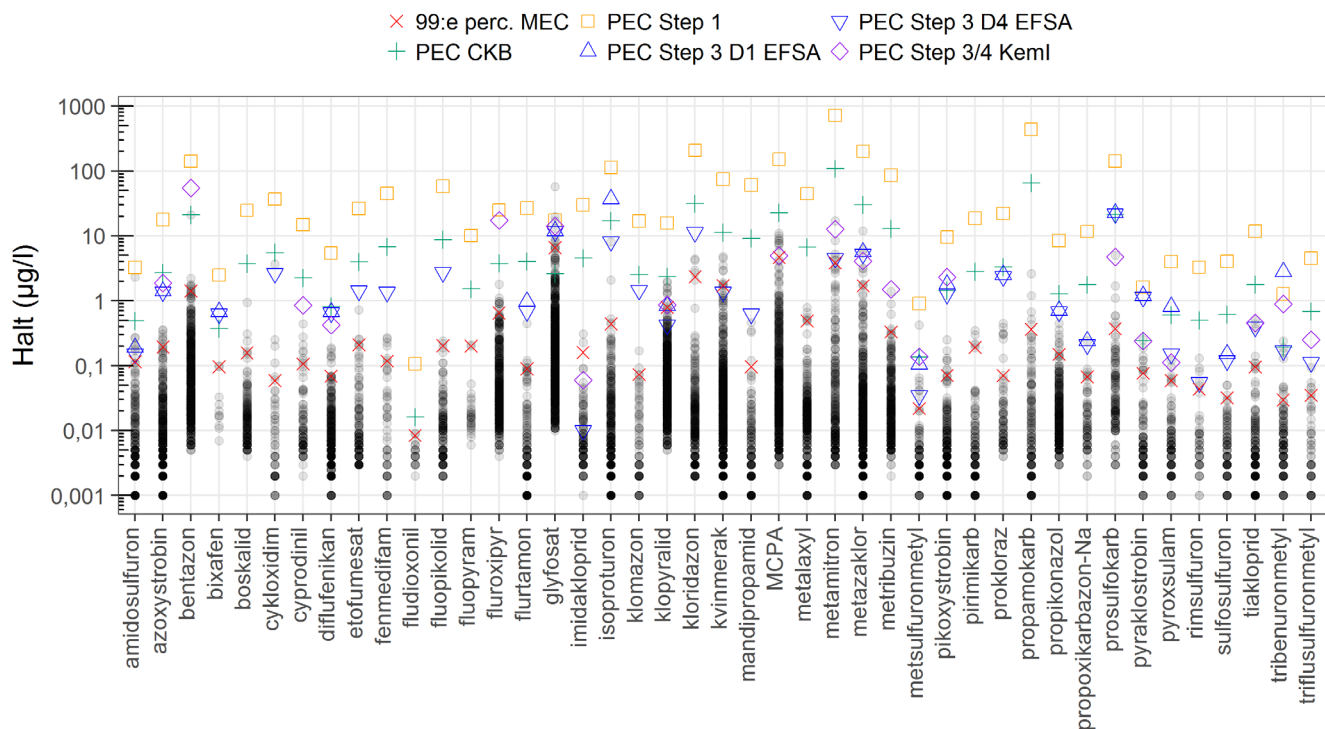
I detta resultatavsnitt redovisas bara korrelationer mot 99:e percentilen av MEC då den generellt sett gav de bästa resultaten. Likaså visas här inte Root Mean Square Error och Mean Absolute Error utan bara Bias då det måttet har en förhållandevis enkel tolkning som medelvärde av skillnaderna mellan den uppmätta halten och den predikterade halten för alla substanser. Alla percentiler av MEC-värden och alla beräknade PEC-värden finns i excel-filen ”Rådatarapport 2019-06-27.xlsx”. Samtliga korrelationskoefficienter samt andra beräknade mått på sambanden redovisas i Bilaga 3.



**Figur 2.** Diagram som visar alla uppmätta halter (MEC, grå till svarta punkter), 99:e percentilen av MEC (röda kryss), PEC CKB (beräknat med den genomsnittliga årliga fältdosen, gröna plus), FOCUS PEC Step 1 (utan vindavdrift, beräknat som PEC CKB \* 6,66, orange kvadrater), PEC Step 3 D1 och D4 från EFSA conclusions (Berggren et al., 2018, blå trianglar) och PEC Step 3 eller 4 från Kemikalieinspektionens produktgodkännande (för 20 substanser; lila romber), för alla 87 substanser som inkluderats i studien. Observera att y-axeln är logaritmisk.

### 3.1.1 Korrelationer med 43 substanser

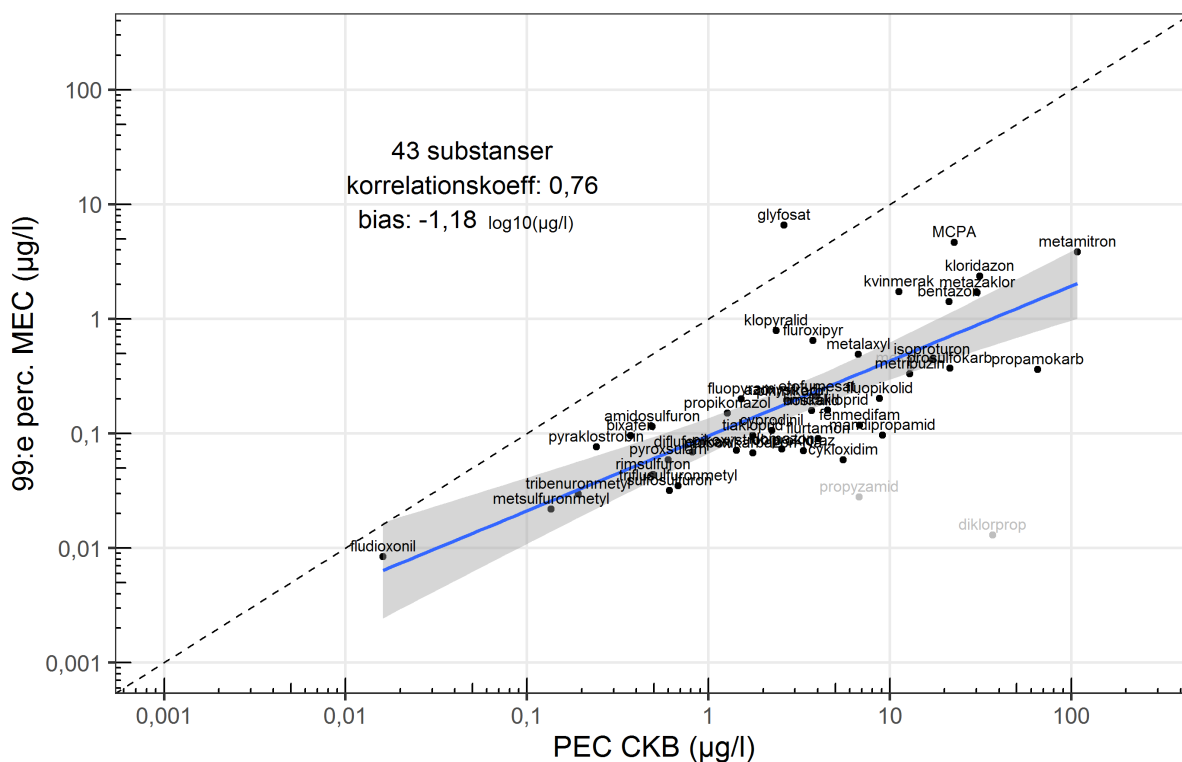
I Figur 3 visas alla MEC- och PEC-data för de 43 substanser som ingår i följande korrelationsberäkningar i detta avsnitt (de substanser som både har en 90:e percentil av MEC samt minst 20 registrerade användningar).



**Figur 3.** Diagram som visar alla uppmätta halter (MEC, grå till svarta punkter), 99:e percentilen av MEC (röda kryss), PEC CKB (beräknat med den genomsnittliga årliga fältdosen, gröna plus), FOCUS PEC Step 1 (utan vindavdrift, beräknat som PEC CKB \* 6,66, orange kvadrater), PEC Step 3 D1 och D4 från EFSA conclusions (Berggren et al., 2018, blå trianglar) och PEC Step 3 eller 4 från Kemikalieinspektionens produktgodkännande (för 20 substanser; lila romber), för de 43 substanser som inkluderats i korrelationsberäkningarna. Observera att y-axeln är logaritmisk.

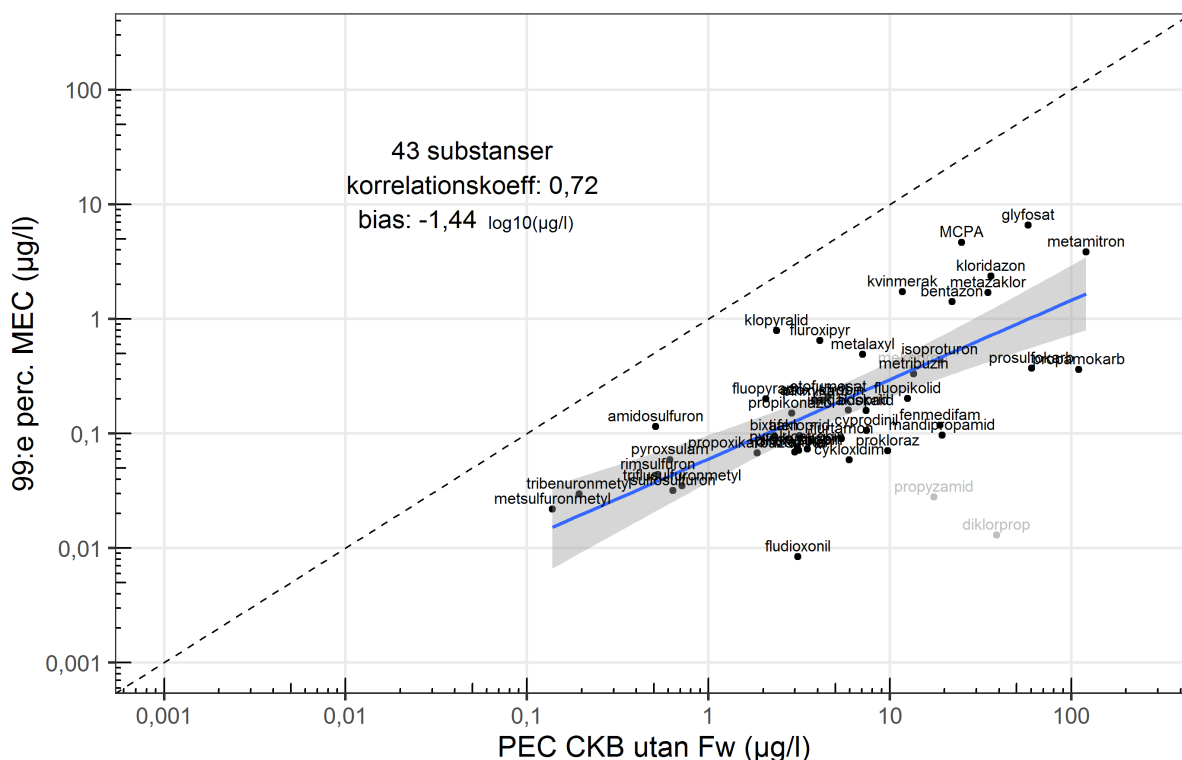
I Figur 4 visas korrelationen mellan PEC CKB, beräknat med den genomsnittliga årliga hektardosen från NMÖ, för 43 substanser och 99:e percentilen av MEC. De tre substanserna propyzamid, diklorprop och mekoprop har 90-percentiler av MEC men har bara använts 4-5 gånger under perioden 2009-2017. De visas i diagrammet som grå punkter men har inte inkluderats i korrelationsberäkningarna.

Glyfosat står ut som den enda av dessa substanser som har ett underskattat PEC CKB jämfört med 99:e percentilen av MEC. Övriga substanser är relativt samlade kring regressionslinjen.



**Figur 4.** Spridningsdiagram av PEC CKB (beräknat med den genomsnittliga årliga hektardosen) mot 99:e percentilen av uppmätta koncentrationer (MEC), inom den nationella miljöövervakningen, för 43 substanser som har minst en 90-percentil av MEC och har använts minst 20 gånger inom NMÖ:s typområden under perioden 2009-2017. Den blå linjen visar den linjära regressionen med 95 % konfidensintervall (grått område kring linjen) och den streckade linjen är  $x=y$ . I figuren visas även korrelations-koefficienten och bias. Tre substanser med 90-percentil men med <20 användningar visas som grå punkter och har inte inkluderats i korrelationsberäkningar. Observera att båda axlarna är logaritmiska.

I Figur 5 visas korrelationen mellan PEC CKB, beräknat med den genomsnittliga årliga hektardosen från NMÖ dock utan faktorn  $F_w$  för fördelning mellan vatten och sediment som baseras på  $K_{foc}$ , för samma 43 substanser och 99:e percentilen av MEC. Korrelationskoefficienten är här något sämre och värdet för bias är lägre vilket tyder på en större överskattning av koncentrationerna då man exkluderar  $F_w$ . Med denna beräkning av PEC CKB är glyfosat dock inte underskattad.

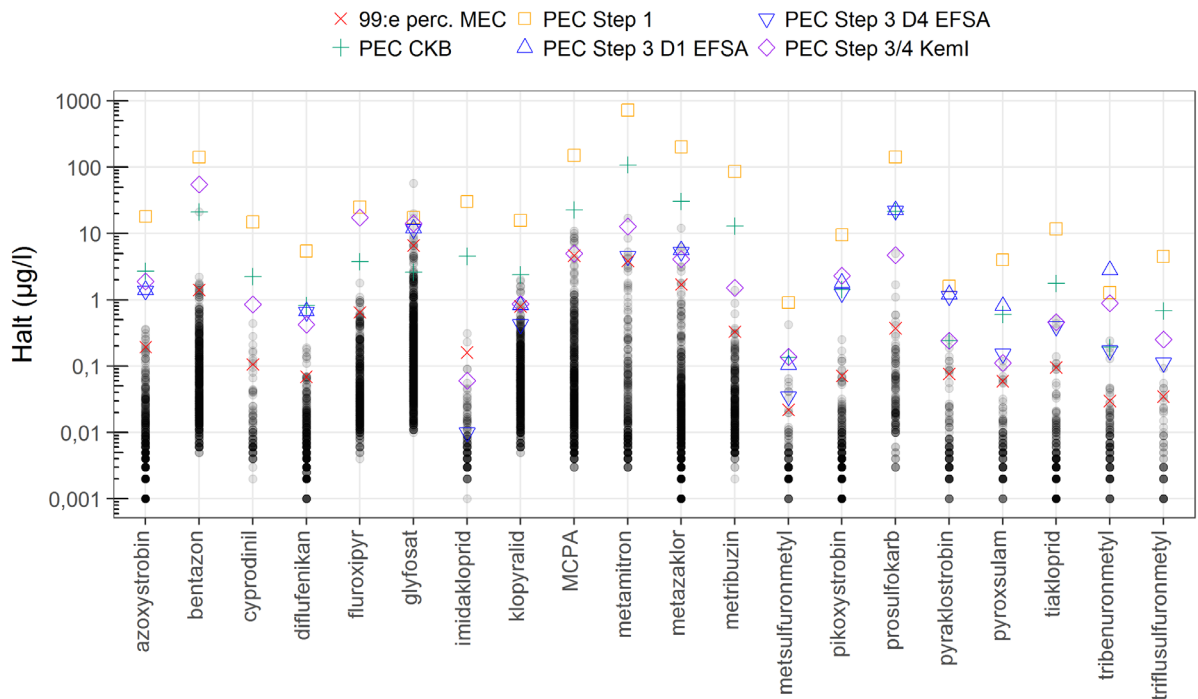


**Figur 5.** Spridningsdiagram av PEC CKB (beräknat med den genomsnittliga årliga hektardosen men utan Fw – fördelningen mellan vatten och sediment) mot 99:e percentilen av uppmätta koncentrationer (MEC), inom den nationella miljöövervakningen, för 43 substanser som har minst en 90-percentil av MEC och har använts minst 20 gånger inom NMÖ:s typområden under perioden 2009-2017. Den blå linjen visar den linjära regressionen med 95 % konfidensintervall (grått område kring linjen) och den streckade linjen är  $x=y$ . I figuren visas även korrelationskoefficienten och bias. Tre substanser med 90-percentil men med <20 användningar visas som grå punkter och har inte inkluderats i korrelationsberäkningar. Observera att båda axlarna är logaritmiska.

### 3.1.2 Korrelationer med 20 substanser

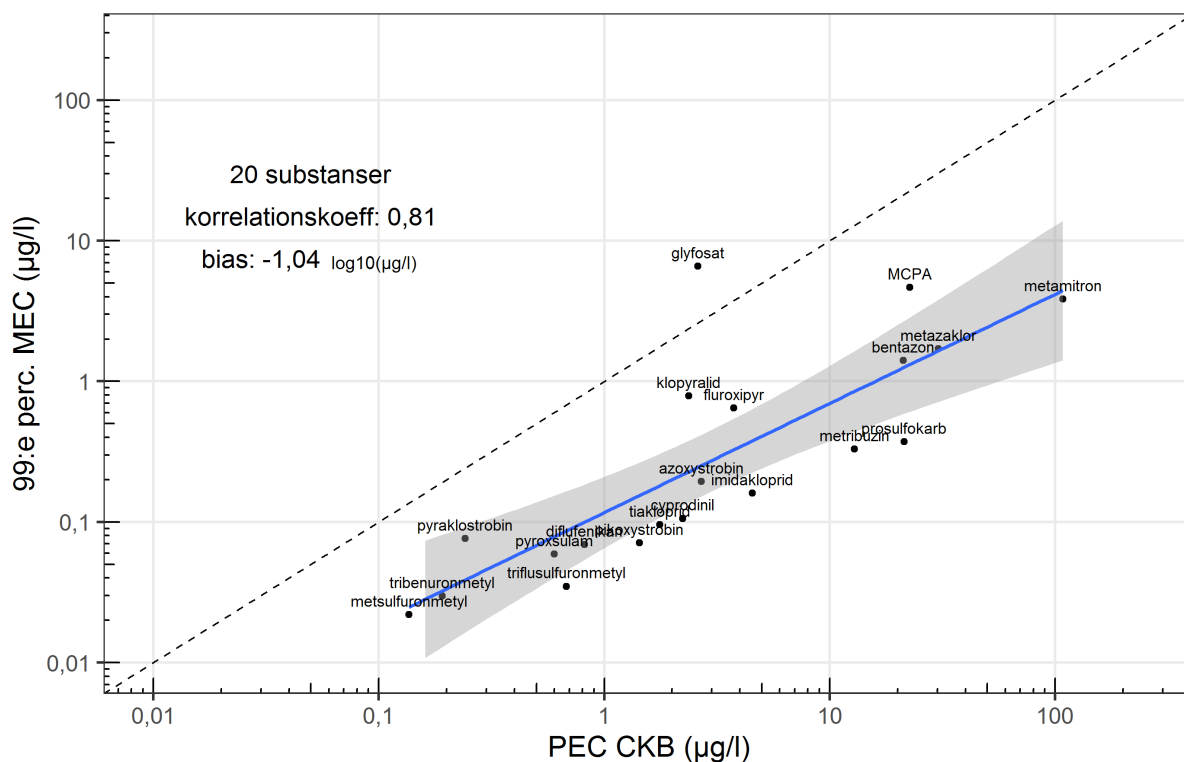
I Figur 6 visas MEC- och PEC-data för de 20 substanser som ingår i följande korrelationsberäkningar i detta avsnitt (de substanser som både har en 90:e percentil av MEC, minst 20 registrerade användningar, samt har data från Kemikalieinspektionens produktgodkännande). Data från kemikalieinspektionens produktgodkännande (pgk) möjliggör en jämförelse av PEC CKB och PEC Step 3 eller 4 som använts vid godkännandet samt en jämförelse av PEC CKB beräknat med den genomsnittligt använda dosen inom NMÖ jämfört med PEC CKB beräknat med den maximalt godkända dosen.



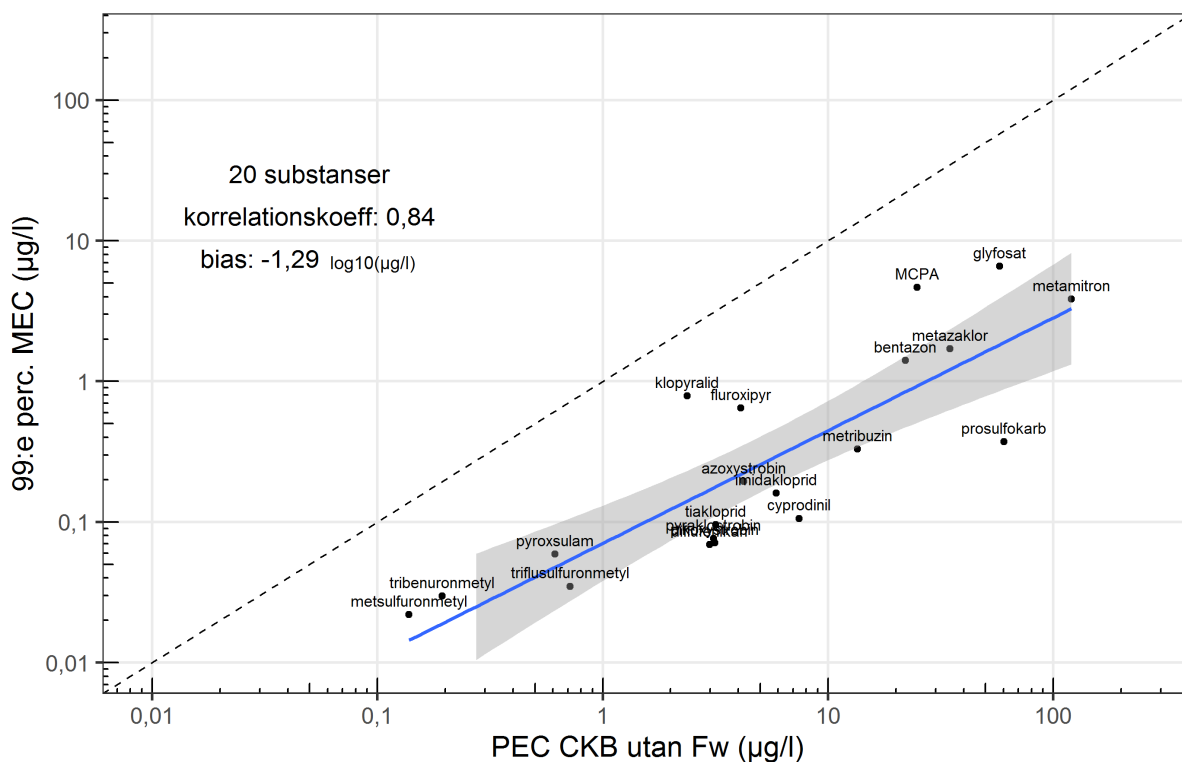


**Figur 6.** Diagram som visar alla uppmätta halter (MEC, grå till svarta punkter), 99:e percentilen av MEC (röda kryss), PEC CKB (beräknat med den genomsnittliga årliga fältdosen, gröna plus), FOCUS PEC Step 1 (utan vindavdrift, beräknat som PEC CKB \* 6,66, orange kvadrater), PEC Step 3 D1 och D4 från EFSA conclusions (Berggren et al., 2018, blå trianglar) och PEC Step 3 eller 4 från Kemikalieinspektionens produktgodkännande (lila romber), för de 20 substanser som inkluderats i korrelationsberäkningarna. Observera att y-axeln är logaritmisk.

I Figur 7 visas samma korrelation mellan PEC CKB och 99:e percentilen av MEC som i Figur 4, fast här bara med de 20 substanser där vi har data från Kemikalieinspektionens produktgodkännande, för att resultaten ska vara jämförbara med efterföljande diagram. Figur 8 motsvarar Figur 5, alltså PEC CKB beräknat utan  $F_w$  jämfört med 99:e percentilen av MEC, men med den mindre delmängden av 20 substanser.

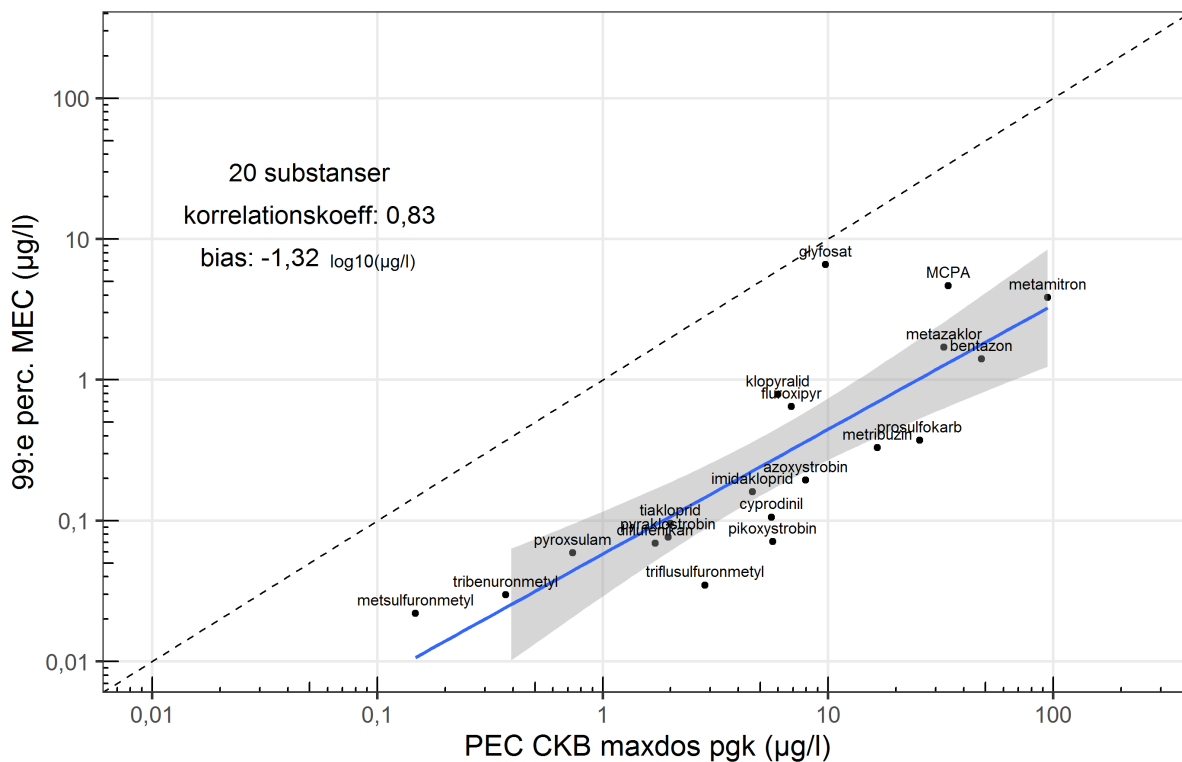


**Figur 7.** Spridningsdiagram av PEC CKB (beräknat med den genomsnittliga årliga hektardosen) mot 99:e percentilen av uppmätta koncentrationer (MEC), inom den nationella miljöövervakningen, för 20 substanser som har minst en 90-percentil av MEC och har använts minst 20 gånger inom NMÖ:s typområden under perioden 2009-2017 samt har uppgifter från Kemikalieinspektionens produktgodkännande. Den blå linjen visar den linjära regressionen med 95 % konfidensintervall (grått område kring linjen) och den streckade linjen är  $x=y$ . I figuren visas även korrelationskoefficienten och bias. Observera att båda axlarna är logaritmiska.



**Figur 8.** Spridningsdiagram av PEC CKB (beräknat med den genomsnittliga årliga hektardosen men utan Fw – fördelningen mellan vatten och sediment) mot 99:e percentilen av uppmätta koncentrationer (MEC), inom den nationella miljöövervakningen, för 20 substanser som har minst en 90-percentil av MEC och har använts minst 20 gånger inom NMÖ:s typområden under perioden 2009-2017 samt har uppgifter från Kemikalieinspektionens produktgodkännande. Den blå linjen visar den linjära regressionen med 95 % konfidensintervall (grått område kring linjen) och den streckade linjen är  $x=y$ . I figuren visas även korrelationskoefficienten och bias. Observera att båda axlarna är logaritmiska.

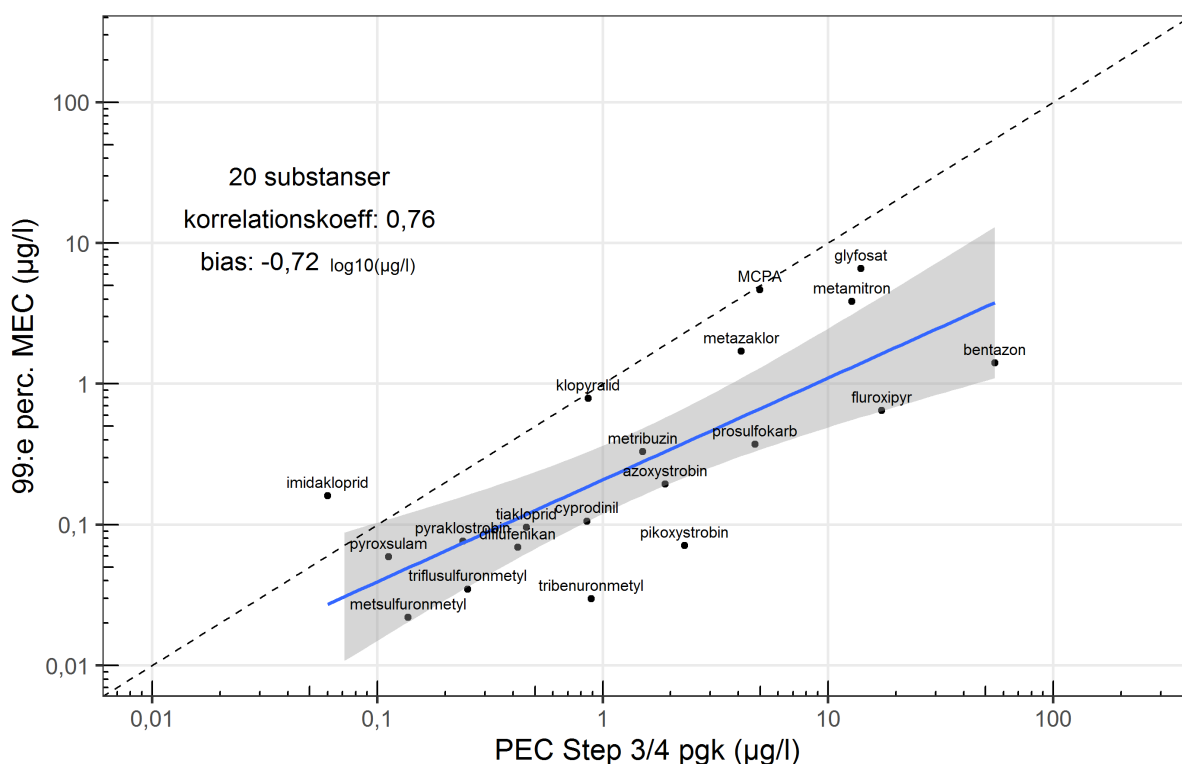
I Figur 9 visas korrelationen mellan PEC CKB beräknat med den maximalt godkända dosen från Kemikalieinspektionens produktgodkännande och 99:e percentilen av MEC. Korrelationskoefficienten är marginellt bättre än för PEC CKB beräknat med den genomsnittliga årliga hektardosen från NMÖ, men bias är högre då de flesta substanserna har fått ett högre PEC CKB. Glyfosat sticker fortfarande ut jämfört med övriga substanser men är inte underskattad jämfört med 99:e percentilen.



**Figur 9.** Spridningsdiagram av PEC CKB (beräknat med den maximala årliga hektardosen enligt Kemikalieinspektionens produktgodkännande (pgk)) mot 99:e percentilen av uppmätta koncentrationer (MEC), inom den nationella miljöövervakningen, för 20 substanser som har minst en 90-percentil av MEC och har använts minst 20 gånger inom NMÖ:s typområden under perioden 2009-2017 samt har uppgifter från Kemikalieinspektionens produktgodkännande. Den blå linjen visar den linjära regressionen med 95 % konfidensintervall (grått område kring linjen) och den streckade linjen är  $x=y$ . I figuren visas även korrelationskoefficienten och bias. Observera att båda axlarna är logaritmiska.

I Figur 10 har PEC CKB beräknats med den maximalt godkända dosen från Kemikalieinspektionens produktgodkännande men utan  $F_w$ .

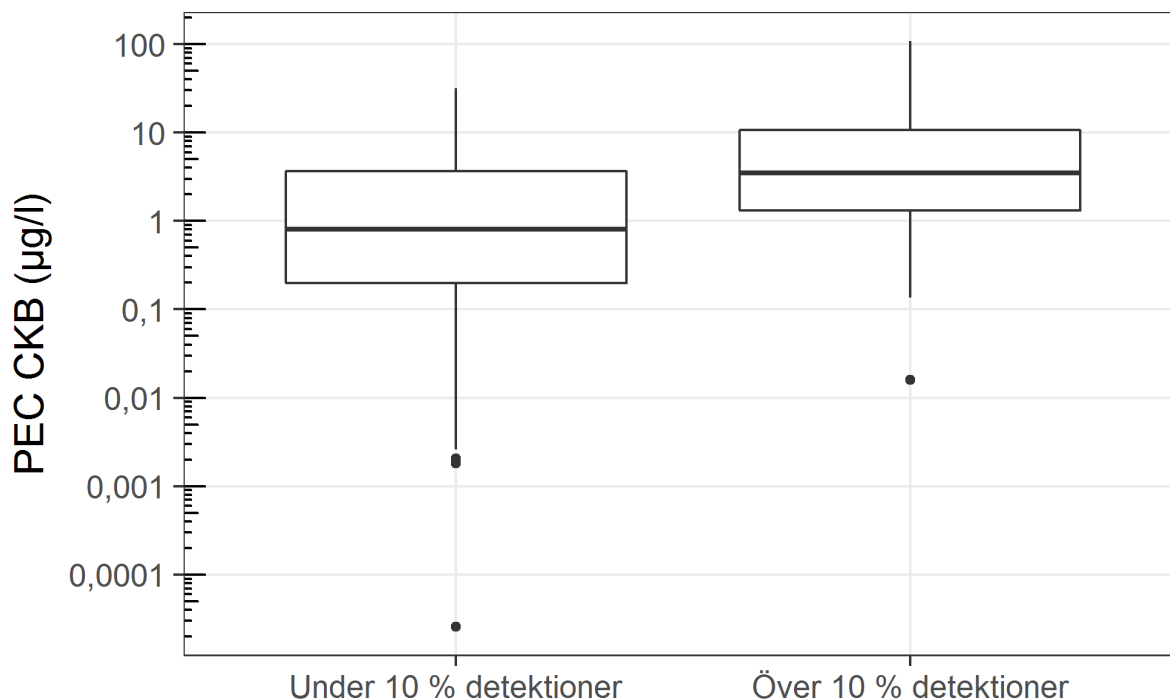




**Figur 11.** Spridningsdiagram av PEC Step 3 eller 4 från Kemikalieinspektionens produktgodkännande (pgk) mot 99:e percentilen av uppmätta koncentrationer (MEC), inom den nationella miljöövervakningen, för 20 substanser som har minst en 90-percentil av MEC och har använts minst 20 gånger inom NMÖ:s typområden under perioden 2009-2017 samt har uppgifter från Kemikalieinspektionens produktgodkännande. Den blå linjen visar den linjära regressionen med 95 % konfidensintervall (grått område kring linjen) och den streckade linjen är  $x=y$ . I figuren visas även korrelationskoefficienten och bias. Observera att båda axlarna är logaritmiska.

### 3.2 PEC CKB för substanser som sällan detekteras

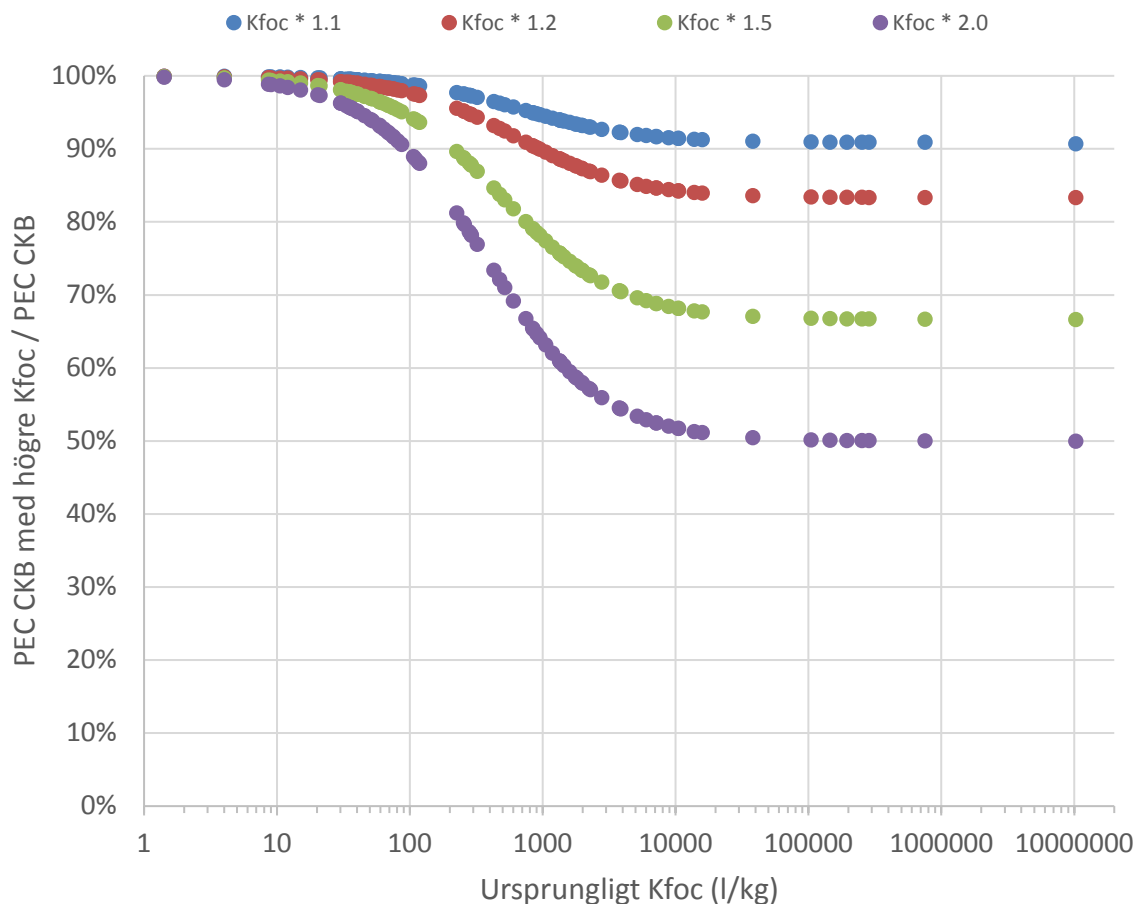
Nackdelen med korrelationsberäkningarna ovan är att de endast hanterar de substanser som uppmäts i minst 10 % av proverna och ger därmed ingen information om hur PEC CKB stämmer för de substanser som sällan eller aldrig uppmäts över detektionsgränsen. För att åskådliggöra hur den föreslagna metoden fungerar för dessa substanser har PEC CKB för substanser med <10 % fyndfrekvens (41 substanser) plottats i en boxplot för jämförelse med PEC CKB för de substanser som har  $\geq 10$  % fyndfrekvens (46 substanser). Här kan man se att PEC CKB för de substanser som har  $\geq 10$  % fyndfrekvens hamnar i ett högre spann och ett t-test visar att det finns en statistiskt signifikant skillnad mellan gruppernas medelvärden ( $p = 0,0004$  för 10-logaritmerade värden och  $p = 0,02$  utan logtransformering).



**Figur 12.** Boxplot av PEC CKB för substanser med över respektive under 10 % detektioner i den nationella miljöövervakningen. Det tjockare horisontella strecket visar medianen, lådan visar 25:e till 75:e percentil och ”morrhåren” visar högsta respektive lägsta värdet som ligger inom 1,5 \* kvartilavståndet från 25:e resp. 75:e percentil. Värderna utanför detta intervall visas som separata punkter. Observera att y-axeln är logaritmisk.

### 3.3 Analys av känslighet för förändringar i $K_{foc}$

Eftersom rapporterade  $K_{foc}$ -värden för samma substans kan variera relativt mycket mellan olika undersökningar görs här ett försök att åskådliggöra hur olika  $K_{foc}$ -värden påverkar resultaten vid beräkning av PEC CKB med den föreslagna metoden. I Figur 13 visas den procentuella förändringen i PEC CKB då  $K_{foc}$  multipliceras med olika faktorer, vid olika ursprungliga värden på  $K_{foc}$ . Man kan här se att den procentuella förändringar blir liten för substanser med låga  $K_{foc}$ -värden ifall  $K_{foc}$  multipliceras med 1,1 - 2,0. För substanser med  $K_{foc}$  på ca 100 och högre börjar påverkan på PEC CKB bli högre och närmar sig asymptotiskt en förminskning med en bestämd faktor vid  $K_{foc}$  på ca 100 000 och högre (t.ex. för  $K_{foc} * 2,0$  blir PEC CKB ca 50 % lägre). En litteraturstudie skulle behöva genomföras för att bestämma hur mycket  $K_{oc}$  och  $K_{foc}$  kan variera mellan olika studier för samma substans.



**Figur 13.** Diagram över skillnaden i PEC CKB (y-axeln) då Kfoc multipliceras med 1,1; 1,2; 1,5 och 2,0 (olika färger) för substanser med olika ursprungligt  $K_{foc}$  (x-axeln). Observera att x-axeln är logaritmisk.

## 4. Diskussion

Metoden som föreslås för beräkning av estimerade halter i ytvatten (PEC CKB) kan ses som en variant på FOCUS Step 1 där den effektiva utspädningen justeras utifrån information från den nationella miljöövervakningen i Sverige. Resultaten visar att de uppskattade koncentrationerna i ytvatten blir lägre och att fler produkter därmed skulle kunna miljöriskbedömas utan att behöva gå vidare till de mer komplicerade Step 3-beräkningsmetoderna.

Innan PEC CKB eller en liknande metod skulle kunna användas inom den miljöriskbedömning som görs i produktgodkännandet behöver dock ett antal identifierade frågetecken adresseras. Till att börja med måste skyddsnivån som PEC CKB ger diskuteras. I denna rapport har PEC CKB framförallt jämförts med 99:e percentilen av MEC men genom att justera schablonvärdena i ekvationen kan PEC CKB förskjutas linjärt för att bättre motsvara någon annan percentil av MEC. Vilken nivå av MEC som PEC CKB ska motsvara är ett ämne för fortsatt diskussion.

En annan aspekt som är mer konceptuellt inbyggd i PEC CKB är att de predikterade koncentrationerna motsvarar halter i utloppet av ett avrinningsområde medan beräkningarna för FOCUS Step 1 ska motsvara de (högre) halter som kan uppkomma vid fältkanten ("edge-of-field"). Att PEC CKB motsvarar koncentrationerna i utloppet av ett avrinningsområde med en veckas upplösning gör att



resultaten är direkt jämförbara med den nationella miljöövervakningen. Hur detta ska relateras till skyddsnivån som krävs enligt godkännandeprocessen måste dock utredas närmare.

Ytterligare en fråga som uppkommit under studiens gång är hur stor del av halter i ytvatten vi kan riskera att missa då PEC CKB inte explicit inkluderar vindavdrift. För de områden som övervakas inom den nationella miljöövervakningen är effekten av vindavdrift på uppmätta halter troligen låg, särskilt i de två områden där större delen av vattendragen är kulverterade. Det går dock inte att utesluta att det i andra områden kan finnas en större påverkan från vindavdrift, särskilt vid besprutning av till exempel fruktträd då vindavdrift kan vara en högst relevant spridningsväg. I FOCUS Step 1 antas att 2,8 % av dosen sprids till recipienten vid besprutning av åkergrödor (FOCUS, 2001). Vid besprutning av vissa andra grödor antas en högre andel förloras via vindavdrift, till exempel 15,7 – 29,2 % för fruktträd (pome / stone fruit). En liknande ansats som i FOCUS Step 1 för att inkludera vindavdrift skulle kunna tillämpas för PEC CKB genom att variera M-värdet beroende på gröda. Detta motsägs dock av att syftet med det MEC som här beskrivs ska motsvara den verkliga hanteringen av växtskyddsmedel. Sedan 1997 finns föreskrifter som gör det obligatoriskt för lantbrukarna att hantera vindavdrift, först genom SNFS 1997:2 (Naturvårdsverket 1997a) och tillhörande Allmänna råd 97:3 (Naturvårdsverket 1997b), och nu genom NFS 2015:2 (Naturvårdsverket, 2015a) med tillhörande vägledning (Naturvårdsverket 2015b). Hanteringen av vindavdrift ska bland annat ske genom att använda fasta skyddsavstånd och skyddsavstånd anpassade utifrån förhållanden på platsen, till vattentäkter, sjöar och vattendrag, samt omgivande mark, t.ex. genom att använda Hjälpredan (<https://www.sakertvaxtskydd.se/hjalpredan/>), som togs fram och har varit i bruk sedan 1997. Med detta i åtanke bör inte vindavdriften vara något generellt problem som gör att den föreslagna metoden riskerar underskatta halter i vattendrag till följd av att vi inte explicit inkluderar vindavdrift.

Även PEC-värden för sediment är något som inkluderas i FOCUS Step 1 men som inte ingår i det här förslaget till PEC CKB men som man skulle kunna utreda om det går att beräkna på motsvarande sätt som i FOCUS Step 1.

Vid beräkning av PEC CKB görs ingen skillnad mellan vår- och höstbehandling av grödor. Det är dock känt att appliceringssäsongen är en viktig faktor vad gäller riskerna för transport till ytvatten där hösten generellt ger en högre risk p.g.a. lägre temperatur vilket ger långsammare nedbrytning, en låg evapotranspiration samt ett högre vattenflöde till dränage. En fördjupad analys av de substanser som huvudsakligen har höstapplicering skulle kunna göras för att se om PEC CKB är tillräckligt skyddande även för dessa substanser. I sammanhanget kan nämnas att beräkningarna av FOCUS Step 1 inte heller gör någon skillnad på vår- eller höstapplicering.

Enligt det så kallade ”tiered approach” ska alltid de lägre stegen i riskbedömningen vara mer konservativa än de högre. Detta innebär att ifall PEC CKB ska användas för att ersätta FOCUS Step 1 bör PEC CKB aldrig ge lägre predikterade halter än PEC Step 3/4, vilket det gör med den föreslagna metoden i 26-55 % av fallen. Om och hur PEC CKB eventuellt ska ersätta Step 1 eller vara ett komplement i ett senare steg i bedömningen är dock en senare fråga. Här återkommer man till frågan om skyddsnivåer och man behöver även utreda vad som är möjligt enligt lagstiftningen.

Uppmätta halter som används i denna studie kommer från de fyra typområdena som ingår i den nationella miljöövervakningen av växtskyddsmedel. En naturlig fråga är därmed hur representativa dessa typområden är för svenskt jordbruk i stort. Typområdena är valda för att representera områden med intensivt jordbruk i de fyra största jordbruksregionerna i Sverige. De är små avrinningsområden på 8-16 km<sup>2</sup> längst upp i vattensystemen, med 85-92% åkermark så utspädningen från andra områden är liten. Detta medför att typområdena är relativt värsta-falls-scenarion för svenska förhållanden. Som

tidigare nämnts görs dock mätningarna i typområdena vid utloppet av avrinningsområdet och inte vid fältkanten vilket medför att en utspädning sker från obehandlade områden. Denna utspädning beskrivs av faktorerna  $f$ ,  $N_s$  och  $q$  i PEC CKB och ger därmed lägre koncentrationer. Skillnaden i skyddsnivå mellan fältkanten och i utloppet av de små, mycket jordbruksintensiva typområdena är ett ämne för fortsatt diskussion.

Även om den nationella miljöövervakningen bara bedrivs i fyra typområden så har större screeningar gjorts i betydligt fler områden utspridda över södra halvan av landet. Under 2015 genomfördes en screening där ytvattenprover togs på 46 lokaler och 2016 gjordes en uppföljande studie på 21 lokaler. Dessa stora screeningstudier visar resultat i linje med den nationella miljöövervakningen och stärker bilden av att typområdena representerar värsta-falls-förhållanden i Sverige. Det bör poängteras att områdena som studerades i de bägge screeningstudierna var större avrinningsområden (20 - 1202 km<sup>2</sup>) och de flesta hade en lägre andel jordbruksmark (7 % - 84 %), men de allra flesta var klart jordbruksdominerade områden.

Vid bedömning av uppmätta halter från typområdena bör man beakta att vissa uppmätta halter skulle kunna bero på tillfälligheter såsom olyckor, spill eller läckage från sprututrustning. Vi kan inte heller utesluta att privat användning (klass 3) av vissa aktiva substanser kan förekomma inom områdena, av till exempel glyfosat, eller att användning av substanser som också finns i biocidprodukter förekommer, till exempel alfacypermetrin, deltametrin och imidaklopid. Dessa aspekter kan inte fångas upp med någon av de modeller som diskuterats i den här studien.

Det finns grödor som inte odlas alls eller i mycket begränsad omfattning inom typområdena, t.ex. fruktträd, bär och trädgårdsgrödor. Det går därför inte att med denna metod visa att PEC CKB är tillräckligt skyddande för den sortens användning.

Som tidigare nämnts så tas proverna i typområdena med en automatisk provtagare som tar ett delprov ca var 90:e minut som sedan poolas till ett prov per vecka. Dessa prover representerar alltså medelhalten i bäcken under veckan och passar därmed bra för jämförelse med PEC CKB som konceptuellt estimerar halterna med en veckas tidsupplösning. Med denna metod har man dock inte några data på de högsta halttopparna som kan förekomma i bäcken t.ex. vid flödestoppar efter kraftiga regn. En genomgång av data från den flödesproportionella provtagningen som bedrivs inom typområdet i Skåne visar att halterna i prover som tas vid förhöjda flöden både kan vara högre och lägre än veckoproverna och i de allra flesta fall ligger inom en storleksordning från medelhalten under samma vecka (Boye et al., 2019). Ett högt vattenflöde kan både orsaka ett högt massflöde av växtskyddsmedel och/eller en hög utspädning av ämnen i vattnet.

I de jämförelser mellan PEC CKB och uppmätta halter där  $F_w$  (effekten av  $K_{foc}$ ) är inkluderat så sticker glyfosat ut som den substans som avviker mest från sambandet. När  $F_w$  inte inkluderas faller dock glyfosat betydligt bättre in i linjen med övriga substanser. Detta kan bero på att glyfosat har ett högt  $K_{foc}$ -värde vilket gör att det i modellen som inkluderar  $F_w$  antas att en stor del kommer att bindas till sedimentet. Glyfosat är dock en speciell substans då den är en s.k. zwitterjon och har samtidigt med det höga  $K_{foc}$ -värdet även en hög vattenlöslighet och är en välkänt rörlig substans och detta kan medföra att modellen fungerar sämre för just glyfosat.

Något som anknyter till detta är att de kemiska analyserna inom den nationella miljöövervakningen inkluderar partiklar och därmed den partikelbundna fraktionen av substanserna och inte bara det som är löst i vattenfasen. Detta kan medföra att modellen som inkluderar  $F_w$  inte nödvändigtvis ger ett bättre resultat. En hypotes är att det skulle ge ett bättre resultat att i modellen inkludera effekten av  $K_{foc}$  på substansens bindning i marken, innan den kommer ut i vattendraget. I förslaget som

presenteras här är denna effekt främst representerad av faktorn  $M$ , som avser den procentuella förlusten och är satt till 1 % för alla substanser.

En nackdel med de statistiska måtten som används i studien är att de inte tar hänsyn till ämnen som sällan eller aldrig detekteras. Ett försök att åskådliggöra skillnaden mellan PEC CKB för dessa ämnen jämfört med de ämnen som påträffats oftare har gjorts i avsnitt 3.2 och det visar att PEC CKB generellt sett är lägre för de ämnen som sällan eller aldrig påträffas.

Resultaten från studien tyder på att korrelationen mellan PEC CKB och uppmätta halter är relativt god, trots att den föreslagna beräkningsmetoden är mycket enkel och kräver minimalt med inputdata. Dock finns självklart en del spridning i dataunderlaget och man skulle kunna arbeta för att få en ännu bättre samstämmighet mellan predikterade och uppmätta halter. Fortsatt arbete för att förbättra den föreslagna metoden skulle kunna vara: mer realistiska scenarierna för olika produktanvändningar (motsvarande FOCUS Step 2) skulle kunna beräknas genom att ändra på värdena för  $f$  och  $N_s$  utifrån t.ex. grödans utbredning och användningsmönstret. Data som underlag för detta kan tas från den nationella miljöövervakningen. Att göra den procentuella förlusten,  $M$ , ämnesspecifik skulle vara en annan ”Step 2”-variant. Vi har tidigare försökt statistiskt förklara variationen i uppmätta  $M$ -värden från typområdena utifrån ämnesegenskaper, men denna typ av ansats har inte varit så framgångsrik. Detta skulle dock kunna utredas vidare i ett senare projekt.

## 5. Slutsatser

- Den föreslagna metoden för beräkning av estimerade halter i ytvatten i små avrinningsområden med en veckas tidsupplösning (PEC CKB) ger en bra uppskattning av de högsta halterna som kan uppmätas i den nationella miljöövervakningens typområden, utan att vara överdrivet konservativt.
- De estimerade koncentrationerna kan justeras linjärt uppåt eller neråt för alla substanser genom att ändra schablonvärdena i ekvationen och därmed kan man justera skyddsnivån för PEC CKB. Detta kan göras t.ex. med ledning av kvoterna mellan uppmätta halter och PEC CKB som ges i Bilaga 2.
- PEC CKB har en relativt stark korrelation med 99:e percentilen av uppmätta halter inom den nationella miljöövervakningen.
- PEC CKB ligger i många fall mellan PEC Step 3/4 och Step 1 men i 26-55 % av fallen ligger PEC CKB under PEC Step 3/4.
- PEC CKB ger i genomsnitt lägre estimerade halter för de substanser som sällan eller aldrig detekteras inom den nationella miljöövervakningen.
- Flera förslag för fortsatt utveckling av modellen, genom att göra fler faktorer ämnesspecifika, har diskuterats.

## 6. Tackord

Projektet har finansierats av Jordbruksverket genom Växtskyddsrådet (överenskommelse Dnr. 4.1.11-14984/2018). Vi vill här tacka alla som har bidragit till projektets genomförande genom värdefulla diskussioner och dataunderlag (Mats Allmyr, Johan Axelman, Sara Furuhausen, Abdul Ghafoor, Milena Ivansson, Maja Larsson, Julien Moeys och Markus Ollikainen). Ett särskilt tack till Claudia von Brömssen (Institutionen för energi och teknik, SLU) för hjälp med statistiska analyser.

## 7. Referenser

Berggren, K., Boström, G., Gutfreund, C., Gönczi, M. & Kreuger, J. 2018. Jämförelser av PEC och PNEC från EFSA med riktvärden och uppmätta halter av växtskyddsmedel i ytvatten - Underlagsrapport till Naturvårdsverket 2018. CKB, Sveriges lantbruksuniversitet, Uppsala.

Boström, G., Gönczi, M. & Kreuger, J. 2017. Växtskyddsmedel som regelbundet överskrider riktvärden för ytvatten – en undersökning av bakomliggande orsaker. CKB Rapport 2017:2. CKB, Sveriges lantbruksuniversitet, Uppsala.

Boye, K., Lindström, B., Boström G. and Kreuger, J. 2019. Long-term Data from the Swedish National Environmental Monitoring Program of Pesticides in Surface Waters. *Journal of Environmental Quality*. doi:10.2134/jeq2019.02.0056

FOCUS (2001). "FOCUS Surface Water Scenarios in the EU Evaluation Process under 91/414/EEC". Report of the FOCUS Working Group on Surface Water Scenarios, EC Document Reference SANCO/4802/2001-rev.2. 245 pp.

Graaf, S., Adielsson, S. & Kreuger, J. 2010. Resultat från miljöövervakningen av bekämpningsmedel (växtskyddsmedel) - Årssammanställning 2009. *Ekohydrologi 120\_version 2*. Institutionen för mark & miljö, Sveriges lantbruksuniversitet, Uppsala.

Lindström, B., Larsson, M., Boye, K., Gönczi, M. & Kreuger, J. 2015. Resultat från miljöövervakningen av bekämpningsmedel (växtskyddsmedel). Långtidsöversikt och trender 2002-2012 för ytvatten och sediment. Rapport 2015:5. Institutionen för vatten och miljö, Sveriges lantbruksuniversitet, Uppsala.

Nanos, T. & Kreuger, J. 2015. Resultat från miljöövervakningen av bekämpningsmedel (växtskyddsmedel). Årssammanställning 2014. Rapport 2015:19. Institutionen för vatten och miljö, Sveriges lantbruksuniversitet, Uppsala.

Naturvårdsverket. 1997a. Statens naturvårdsverks föreskrifter om spridning av kemiska bekämpningsmedel. Statens naturvårdsverks författningssamling, SNFS 1997:2.

Naturvårdsverket. 1997b. Spridning av kemiska bekämpningsmedel. Tillämpning av Naturvårdsverkets föreskrifter om spridning av kemiska bekämpningsmedel. Allmänna råd 97:3.

Naturvårdsverket. 2015a. Naturvårdsverkets föreskrifter om spridning och viss övrig hantering av växtskyddsmedel. Naturvårdsverkets författningssamling, NFS 2015:2.

Naturvårdsverket. 2015b. Vägledning om tillämpning av Naturvårdsverkets föreskrifter (NFS 2015:2) om spridning och viss övrig hantering av växtskyddsmedel.

## 8. Bilagor

### Bilaga 1 – Substanslistor

Listor på alla substanser som ingått i studien och substanser som ingår i korrelationsanalyserna.

<b>87 substanser</b>	<b>43 substanser</b>	<b>20 substanser</b>
2,4-D	amidosulfuron	azoxystrobin
acetamiprid	azoxystrobin	bentazon
aklonifen	bentazon	cyprodinil
alfacypermetrin	bixafen	diflufenikan
amidosulfuron	boskalid	fluroxipyr
amisulbrom	cykloxidim	glyfosat
azoxystrobin	cyprodinil	imidaklopid
bentazon	diflufenikan	klopyralid
betacyflutrin	etofumesat	MCPA
bifenox	fenmedifam	metamitron
bixafen	fludioxonil	metazaklor
boskalid	fluopikolid	metribuzin
cyazofamid	fluopyram	metsulfuronmetyl
cyflufenamid	fluroxipyr	pikoxystrobin
cykloxidim	flurtamon	prosulfokarb
cypermetrin	glyfosat	pyraklostrobin
cyprodinil	imidaklopid	pyroxsulam
deltametrin	isoproturon	tiaklopid
difenokonazol	klomazon	tribenuronmetyl
diflufenikan	klopyralid	triflusulfuronmetyl
diklorprop	kloridazon	
dimetoat	kvinmerak	
esfenvalerat	mandipropamid	
etofumesat	MCPA	
fenitrothion	metalaxyl	
fenmedifam	metamitron	
fenoxaprop-P	metazaklor	
fenpropidin	metribuzin	
fenpropimorf	metsulfuronmetyl	
florasulam	pikoxystrobin	
fluazinam	pirimikarb	
fludioxonil	prokloraz	
fluopikolid	propamokarb	
fluopyram	propikonazol	
flupyrsulfuronmetyl-Na	propoxikarbazon-Na	
fluroxipyr	prosulfokarb	
flurtamon	pyraklostrobin	
foramsulfuron	pyroxsulam	
glyfosat	rimsulfuron	
hexytiazox	sulfosulfuron	
imidaklopid	tiaklopid	

<b>87 substanser</b>	<b>43 substanser</b>	<b>20 substanser</b>
indoxakarb	tribenuronmetyl	
isoproturon	triflusulfuronmetyl	
jodsulfuronmetyl-Na		
karfentrazonetyl		
kletodim		
klomazon		
klopyralid		
kloridazon		
kvinmerak		
lambda-cyhalotrin		
mandipropamid		
MCPA		
mekoprop		
mesosulfuronmetyl		
mesotrion		
metalaxyl		
metamitron		
metazaklor		
metrafenon		
metribuzin		
metsulfuronmetyl		
napropamid		
pendimetalin		
pikloram		
pikoxystrobin		
pirimikarb		
prokloraz		
propakizafop		
propamokarb		
propikonazol		
propoxikarbazon-Na		
propyzamid		
prosulfokarb		
pymetrozin		
pyraklostrobin		
pyroxsulam		
rimsulfuron		
sulfosulfuron		
tau-fluvalinat		
tiakloprid		
tifensulfuronmetyl		
tiofanatmetyl		
tribenuronmetyl		
trifloxystrobin		
triflusulfuronmetyl		
trinexapak-etyl		

## Bilaga 2 – Kvoter mellan percentiler av uppmätta halter och PEC CKB

Kvoter av percentiler av uppmätta halter (MEC) delat med PEC CKB (beräknat med den genomsnittliga årliga hektardosen från NMÖ 2009-2017 och inklusive F<sub>w</sub>). Kvoter över 1, alltså där percentilen av uppmätta halter är högre än PEC CKB, har markerats med rött.

Substans	max MEC / PEC CKB	99:e perc. MEC / PEC CKB	97,5:e perc. MEC / PEC CKB	95:e perc. MEC / PEC CKB	90:e perc. MEC / PEC CKB
2,4-D	0,0049	0,0036	0,0025		
acetamiprid	0,0034	0,0014	0,0011	0,0006	
aklonifen	1,7321	0,0086			
alfacypermetrin	67,3830	2,5813			
amidosulfuron	4,7015	0,2355	0,0899	0,0435	0,0155
amisulbrom	0,4120	0,1811			
azoxystrobin	0,1335	0,0721	0,0356	0,0175	0,0091
bentazon	0,9908	0,0667	0,0379	0,0245	0,0142
betacyflutrin	4,2154				
bifenox					
bixafen	0,2684	0,2580	0,0794	0,0468	0,0220
boskalid	0,2560	0,0427	0,0153	0,0101	0,0059
cyazofamid	0,0290	0,0082	0,0029	0,0013	
cyflufenamid	0,0177				
cykloxidim	0,6697	0,0107	0,0033	0,0010	0,0002
cypermetrin	0,8058	0,0161			
cyprodinil	0,1970	0,0475	0,0109	0,0045	0,0022
deltametrin	3687,9145				
difenokonazol	1,4700	0,0707	0,0325	0,0141	
diflufenikan	0,2324	0,0844	0,0500	0,0278	0,0171
diklorprop	0,0004	0,0004	0,0003	0,0003	0,0002
dimetoat					
esfenvalerat	21,8942	1,4596	0,4865	0,2433	
etofumesat	0,1821	0,0531	0,0245	0,0088	0,0032
fenitrothion					
fenmedifam	0,0397	0,0174	0,0050	0,0010	0,0001
fenoxaprop-P	0,0215	0,0054			
fenpropidin					
fenpropimorf	0,0622	0,0069	0,0019		
florasulam	0,4111	0,1396	0,0536	0,0238	
fluazinam	0,1677	0,0211	0,0014		
fludioxonil	0,5610	0,5236	0,3740	0,3117	0,2493
fluopikolid	0,0274	0,0231	0,0128	0,0089	0,0041
fluopyram	0,1387	0,1323	0,0301	0,0200	0,0126
flupyrsulfuronmetyl-Na	0,3282	0,0364	0,0052		
fluroxipyr	0,4786	0,1725	0,1223	0,0665	0,0346
flurtamon	0,1118	0,0223	0,0144	0,0044	0,0012
foramsulfuron					
glyfosat	21,8626	2,5315	1,3137	0,7288	0,3414
hexyiazox					
imidakloprid	0,0683	0,0354	0,0141	0,0078	0,0053

Substans	max MEC / PEC CKB	99:e perc. MEC / PEC CKB	97,5:e perc. MEC / PEC CKB	95:e perc. MEC / PEC CKB	90:e perc. MEC / PEC CKB
indoxakarb					
isoproturon	0,4739	0,0259	0,0140	0,0076	0,0037
jodsulfuronmetyl-Na	0,3088	0,0514	0,0152		
karfentrazonetyl	0,1413	0,0041			
kletodim	0,0165	0,0136	0,0094	0,0071	
klomazon	0,0671	0,0288	0,0186	0,0092	0,0028
klopyralid	0,8447	0,3341	0,1818	0,1229	0,0760
kloridazon	0,1405	0,0753	0,0071	0,0038	0,0019
kvinmerak	0,4278	0,1536	0,0736	0,0276	0,0098
lambda-cyhalotrin	0,5172	0,1203	0,0556		
mandipropamid	0,0505	0,0106	0,0041	0,0022	0,0011
MCPA	0,4854	0,2053	0,0529	0,0278	0,0130
mekoprop	0,0285	0,0285	0,0281	0,0246	0,0212
mesosulfuronmetyl	0,0535				
mesotrion					
metalaxyl	0,1178	0,0731	0,0176	0,0087	0,0051
metamitron	0,1573	0,0356	0,0134	0,0029	0,0008
metazaklor	0,3964	0,0563	0,0189	0,0059	0,0022
metrafenon	0,0163	0,0049	0,0011		
metribuzin	0,1088	0,0257	0,0162	0,0109	0,0065
metsulfuronmetyl	3,0879	0,1610	0,0616	0,0368	0,0221
napropamid					
pendimetalin					
pikloram					
pikoxystrobin	0,1747	0,0497	0,0179	0,0112	0,0054
pirimikarb	0,1243	0,0682	0,0124	0,0055	0,0021
prokloraz	0,1351	0,0211	0,0078	0,0036	0,0015
propakizafop					
propamokarb	0,0399	0,0056	0,0025	0,0009	0,0003
propikonazol	0,3533	0,1178	0,0636	0,0416	0,0220
propoxikarbazon-Na	0,1365	0,0384	0,0161	0,0097	0,0046
propyzamid	0,0044	0,0041	0,0037	0,0020	0,0004
prosulfokarb	0,2339	0,0174	0,0075	0,0033	0,0012
pymetrozin	0,0192				
pyraklostrobin	1,0333	0,3159	0,0620	0,0248	0,0124
pyroksulam	0,1996	0,0984	0,0335	0,0166	0,0100
rimsulfuron	0,2627	0,0884	0,0182	0,0113	0,0004
sulfosulfuron	0,0820	0,0523	0,0335	0,0259	0,0144
tau-fluvalinat	6,6504	1,1084			
tiaklopid	0,2894	0,0544	0,0119	0,0068	0,0028
tifensulfuronmetyl	0,9153	0,0333	0,0127		
tiofanatmetyl					
tribenuronmetyl	1,2532	0,1554	0,0788	0,0470	0,0157
trifloxystrobin					
triflusulfuronmetyl	0,1366	0,0513	0,0188	0,0059	0,0015
trinexapak-etyl	0,3433	0,0428	0,0140	0,0065	



## Bilaga 3 – Beräknad statistik

Olika statistiska mått på sambanden (korrelationskoefficient, Root Mean Square Error, Mean Absolute Error och Bias) mellan olika percentiler (maxhalt; 99:e; 97,5:e; 95:e och 90:e percentil) av uppmätta halter (MEC) inom den nationella miljöövervakningen 2009-2017 och olika PEC-värden; PEC CKB (beräknat med genomsnittlig årlig fältdos från nationella miljöövervakningen och faktorn  $F_w$  (andelen som fördelar sig till vatten snarare än sediment)) och PEC CKB utan  $F_w$  beräknat för en delmängd av 43 substanser och en delmängd av 20 substanser. För delmängden 20 substanser har även statistik för sambanden med MEC-percentiler beräknats för PEC CKB beräknat med den maximalt godkända dosen från KemI produktgodkännande (pgk) med och utan  $F_w$ , mot PEC Step 3 eller 4 från KemI pgk samt direkt mot olika sätt att beräkna fältdosen och direkt mot faktorn  $F_w$ . All statistik har beräknats på 10-logaritmerade värden.

### Korrelationskoefficienter

	PEC CKB	PEC CKB utan $F_w$	PEC CKB	PEC CKB utan $F_w$	PEC CKB maxdos pgk	PEC CKB max-dos pgk utan $F_w$	PEC Step 3/4 KemI pgk	Maxdos pgk	Area-weighted yearly hectare-dose	Median dose per application	$F_w$
	43 substanser	43 substanser	20 substanser	20 substanser	20 substanser	20 substanser	20 substanser	20 substanser	20 substanser	20 substanser	20 substanser
MEC(max)	0,74	0,66	0,75	0,80	0,75	0,73	0,82	0,73	0,80	0,81	-0,13
MEC(99 %)	0,76	0,72	0,81	0,84	0,83	0,79	0,76	0,79	0,84	0,84	-0,11
MEC(97,5 %)	0,73	0,70	0,79	0,80	0,81	0,75	0,80	0,75	0,80	0,80	-0,06
MEC(95 %)	0,65	0,64	0,74	0,75	0,75	0,70	0,78	0,70	0,75	0,76	-0,05
MEC(90 %)	0,54	0,57	0,69	0,71	0,70	0,66	0,73	0,66	0,71	0,73	-0,06

### RMSE - Root Mean Square Error (log<sub>10</sub>[µg/l])

	PEC CKB	PEC CKB utan $F_w$	PEC CKB	PEC CKB utan $F_w$	PEC CKB maxdos pgk	PEC CKB max-dos pgk utan $F_w$	PEC Step 3/4 KemI pgk
	43 substanser	43 substanser	20 substanser	20 substanser	20 substanser	20 substanser	20 substanser
MEC(max)	0,81	1,05	0,69	0,83	0,87	1,11	0,50
MEC(99 %)	1,28	1,53	1,14	1,36	1,39	1,66	0,89
MEC(97,5 %)	1,68	1,93	1,52	1,76	1,78	2,06	1,23
MEC(95 %)	1,99	2,24	1,83	2,08	2,10	2,37	1,52
MEC(90 %)	2,39	2,63	2,16	2,41	2,43	2,70	1,85

MAE - Mean Absolute Error (log10[µg/l])

	PEC CKB	PEC CKB utan Fw	PEC CKB	PEC CKB utan Fw	PEC CKB maxdos pgk	PEC CKB max-dos pgk utan Fw	PEC Step 3/4 Kemi pgk
	43 substanser	43 substanser	20 substanser	20 substanser	20 substanser	20 substanser	20 substanser
MEC(max)	0,71	0,91	0,58	0,71	0,80	0,98	0,40
MEC(99 %)	1,20	1,44	1,08	1,29	1,32	1,58	0,76
MEC(97,5 %)	1,60	1,86	1,45	1,69	1,72	1,98	1,12
MEC(95 %)	1,90	2,17	1,74	2,00	2,03	2,29	1,43
MEC(90 %)	2,28	2,55	2,07	2,33	2,36	2,62	1,76

Bias (log10[µg/l])

	PEC CKB	PEC CKB utan Fw	PEC CKB	PEC CKB utan Fw	PEC CKB maxdos pgk	PEC CKB max-dos pgk utan Fw	PEC Step 3/4 Kemi pgk
	43 substanser	43 substanser	20 substanser	20 substanser	20 substanser	20 substanser	20 substanser
MEC(max)	-0,59	-0,85	-0,39	-0,65	-0,68	-0,93	-0,08
MEC(99 %)	-1,18	-1,44	-1,04	-1,29	-1,32	-1,58	-0,72
MEC(97,5 %)	-1,59	-1,86	-1,43	-1,69	-1,72	-1,98	-1,12
MEC(95 %)	-1,90	-2,17	-1,74	-2,00	-2,03	-2,29	-1,43
MEC(90 %)	-2,28	-2,55	-2,07	-2,33	-2,36	-2,62	-1,76

