



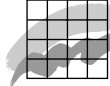
Danmarks Miljøundersøgelser
Miljøministeriet

Teknisk anvisning fra DMU nr. 24, 2006

Statistisk bearbejdning af overvågningsdata - Trendanalyser

NOVANA

(Tom side)



Danmarks Miljøundersøgelser
Miljøministeriet

Teknisk anvisning fra DMU nr. 24, 2006

Statistisk bearbejdning af overvågningsdata - Trendanalyser

NOVANA

Jacob Carstensen
Søren E. Larsen

Datablad

- Serietitel og nummer: Teknisk anvisning fra DMU nr. 24
- Titel: Statistisk bearbejdning af overvågningsdata - Trendanalyser
Undertitel: NOVANA
- Forfattere: Jacob Carstensen¹⁾, Søren E. Larsen²⁾
Afdelinger: ¹⁾ Afd. for Marin Økologi, ²⁾ Afd. for Ferskvandsøkologi
- Udgiver: Danmarks Miljøundersøgelser©
Miljøministeriet
URL: <http://www.dmu.dk>
- Udgivelsesår: November 2006
Redaktion afsluttet: Oktober 2006
Faglig kommentering: Amterne
- Finansiel støtte: NOVANA overvågningsmidler
- Bedes citeret: Carstensen, J. & Larsen, S.E. 2006: Statistisk bearbejdning af overvågningsdata - Trendanalyser. NOVANA. Danmarks Miljøundersøgelser. 38 s. - Teknisk anvisning fra DMU nr. 24. <http://www.dmu.dk/Pub/TA24.pdf>
- Gengivelse tilladt med tydelig kildeangivelse
- Sammenfatning: Anvisningen beskriver statistiske metoder til trendanalyse af monotone og ikke-monotone udviklinger i overvågningsdata. Anvisningen indbefatter både parametriske og ikke-parametriske metoder. Fremstillingen er generel med eksempler til illustration af metoderne, men analyserne vil kunne tilpasses konkrete overvågningsdata. Anvisningen tjener som inspiration til nye måder at undersøge tidlige udviklinger i overvågningsdata.
- Emneord: NOVANA, trendanalyser, overvågningsdata, statistisk bearbejdning
- Layout: Anne van Acker
Illustrationer: Anne van Acker
- ISBN: 978-87-7772-956-0
ISSN (elektronisk): 1399-9176
- Sideantal: 38
- Internetversion: Rapporten er tilgængelig i elektronisk format (pdf) på DMU's hjemmeside <http://www.dmu.dk/Pub/TA24.pdf>
- Kan købes hos: Miljøministeriet
Frontlinien
Rentemestervej 8
2400 København NV
Tlf.: 7012 0211
frontlinien@frontlinien.dk
www.frontlinien.dk

Indhold

1	Indledning	5
2	Monotone udviklinger	6
2.1	Mann-Kendall's trend test	6
2.2	Mann-Kendall's sæson trend test	9
2.3	Lineær regression	13
2.4	Lineær regression med sæsonvariation	15
3	Ikke-monotone udviklinger	18
3.1	Generalized additive models (GAM)	18
3.1.1	GAM med korrektion for sæson	20
3.2	Change-point detektion	21
3.2.1	Tilfælde A: Knæpunkt til et kendt tidspunkt	23
3.2.2	Tilfælde B: Spring til et kendt tidspunkt	25
3.2.3	Tilfælde C: Knæpunkt til et ukendt tidspunkt	27
3.2.4	Tilfælde D: Spring til et ukendt tidspunkt	30
4	Diskussion af metoder	32
5	Anbefalinger	34
6	Referencer	35
	Bilag A - Matematiske definitioner af gennemsnit, median, tidsvægtede gennemsnit og vandføringsvægtede gennemsnit	37

Danmarks Miljøundersøgelser

[Tom side]

1 Indledning

Ved starten af det første nationale overvågningsprogram i 1989 var et af formålene med indsamling og statistisk analyse af data at påvise forbedringer i vandmiljøet. Der var en umiddelbar forventning om, at der ville ske en stadig forbedring af vandmiljøet i takt med at belastningen af næringsalte fra land blev reduceret. Efterhånden som målene for henholdsvis kvælstof og fosfor nås, forventes kvaliteten af vandmiljøet at stabilisere sig på et nyt niveau. Ligeledes er diverse parametre for kvalitet af vandmiljøet påvirket af andre faktorer, hovedsageligt meteorologiske såsom temperatur og nedbør, som også kan indeholde en tidslig udvikling. Konsekvensen heraf er, at de efterhånden lange tidsserier ikke nødvendigvis kun har enten en konstant aftagende eller en konstant stigende tendens. Eksempelvis kunne der være tale om økologiske regime-skift, hvor tilstanden springer fra et niveau til et andet. Der er derfor et behov for at udvide de statistiske metoder til at kunne tage højde for ikke-monotone trends.

Trendanalyser er ligeledes vigtige i vandrammedirektivet (VRD). Artikel 4 omhandler identifikation af trends, og derved vil anvendelse af statistiske metoder til trendanalyse få en vigtig rolle i implementeringen af VRD og den fremtidige monitoring og analyse af data i VRD.

Formålet med denne anvisning er at beskrive en række forskellige standardmetoder til at analysere for både monotone og ikke-monotone trends. Beskrivelsen vil være fokuseret på det anvendelsesmæssige i de statistiske metoder med henvisninger til litteraturen, hvor de statistiske detaljer er beskrevet mere udførligt. Beregningerne vil blive gennemgået ved passende valgte eksempler med data fra overvågningsprogrammerne.

I denne anvisning præsenteres forholdsvis generelle metoder til analyse af monotone og ikke-monotone udviklinger. Udover de valgte metoder findes der et utal af andre metoder, ofte mere specifikke, som med fordel kan anvendes på en given tidsserie. Fremstillingen er derfor ikke udtømmende med hensyn til mulige statistiske metoder, men repræsenterer et basisgrundlag for trendanalyser, som kan give inspiration til mere detaljerede og specifikke analyser.

2 Monotone udviklinger

I dette afsnit beskrives to simple metoder til analyse af monotone udviklinger, Mann-Kendall's trend test og lineær regression. Den første metode er non-parametrisk (forudsætter ingen specifik fordeling af data) og den anden metode er parametrisk (forudsætter en parametrisk fordeling af data). I deres mest enkle form undersøges tidsrækker bestående af årlige værdier, men det vises også, hvordan metoderne kan udvides til at håndtere tidsrækker indeholdende sæsonvariation, dvs. målinger foretaget på forskellige tidspunkter i et givet kalenderår.

2.1 Mann-Kendall's trend test

Stigning eller fald i miljøvariable over en periode på T år kan testes med Mann-Kendall's trend test (*Hirsch et al. 1982*). Testen er også kendt som Kendall's τ (*Kendall 1975*). Formålet med denne test er at påvise, om tidsrækken af miljøvariable har en statistisk signifikant stigende eller faldende udviklingstendens over perioden med T år, eller om tidsrækken blot består af en række tilfældige udsving i den målte størrelse.

Mann-Kendall's trend test er en ikke-parametrisk statistisk metode. Dette betyder, at den har mindre skrappe forudsætninger. Det er således ikke nødvendigt, at data stammer fra normalfordelinger så som i lineær regression (se *afsnit 2.3*). Ligeledes beskriver den alternative hypotese, som metoden tester, monotone tendenser og ikke nødvendigvis lineære. Trends behøver altså ikke at være lineære, men er ordnet i kun én retning (stigende eller faldende). Man betaler for disse mindre skrappe forudsætninger ved en anelse mindre effektivitet (statistisk power), hvis data viser sig at opfylde forudsætningerne for linearitet og normalfordeling.

Mann-Kendall's test og især Kendall's τ er beskrevet i en del statistiske lærebøger og artikler og kan være omtalt under navnet Kendall's coefficient of rank correlation. De fleste ikke-parametriske tests indeholder beregninger, som er svære at gennemføre på lommeregner eller i et regneark. Der kræves en form for programmering eller et statistikprogram, som indeholder metoden.

Udgangspunktet for Mann-Kendall's test er en tabel med årstal og tilhørende værdier af miljøvariable, som kan være gennemsnit, median, tidsvægtede eller vandføringsvægtede gennemsnit af det pågældende års målinger (se *Bilag A*). Det kan også være beregnede værdier så som stoftransport for året eller værdien af en enkelt måling, hvis der kun foretages én måling i løbet af året.

Lad x_1, x_2, \dots, x_n betegne værdierne for miljøvariablen for årene $1, 2, \dots, n$. Mann-Kendall teststørrelsen beregnes som

$$S = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \text{sgn}(x_j - x_i)$$

hvor

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x = 0 \\ -1 & x < 0 \end{cases}$$

Hvis x_j eller x_i er angivet som manglende værdi, så er $\text{sgn}(x_j - x_i) = 0$ pr. definition.

Trenden testes ved at beregne

$$Z = \begin{cases} \frac{S-1}{(\text{var}(S))^{\frac{1}{2}}} & S > 0 \\ 0 & S = 0 \\ \frac{S+1}{(\text{var}(S))^{\frac{1}{2}}} & S < 0 \end{cases}$$

Variansen af S under nulhypotesen (ingen udviklingstendens) kan beregnes eksakt som

$$\text{var}(S) = \frac{n_g(n_g - 1)(2n_g + 5) - \sum_{j=1}^m t_j(t_j - 1)(2t_j + 5)}{18}$$

hvor n_g er antallet af ikke-manglende observationer. I formlen for variansen af S har vi antaget, at der forekommer grupper af observationer med helt ens værdier (såkaldte ties), m grupper i alt og i den j 'te gruppe er der t_j ens værdier. Ens værdier optræder typisk, når der er censorede observationer i tidsserien (fx værdier under en detektionsgrænse), eller når observationer er diskrete tællel, fx antal arter i en prøve.

En positiv S -værdi betyder, at tendensen er stigende, og for S negativ drejer det sig om en faldende tendens. Både faldende og stigende tendenser er interessante (det er en tosidet test), så nulhypotesen om tilfældigt ordnede observationer skal forkastes, hvis den numeriske værdi af Z er mindre end $(\alpha/2)$ -fraktilen eller større end $(1 - \alpha/2)$ -fraktilen (tosidigt test) i normalfordelingen med middelværdi 0 og varians 1. Her står α for signifikansniveauet, som typisk vil være 5%. Grunden til, at Z skal vurderes i standard normalfordelingen er, at S under nulhypotesen er normalfordelt med middelværdi 0 og varians $\text{var}(S)$ for $n \rightarrow \infty$. Standard normalfordelingen anvendes, når $n > 10$, og hvis $n \leq 10$ anvendes (tabel 2.1). Approksimationen er først tilstrækkelig god, når der er data fra mere end 10 år.

Tabel 2.1 Tabel med P -værdier, som skal anvendes ved trend test i korte tidsserier. Gengivet efter s. 469 i *Helsel & Hirsch (1992)*.

P -værdier for Mann-Kendall's trend test for korte tidsserier
 $(P = \text{prob}(S \geq x) = \text{prob}(S \leq -x))$

Længden T af tidsserien				Længden T af tidsserien			
x	5	8	9	x	6	7	10
0	0,592	0,548	0,540	1	0,500	0,500	0,500
2	0,408	0,452	0,460	3	0,360	0,386	0,431
4	0,242	0,360	0,381	5	0,235	0,281	0,364
6	0,117	0,274	0,306	7	0,136	0,191	0,300
8	0,042	0,199	0,238	9	0,068	0,119	0,242
10	0,0083	0,138	0,179	11	0,028	0,068	0,190
12		0,089	0,130	13	0,0083	0,035	0,146
14		0,054	0,090	15	0,0014	0,015	0,108
16		0,031	0,060	17		0,0054	0,078
18		0,016	0,038	19		0,0014	0,054
20		0,0071	0,022	21		0,0002	0,036
22		0,0028	0,012	23			0,023
24		0,0009	0,0063	25			0,014
26		0,0002	0,0029	27			0,0083
28		<0,0001	0,0012	29			0,0046
30			0,0004	31			0,0023
32			0,0001	33			0,0011
				35			0,0005
				37			0,0002

Er testen for en monoton udviklingstendens faldet signifikant ud for en tidsserie, så er det muligt at beregne et estimat for størrelsen af tendensen, under antagelse af konstant udviklingstendens og angivet som ændring pr. år. *Hirsch et al. (1982)* introducerede Sen's hældningsestimator, som beregnes på følgende måde. For alle par af observationer (x_i, x_j) med $1 \leq j < i \leq n$ beregnes

$$d_{ij} = \frac{x_i - x_j}{i - j}$$

Hældningsestimatoren er så medianen af alle d_{ij} -værdierne og er robust, selv om tidsserien har seriel korrelation, sæsoneffekt og data ikke følger en normalfordeling. Et $100(1 - \alpha)$ % konfidensinterval for hældningen fås ved at gennemgå følgende beregninger (*Gilbert 1987*).

- Vælg det ønskede konfidensniveau α (1, 5 eller 10%) og anvend

$$Z_{1-\alpha/2} = \begin{cases} 2,576 & \alpha = 0,01 \\ 1,960 & \alpha = 0,05 \\ 1,645 & \alpha = 0,10 \end{cases}$$

i de følgende beregninger.

$$C_\alpha = Z_{1-\alpha/2} \cdot (\text{var}(S))^{1/2}.$$

$$M_1 = \frac{N - C_\alpha}{2}$$

$$M_2 = \frac{N + C_\alpha}{2}$$

hvor

$$N = \frac{1}{2}n(n-1).$$

- Nedre og øvre konfidensgrænser er den M_1 'te størrelse og $(M_2 + 1)$ 'te største værdi af de N ordnede hældningsestimater d_{ij} .

Det er ligeledes muligt at beregne et ikke-parametrisk estimat for skæringspunktet. Dette er vist i *Conover (1980)*. Vi vil ikke komme nærmere ind på denne metode her.

Eksempel

Ved anvendelse af Mann-Kendall's trend test på middel klorofylkoncentrationen i danske fjorde for perioden 1989-2005 – en tidsserie på 17 år – fås en teststørrelse på $Z = -2,27$ med en P -værdi på 0,023. Hvilket betyder, at nulhypotesen om tilfældighed forkastes, og der er et signifikant fald i tidsserien. Det årlige fald estimeres til -0,0436 med et 95% konfidensinterval, som er [-0,0870;-0,0087]. Værdien for 1988 (skæring) estimeres til 3,96.

Fortolkning

Mann-Kendall's trend test viser således, om der er en signifikant stigende (hvis S er positiv) eller faldende (hvis S er negativ) tendens over årrækken af længde T . Især hvis årrækken er kort (kun 5-10 år), skal der en stor værdi af S (se tabel 2.1) til at opnå signifikans, og derfor kan man ikke uden videre konkludere, at hvis der ikke er signifikans, er der ikke sket nogen ændring. Det er bare svært statistisk at bevise trend over korte årrækker og således er chancen for at finde trends i tidsserier med 5-10 års data meget små.

Forudsætninger

Modsat for lineær regression kræves det ikke i testen, at udviklingen er lineært stigende (eller faldende), og der er ikke noget krav om normalfordeling. Sen's hældningsestimat beregner dog (ligesom hældningen i lineær regression) et estimat for stigningen (eller faldet) pr. år. Det er for Mann-Kendall's test en forudsætning, at der ikke er nogen seriel korrelation ("afsmitning") fra år til år, altså fx at en tilfældig høj værdi et år giver forventning om en høj værdi året efter.

2.2 Mann-Kendall's sæson trend test

Når man har tidsserier med data fra forskellige sæsoner i hvert år (kvarteralsvis, månedsvi), så kan man anvende Mann-Kendall's sæson trend test (*Hirsch & Slack 1984*). Dette gøres ved at beregne teststørrelsen S for hver eneste sæson for sig. Derefter bliver teststørrelsen for hele tidsserien lig summen af de enkelte sæsonteststørrelser, dvs.

$$S = \sum_{s=1}^p S_s$$

hvor p er antallet af forskellige sæsoner pr. år. Variansen af S er defineret som

$$\text{var}(S) = \sum_{g=1}^p \text{var}(S_g) + \sum_{g,h:g \neq h} \text{cov}(S_g, S_h)$$

Det er ikke muligt under nulhypotesen at beregne kovariansen mellem S_g og S_h eksakt, men den kan estimeres ved (Hirsch & Slack 1984)

$$\text{cov}(S_g, S_h) = \frac{K_{gh} + 4 \sum_{i=1}^n R_{ig} R_{ih} - n(n_g + 1)(n_h + 1)}{3}$$

hvor

$$K_{gh} = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \text{sgn}[(x_{jg} - x_{ig})(x_{jh} - x_{ih})]$$

og

$$R_{ig} = \frac{n_g + 1 + \sum_{j=1}^n \text{sgn}(x_{ig} - x_{jg})}{2}$$

Her er R_{ig} rangen af x_{ig} blandt observationerne i sæson g , og alle manglende værdier får tildelt $(n_g + 1)/2$ som rang.

Man afgør, om den samlede tendens er statistisk signifikant ved at beregne størrelsen Z defineret ved

$$Z = \begin{cases} \frac{S-1}{(\text{var}(S))^{1/2}} & S > 0 \\ 0 & S = 0 \\ \frac{S+1}{(\text{var}(S))^{1/2}} & S < 0 \end{cases}$$

Hypotesen om tilfældigt ordnede observationer i hver sæson forkastes, hvis den numeriske værdi af Z er mindre end $(\alpha/2)$ -fraktilen eller større end $(1 - \alpha/2)$ -fraktilen i normalfordelingen med middelværdi 0 og varians 1. Ovenfor beskrevet test kan anvendes i tidsserier med seriel korrelation. Er der ingen seriel korrelation i tidsserien udgår ledet med kovarianser i beregningen af $\text{var}(S)$. I afsnit 2.4 beskrives en simpel grafisk metode til test af om der er seriel korrelation.

Hvis Mann-Kendall's sæson trend test er faldet signifikant ud, så er det muligt at beregne et fælles hældningsestimat for hele tidsserien med sæsoner. Dette gøres ved følgende generalisering af Sen's hældningsestimator beskrevet i foregående afsnit.

For alle par af observationer (x_{ij}, x_{kj}) med $j = 1, 2, \dots, p$ og $1 \leq k < i \leq n_j$ beregnes

$$d_{ijk} = \frac{x_{ij} - x_{kj}}{i - k}$$

Hældningsestimatoren er så medianen af alle d_{ijk} -værdier og er robust, hvis tidsserien har seriel korrelation, sæsoneffekt og data ikke følger en normalfordeling (Hirsch et al. 1982). Konfidensinterval for hældnings-estimatet beregnes som i foregående afsnit.

Homogenitets test

Mann-Kendall's sæson trend teststørrelse S har den svaghed, at hvis der findes næsten lige mange sæsoner med positive udviklingstendenser som med negative, og hvis deres størrelse omtrent opvejes, så vil S ikke være signifikant. Derfor skal man, før Mann-Kendall's sæson trend test og hældningsestimator anvendes, teste om udviklingstendenserne i de forskellige sæsoner er homogene, hvilket vil sige udviklingstendenser i samme retning og af omtrentlig samme størrelse. Homogenitetstesten kan udføres som et Wald test på følgende måde:

- Beregn

$$h = (S_1 - S_2, S_1 - S_3, \dots, S_1 - S_p)$$

- Definer $(p - 1) \times p$ matricen

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & 0 \\ 1 & 0 & \dots & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

- Beregn $p \times p$ matricen

$$\text{cov}(S) = \begin{bmatrix} \text{var}(S_1) & \text{cov}(S_1, S_2) & \dots & \text{cov}(S_1, S_p) \\ \text{cov}(S_2, S_1) & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \text{cov}(S_{p-1}, S_p) \\ \text{cov}(S_p, S_1) & \dots & \text{cov}(S_p, S_{p-1}) & \text{var}(S_p) \end{bmatrix}$$

- Beregn $(p - 1) \times (p - 1)$ matricen

$$T = A \cdot \text{cov}(S) \cdot A^t$$

hvor t står for transponering af matricer.

- Teststørrelsen beregnes til

$$h^t \cdot T^{-1} \cdot h$$

Teststørrelsen skal vurderes i en χ^2 -fordeling med $(p - 1)$ frihedsgrader. Hvis hypotesen om homogenitet ikke accepteres, er det bedst at anvende teststørrelser og hældningsestimater for hver sæson for sig. I van Belle &

Hughes (1984) og *Gilbert (1987)* er der angivet en anden test, som kun kan anvendes, hvis der ikke er seriel korrelation.

Eksempel

Nedenfor er vist outputtet fra analyse af månedsmidler for klorofylkoncentrationen i danske fjorde. Data er beregnet på basis af alle NOVANA-stationer for perioden 1989 til 2005 – i alt 17 år. Vi har anvendt både Mann-Kendall's sæson trend test med korrektion for seriel korrelation (tabel 2.2). De to test giver meget forskellige resultater, så det er vigtigt at se på den serielle korrelation. Homogenitetstesten er signifikant i det ene tilfælde men accepteres i det andet, og konfidensintervallet er bredere, når der korrigeres for seriel korrelation.

Tabel 2.2 Testresultater for Mann-Kendall's sæson trend test anvendt på månedlige klorofyl koncentrationer.

	Test med seriel korrelation	Test uden seriel korrelation
Hældningsestimater	$\hat{\beta} = -0,0134$	$\hat{\beta} = -0,0134$
Test for homogenitet	HOM = 13,22 $P = 0,2794$	HOM = 20,99 $P = 0,0334$
Trend teststørrelse	$Z = -2,5438$ $P = 0,0110$	$Z = -4,1025$ $P = 0,00004$
95% konfidensinterval for hældning	$[-0,0235; -0,0039]$	$[-0,0185; -0,0076]$

I tabel 2.3 har vi gengivet resultatet af Mann-Kendall's trend test anvendt for hver måned for sig. De fleste måneder viser en faldende klorofylkoncentration – på nær februar og marts. Faldet er signifikant for april, maj og juni.

Tabel 2.3 Mann-Kendall's trend test anvendt for hver måned for sig af klorofyl data.

Måned	Teststørrelse	Hældningsestimater	95% konfidensinterval for hældning
Januar	$Z = -0,2883$ $P = 0,7731$	$\hat{\beta} = -0,0019$	$[-0,0182; 0,0169]$
Februar	$Z = 1,1946$ $P = 0,2322$	$\hat{\beta} = 0,0195$	$[-0,0103; 0,0498]$
Marts	$Z = 0,8650$ $P = 0,3870$	$\hat{\beta} = 0,0059$	$[-0,0154; 0,0264]$
April	$Z = -3,5014$ $P = 0,0005$	$\hat{\beta} = -0,0379$	$[-0,0572; -0,0217]$
Maj	$Z = -2,5951$ $P = 0,0095$	$\hat{\beta} = -0,0271$	$[-0,0416; -0,0063]$
Juni	$Z = -2,2656$ $P = 0,0235$	$\hat{\beta} = -0,0237$	$[-0,0404; -0,0037]$
Juli	$Z = -1,2770$ $P = 0,2016$	$\hat{\beta} = -0,0165$	$[-0,0414; 0,0100]$
August	$Z = -1,6889$ $P = 0,0912$	$\hat{\beta} = -0,0157$	$[-0,0316; 0,0031]$
September	$Z = -0,05355$ $P = 0,5923$	$\hat{\beta} = -0,0066$	$[-0,0329; 0,0130]$
Oktober	$Z = -1,7713$ $P = 0,0765$	$\hat{\beta} = -0,0153$	$[-0,0335; 0,0050]$
November	$Z = -1,0298$ $P = 0,3031$	$\hat{\beta} = -0,0158$	$[-0,0341; 0,016]$
December	$Z = -1,0298$ $P = 0,3031$	$\hat{\beta} = -0,0122$	$[-0,0403; 0,0175]$

Fortolkning

Mann-Kendall's sæson trend test fortolkes på præcis den samme måde som Mann-Kendall's trend test. Som tommelfingerregel er det muligt at anvende normalfordelingsapproksimationen for tidsserier med 5 år eller mere, dvs. hvis der er målinger hvert kvartal så består tidsserien af 20 værdier. Homogenitetstesten bør ikke være signifikant, hvis man vil anvende den samlede test for trend.

Forudsætninger

Brugen af Mann-Kendall's sæson trend test følger de samme forudsætninger som testen uden sæsonvariationer. Dog er der den forskel, at det er muligt at teste trenden i tidsserier, hvor der forekommer seriel korrelation. Det er muligt ved at korrigere variansen af S , som beskrevet ovenfor.

2.3 Lineær regression

Stigning eller fald i årlige værdier kan testes med en lineær regression med det formål at få en statistisk vurdering af, om data har en stigende eller faldende tendens over årene, eller om tidsserien kan antages blot at vise tilfældige udsving.

Denne metode er parametrisk, hvilket betyder, at den forudsætter, at data er normalfordelt, eventuelt efter en passende transformation, med ens spredning omkring en ret linie i tiden. Endvidere forudsættes – ligesom ved anvendelse af Mann-Kendall's trend test – at der ikke er tidslig afhængighed mellem de enkelte årsværdier. Dette betyder, at observationen i et givent år er uafhængig af forrige års værdier.

Endelig undersøges ved den lineære regression om udviklingen er tilnærmelsesvis lineær, hvor Mann-Kendall's trend test undersøger, om udviklingen er stigende eller faldende. Lineær regression er, som tidligere beskrevet, mere effektiv til at detektere en udvikling i tidsserien end Mann-Kendall's trend test, såfremt udviklingen er tilnærmelsesvis lineær og data er normalfordelt.

Metode

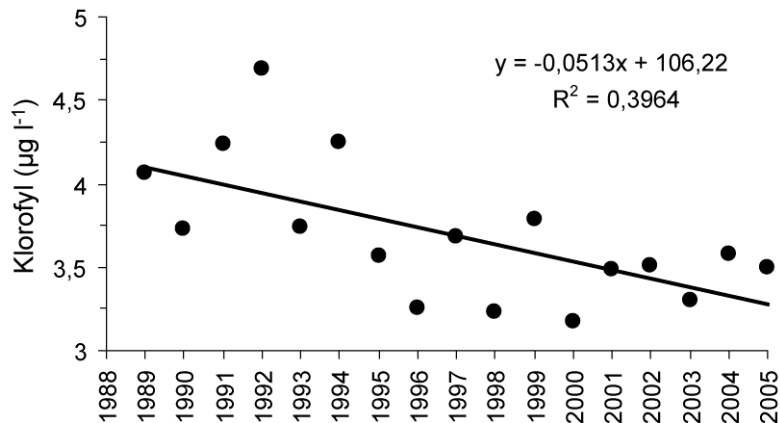
Den lineære regression beregnes med årstal som forklarende variabel. Resultaterne af en regressionsanalyse opstilles i en ANOVA tabel sammen med en tabel for parameterestimaterne, hvor der ligeledes findes en teststørrelse med tilhørende P -værdi. De fleste regnearksprogrammer og statistikprogrammer kan udføre en lineær regression. I tabel 2.4 er vist outputtet fra en lineær regression af middel klorofylkoncentrationen i danske fjorde mod tiden foretaget med Excel. Data er beregnet på basis af alle NOVANA-stationer for perioden 1989 til 2005, i alt 17 år.

Tabel 2.4 ANOVA tabel og parameter estimerer fra lineær regression.

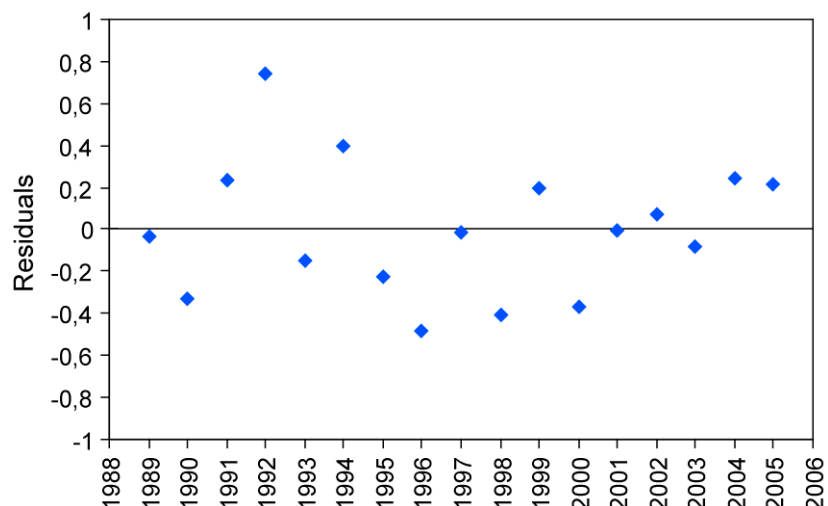
ANOVA					
	fg	SK	MK	F	Signifikans F
Regression	1	1,075513	1,075513	9,850951	0,006762
Residualer	15	1,637679	0,109179		
I alt	16	2,713191			
	Koefficienter	Standardfejl	t-stat	P-værdi	
Skæring	106,2235	32,66766	3,251642	0,005365	
X-variabel 1	-0,05134	0,016358	-3,13862	0,006762	

Fortolkning

For at vurdere om der er sket en tidlig udvikling testes om hældningsparameteren β , som er estimeret til $-0,05134$, kan antages at være lig 0. Dette testes i ovenstående ved både en F-test og en t-test med samme resultat: Sandsynligheden for at $\beta = 0$ er ca. 0,7%, og da denne P-værdi er mindre end 5%, forkaster vi nulhypotesen om, at hældningen er lig nul, dvs. der er sket et signifikant fald. Estimatet for β viser, at klorofylniveauet i de danske fjorde i den givne periode er faldet med $0,05 \mu\text{g l}^{-1}$ i middel om året. Data og den bestemte regressionslinie er vist i figur 2.1.

Figur 2.1 Observationer og den bestemte lineære regression for middel klorofylkoncentrationer i danske fjorde.**Metodens forudsætninger**

Forudsætningen for en lineær regression er, at residualerne er uafhængige og normalfordelte med middelværdi 0 og samme spredning. Dette undersøges lettest ved at plote residualerne fra regressionen mod årstal (figur 2.2).

Figur 2.2 Residualer fra regressionen af middel klorofyl mod årstal.

Ud fra dette plot vurderes grafisk om:

1. residualerne fordeler sig pænt omkring nullinien og har samme størrelsesorden (middelværdi 0 og samme spredning)
2. de fleste residualer ligger tæt på nullinien og færre større residualer (normalfordelte residualer)
3. residualerne fordeler sig tilfældigt omkring nullinien, så der ikke er lange sekvenser af henholdsvis positive og negative residualer (uafhængighed).

Sammenligning med Kendall's τ

Ved anvendelse af Kendall's τ på de samme data fås en non-parametrisk korrelation på -0,41176 med en P-værdi på 0,0211, hvilket betyder, at i dette tilfælde er Kendall's τ mindre effektiv end den lineære regression, forudsat at der er sket en udvikling. Den lineære hældning på -0,051 er lidt større end Sen's hældningsestimator på -0,044, men begge estimater ligger indenfor 95% konfidensgrænserne.

2.4 Lineær regression med sæsonvariation

Formålet med denne analyse er at undersøge, om der er sket en generel udvikling med tiden, og om denne udvikling er fælles for alle sæsoner, eller om den er drevet af enkelte sæsoner. Samtidig er det vigtigt, at der tages højde for en eventuel sæsonvariation i data. Data kan typisk være arrangerede som månedsværdier (månedsgennemsnit). Forudsætningerne til data er som ovenfor anført for den lineære regression.

Metode

Den lineære regression med sæsonvariation har to forklarende variable: årstal som kvantitativ variabel og måned som kvalitativ (kategorisk) variabel. En sådan type analyse kaldes også ANCOVA. Variablen årstal beskriver en generel lineær trend fælles for alle måneder. Variablen måned beskriver en generel sæsonvariation fælles for alle år med separate værdier for hver måned. Krydsvariationen mellem årstal og måneder beskriver en separat lineær trend i data for hver enkelt måned. Signifikansen af denne krydsvariation benyttes til at undersøge, om der er forskel i trenden mellem måneder.

Resultaterne af denne analyse opstilles i en ANOVA tabel, hvor der ligeledes findes en teststørrelse med tilhørende P-værdier. Denne analyse er ikke velegnet til regnearksprogrammer og bør udføres med et statistikprogram.

Nedenfor er vist outputtet fra analyse af månedsmidler for klorofylkoncentrationen i danske fjorde (tabel 2.5). Data er beregnet på basis af alle NOVANA-stationer for perioden 1989 til 2005, i alt 17 år.

Tabel 2.5 Variansanalysetabel for lineær regression med sæsonvariation af månedsmidler for klorofyl.

ANOVA					
	fg	SK	MK	F	Signifikans F
Fælles trend	1	16,0055	16,0055	10,58	<0,0001
Sæsonvariation	11	239,4099	21,7645	27,99	<0,0001
Trend f. måned	11	15,0352	1,3668	1,76	0,0644
Residualer	180	139,9683	0,7776		
I alt	203	410,4188			

Selv om krydsvariationen mellem årstal og måned overordnet set ikke er signifikant på 5% niveau, var der en vis variation i de bestemte trends for de enkelte måneder. Nedenstående hældningskoefficienter viser, at der er sket et signifikant fald i april, maj, juni og august.

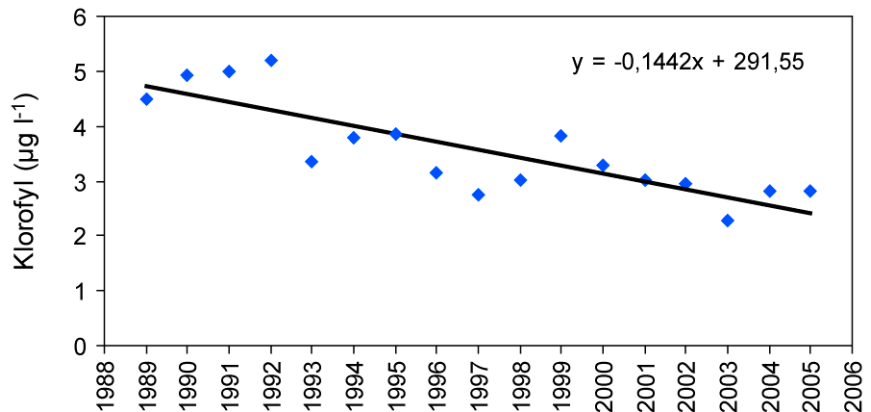
Tabel 2.6 Parameter estimater fra den lineære regression med sæsonvariation af månedsmidler for klorofyl.

Hældning	Koefficienter	Standardfejl	t-stat	P-værdi
Januar	-0,0043	0,0437	-0,10	0,9218
Februar	0,0503	0,0437	1,15	0,2505
Marts	0,0110	0,0437	0,25	0,8008
April	-0,1442	0,0437	-3,30	0,0012
Maj	-0,1014	0,0437	-2,32	0,0213
Juni	-0,1238	0,0437	-2,84	0,0051
Juli	-0,0826	0,0437	-1,89	0,0602
August	-0,0917	0,0437	-2,10	0,0370
September	-0,0380	0,0437	-0,87	0,3851
Oktober	-0,0859	0,0437	-1,97	0,0507
November	-0,0448	0,0437	-1,03	0,3066
December	-0,0308	0,0437	-0,71	0,4810

Fortolkning

Resultaterne i ANOVA-tabellen viser, at der er signifikant forskel på klorofyl-niveauerne mellem de 12 måneder, og at der er sket et signifikant fald for alle månederne som helhed. Derimod er variationen i de bestemte udviklinger mellem måneder ikke signifikant, idet P-værdien er større end 5%. Selv om månedsspecifikke udviklingstendenser ikke kan påvises med tilstrækkelig signifikans, er det dog værd at bemærke, at udviklingen hovedsageligt er styret af forårs- og sommermånederne, hvor klorofylniveauet er faldet med ca. 0,1 $\mu\text{g l}^{-1}$ om året. Udviklingen for april måned er vist i figur 2.3.

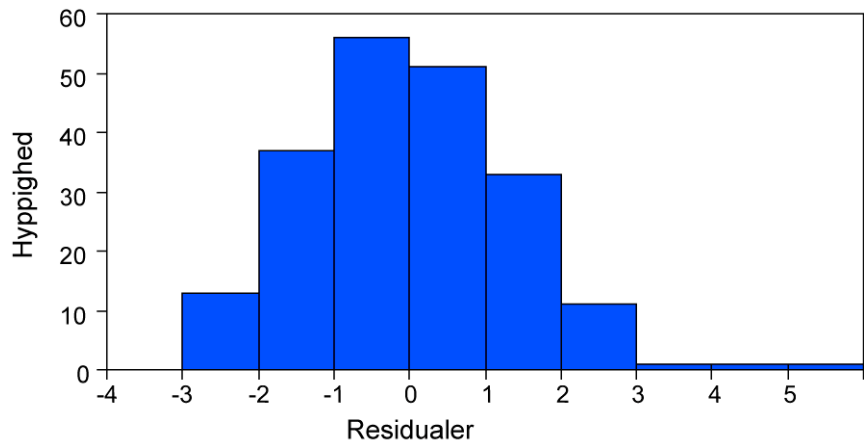
Figur 2.3 Månedsmidler for april måned med den bestemte lineære regression.



Metodens forudsætninger

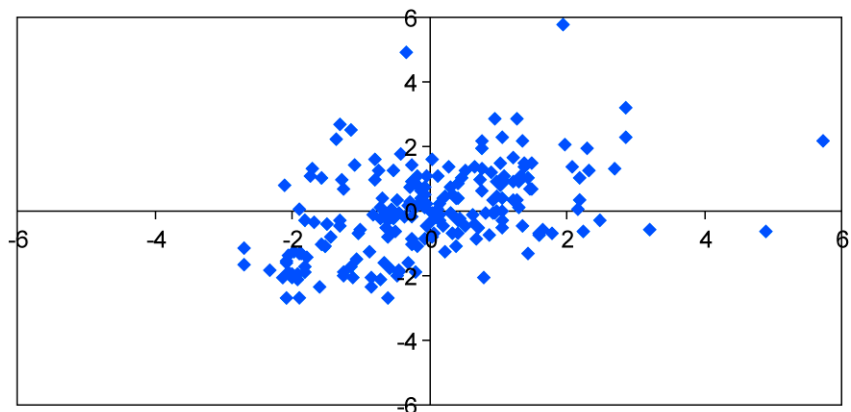
Forudsætningen er som for den simple lineære regression, at residualerne er uafhængige og normalfordelte med middelværdi 0 og samme spredning. Dette kan undersøges ved plots, som beskrevet ovenfor. Da der er flere observationer ved denne analyse i forhold til analysen baseret på årsmidler, kan det ligeledes være en ide at plote et histogram over residualerne for at vurdere om de er normalfordelte (figur 2.4). I vores eksempel er der 3 outliers ud af 204 observationer, som giver en højreskæv fordeling. Ses der bort fra disse 3 outliers, kan normalfordeling af residualerne accepteres ved anvendelse af Kolmogorov-Smirnov test. Fordelingen af residualer er vist nedenfor.

Figur 2.4 Histogram for beskrivelse af residualernes fordeling.



Endvidere kan forudsætningen om uafhængige residualer undersøges ved at plote residualer mod de forrige residualer, dvs. plote residualerne mod sig selv forskudt med 1 observation (figur 2.5). I det konkrete tilfælde er der signifikant korrelation ($r = 0,47$) mellem residualerne. Metoden kan forbedres ved at inkludere en korrelationsparameter til at beskrive afhængigheden mellem observationer, men det ligger udenfor nærværende anvisning at beskrive denne metodik.

Figur 2.5 Residualer afbildet mod forrige måneds residual til analyse af seriel korrelation i data.



3 Ikke-monotone udviklinger

I dette afsnit beskrives to metoder, som benyttes til at beskrive afvigelser fra en lineær udvikling, herunder ikke-monotone trends. Generalized additive models (GAM) er en ikke-parametrisk metode, som undersøger tidsserien for systematiske, lokale afvigelser fra linearitet. Change-point detection er en parametrisk metode til at identificere et ukendt tidspunkt, hvor der sker en ændring i den tidsmæssige udvikling, typisk et knækpunkt eller et spring. Metoderne beskrives først til at håndtere tidsserier bestående af årlige værdier, hvorefter det vises, hvordan metoderne kan udvides til at håndtere tidsserier indeholdende sæsonvariation.

3.1 Generalized additive models (GAM)

I nogle tidsserier med observationer fra vandmiljøet kan der optræde udviklingstendenser, som i starten er stigende men efter et vist tidspunkt begynder at falde igen. Det er især lange tidsserier, der kan indeholde udviklinger, som er vendte. For eksempel i tidsserier som starter i perioden før vedtagelsen af Vandmiljøplan I. Man vil typisk se en stigende tendens i starten og indtil ca. et par år efter 1989, derefter vil man se en faldende tendens, når effekten af de forskellige virkemidler slår igennem. Udviklingen i disse tidsserier kan beskrives ved anvendelse af en GAM analyse.

GAM (generalized additive model) er en række stærke statistiske værktøjer baseret på ikke-parametrisk regression og matematisk udglatningsteknikker (*Hastie & Tibshirani 1990; Chambers & Hastie 1992*). GAM løsner op for den sædvanlige antagelse om linearitet og gør en i stand til at udforske data mere fleksibelt og derved finde strukturer, som ellers ikke ville blive fundet ved anvendelse af normal lineær regressionsanalyse. En udglatningsteknik er et værktøj til at "opsummere" udviklingstendensen for responsen som en funktion af tidspunkt (år, måned). Den producerer et estimat for responsen, som varierer mindre end selve responsen (responsen er udglattet).

GAM egner sig bedst til analyse af tidsserier, hvor udviklingen er vendt langsomt i perioden (en eller flere gange). Hvis ændringen er mere pludselig (spring i målingerne fra et niveau til et andet), så er change-point metoder et bedre alternativ til GAM samt metoderne beskrevet i kapitel 2. Tidsserier med varierende trend samt step changes vil ikke kunne spores ved brug af Mann-Kendall's test eller lineær regression, som er rettet mod monotone og lineære udviklingstendenser. Change-point detection metoder er beskrevet i afsnit 3.2.

GAM er en analysemetode, som tillader os at lade data bestemme, hvilken kurve som skal fittes til data. Modellen i GAM er

$$y_i = f(i) + \varepsilon_i$$

hvor y_i betegner responsen (årlige eller månedlige værdier af en miljøvariable) for årene i , $i = 1, 2, \dots, n$. Størrelsen ε_i angiver afvigelserne fra kurven

(residualer). Det antages, at disse afvigelser følger en normalfordeling. Endelig betegner f kurven som fittes til data. I GAM er det muligt at teste for signifikans af kurven, samt beregne hvor mange frihedsgrader kurven har. En kurve med 2 frihedsgrader svarer til en ret linie, 3 til et 2. grads polynomium, osv.

I GAM kan man vælge mellem flere forskellige udglatningsteknikker. Vi foreslår, at man enten bruger LOESS (Cleveland & Devlin 1988) eller "smoothing splines" (Wahba 1990). Det er muligt at teste, om man kan reducere sammenhængen mellem respons og måletidspunkt til en lineær sammenhæng. Dette gør man ved at beregne følgende størrelse

$$F = \frac{(RSS1 - RSS2)/(df2 - df1)}{RSS1/(n - df2)}$$

hvor

$RSS1$ = total varians minus model varians ved lineær sammenhæng

$RSS2$ = total varians minus varians ved kurve fitting

n = total antal observationer

$df1$ = antal frihedsgrader i lineær model = 2

$df2$ = antal frihedsgrader i udglattet model.

Teststørrelsen F skal vurderes i en F -fordeling med frihedsgrader ($df2 - df1, n - df2$).

Eksempel

Som et eksempel på anvendelsen af GAM til trendanalyse har vi analyseret nitratkoncentrationer målt i Odense Å ved Nr. Broby i perioden 1967 til og med 2005 (figur 3.1). I analysen har vi anvendt simple årsmiddelkoncentrationer. Som man kan se i følgende graf, så påvirkes kurvefittet ikke af outlieren i 1977. Der er et tydeligt toppunkt i koncentrationen omkring 1978 og efter dette år er koncentrationerne svagt faldende indtil 1990 og faldet kraftigt derefter til et niveau lavere end i starten af tidsserien. Vi har ligeledes vist den lineære model i figuren. GAM giver et LOESS fit med 3,4 frihedsgrader og en lineær kurve afvises med en test-sandsynlighed på 0,007. Variansanalysen er vist i tabel 3.1.

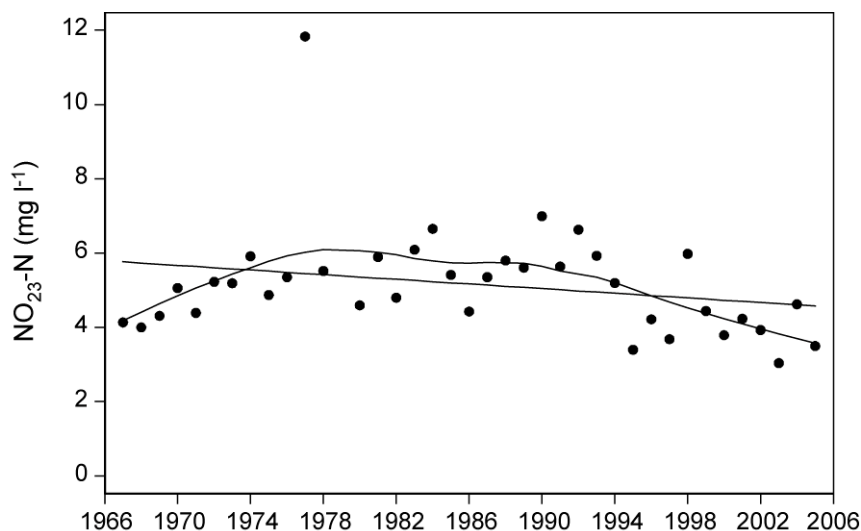
Tabel 3.1 Variansanalysetabel for GAM og lineær regression.

ANOVA					
	Fg	SK	MK	F	Signifikans F
Lineær trend	1	4,79	4,79	2,295	0,1385
LOESS fit*	2,4	21,41*	8,92*	5,58	0,0056
Residualer lineær trend (RSS1)	36	75,16	2,09		
Residualer LOESS fit (RSS2)	33,6	53,89	1,60		
I alt	37	79,96	2,16		

* Bemærk, at varianstabellen ikke helt passer i GAM, idet der er et konstantled, som har 1 frihedsgrad, som ikke er medregnet i LOESS fittet.

Analysen er gennemført i softwaren S-PLUS[®]. Man kan også gennemføre analysen i SAS[®]. Denne software benytter sig af en χ^2 -test for signifikansen af LOESS fittet. Denne test giver en testsandsynlighed på 0,0005.

Figur 3.1 Udvikling i nitratkoncentrationer analyseret vha. lineær og GAM komponenter.



Fortolkning

Metodens resultat illustreres bedst ved et plot, som viser observationer plottet mod årstal sammen med den fittede kurve. Grafen viser strukturen, og selve GAM analysen giver antallet af frihedsgrader, som kurven i grafen estimeres til at være sammensat af. En GAM analyse skal ledsages af en test for, om det er muligt at reducere til en model bestående af en ret linie.

Forudsætninger

GAM metoden benytter sig matematisk af ikke-parametriske udglætnings teknikker. I testen af nulhypotesen om linearitet har man behov for at afvigelserne følger en statistisk fordeling. Vi har i denne anvisning antaget, at det er en normalfordeling, men andre fordelinger kan også antages (*Hastie & Tibshirani 1990*). Metoden fungerer bedst i tidsserier uden abrupte ændringer. Beregninger er særdeles komplicerede og kræver anvendelse af statistik software, fx SAS eller S-PLUS.

3.1.1 GAM med korrektion for sæson

For tidsserier med sæsonvariation er det muligt også at fitte en GAM kurve igennem de observerede værdier. Tidsserier med sæsonvariation kan fx bestå af månedsværdier for en given miljøvariabel.

GAM giver mulighed for kurvefitting af hele tidsserien med alle sæsoner, fitting af en kurve for hver enkelt sæson, samt en kurve for trenden på årsniveau. Kurverne, som fittes til hver sæson, har det samme forløb, men er parallel forskudt.

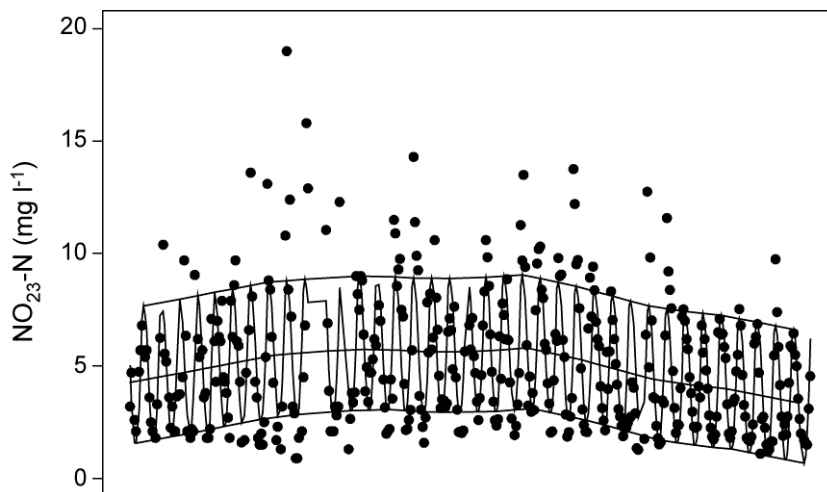
Det er altså muligt at undersøge, om der er sket en generel udviklingstendens med tiden. Udviklingstendensen antages at være fælles for alle sæsoner, men er flyttet op eller ned alt efter det generelle niveau for den pågældende sæson.

Ligesom for regressionsanalyse med sæsonkorrektion, så indgår der to variable i GAM med sæsonkorrektion. Dels årstal som forklarende variabel (kvantitativ størrelse) og dels måned som kategorisk variabel (kvalitativ størrelse).

Eksempel

Anvendelsen af GAM for data med sæson er illustreret med månedsmiddelkoncentrationer af nitrat målt i Odense Å ved Nr. Broby i perioden 1967 til og med 2005. Resultaterne af GAM analysen med sæsonvariation er vist i figur 3.2. Trenden for januar måned har de største værdier og tilsvarende har juli de mindste værdier i figur 3.2.

Figur 3.2 Nitratobservationer sammenholdt med GAM model med sæsonvariation, model for årlig udvikling samt trend for januar og august måneder.



Figur 3.2 viser, at månedstrends har ens forløb, men er parallelforskydte i forhold til gennemsnitlige månedsværdier. Den generelle årlige trend er ens med månedstrend og angiver den gennemsnitlige forløb på årsværdier. Den årlige kurve har samme forløb som i figur 3.1.

Denne analyseform kan kun foretages i SAS[®]. χ^2 -testen giver en test sandsynlighed på en værdi $<0,0001$. Ved anvendelse af ovennævnte F-test, kan man teste om GAM modellen kan reduceres til en regressionsmodel med sæsonkorrektion (se afsnit 2.4). F-testen giver en test sandsynlighed på $<0,0001$.

Fortolkning

Kurverne fortolkes på samme vis, som for ovenfor beskrevne GAM metode for årsdata. Det er som nævnt ikke muligt at teste signifikansen af udviklingstendensen, men det er muligt at teste for reduktionen til en simpel lineær model via en F-test, som beskrevet ovenfor.

Forudsætninger

GAM med korrektion for sæson har nøjagtig de samme forudsætninger som GAM kurvefitning med data på årniveau. Man skal dog være opmærksom på, at der ikke må forefindes seriel korrelation i datasættet.

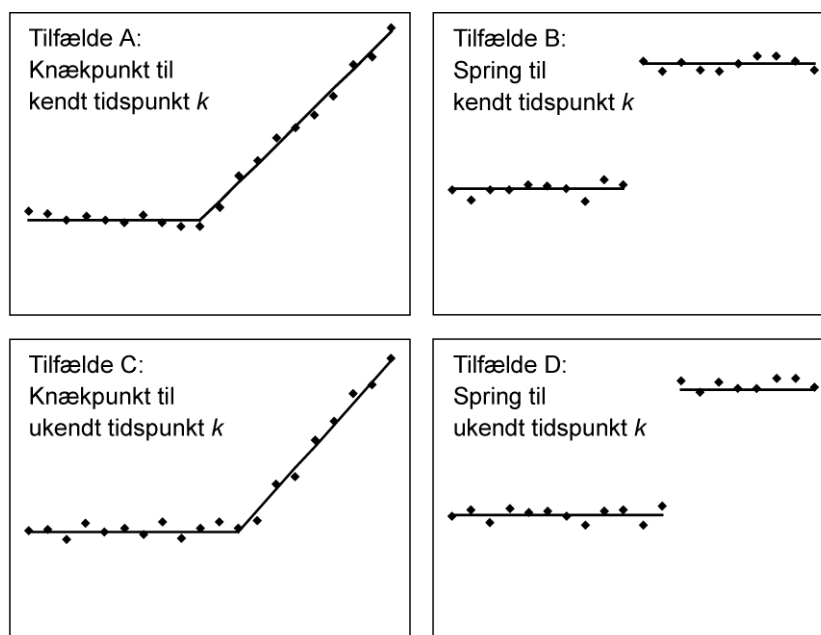
3.2 Change-point detektion

Analyse af lange tidsserier viser ofte at udviklingen ikke nødvendigvis er monoton og i langt de fleste tilfælde ikke lineær. Change-point detek-

tion indbefatter en lang række parametriske og non-parametriske metoder til at undersøge, om der sker et skift i den tidlige udvikling. Problemstillingen omkring change-point detektion går tilbage til udviklingen af CUSUM kort indenfor statistisk kvalitetskontrol (Page 1954), hvorved det kunne spores, om en produktionsproces var ved at "løbe af sporet".

Der skal skelnes mellem fire typer af problemstillinger i relation til change-point detektion (figur 3.3), som er kombinationer af, hvorvidt tidspunktet for ændringen, k , er kendt eller ukendt, og hvorvidt skiftet er kontinuert (knæpunkt) eller diskontinuert (spring). Eksempler på de første to tilfælde (A og B) kunne være, om metodeskift til et kendt tidspunkt har påvirket tidsserien, eller om tidsserierne ændrer sig efter politiske handlingsplaner. Identifikation af skift i tidsserien til et ukendt tidspunkt (tilfælde C og D) har en mere undersøgende tilgang, hvor signifikante ændringer i tidsserien vil lede til diskussioner af, hvad der har forårsaget dette skift. I de to tilfælde med knæpunkter (A og C) er tidspunktet for ændringen, k , en kontinuert størrelse, idet k frit kan variere mellem observationstidspunkterne. Derimod er k en diskret størrelse i de to tilfælde med spring (B og D), idet det kun er muligt at vurdere, om springet er sket mellem to observation, men det er ikke muligt at vurdere præcist, hvor imellem de to observationer skiftet er sket.

Figur 3.3 Fire forskellige typer af ændringer i tidsserier, som vil blive behandlet. De fire typer af modeller kan udvides til forskellige typer af funktionaliteter på hver side af tidspunktet k .



Alle statistiske test er opbygget omkring formulering af en nulhypotese, hvilket er en model for tidsserien uden ændringer, samt en alternativ hypotese, som er en model indeholdende et knæpunkt eller et spring (change-point). Formuleringen af nulhypotesen og den alternative hypotese er forskellig i de 4 tilfælde, og disse vil blive gennemgået i det følgende.

Der findes mange forskellige teststørrelser, som kan bruges til at teste hypotesen om et change-point. De hyppigst benyttede teststørrelser er t-test og F-test under antagelse af normalfordelte data. Disse test er faktisk specialtilfælde af det langt mere generelle likelihood kvotient test, hvor likelihood-funktionen regnes ud for nulhypotesen $L_0(X; \theta_0)$ og den alter-

native hypotese $L_1(X; \theta_1)$, hvor θ_0 og θ_1 angiver parametrene i modellen for henholdsvis nulhypotesen og den alternative hypotese. Test-størrelsen for kvotient testet udregnes som forholdet mellem de to likelihood-funktioner, idet værdier tæt på 1 betyder, at de to modeller (hypoteser) er stort set lige gode, og små værdier vil angive, at den alternative hypotese er bedre til at beskrive data end nulhypotesen

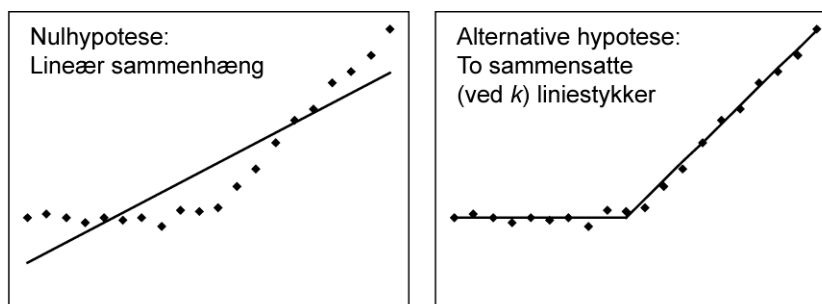
$$LR = \Lambda = \frac{L_0(X; \theta_0)}{L_1(X; \theta_1)}$$

Denne formulering er meget generel og kan anvendes for mange forskellige hypoteser, når blot fordelingen af data kendes. Problemet er dog, at fordelingen af Λ under H_0 ikke altid er kendt, men hvis modellen under H_0 udgør en undermodel af H_1 , så er $-2\log(\Lambda)$ asymptotisk ($n \rightarrow \infty$) χ^2 -fordelt med antal frihedsgrader lig med forskellen i frie parametre mellem H_1 og H_0 ($\text{rang}(\theta_1) - \text{rang}(\theta_0)$). For normalfordelte data med kendt spredning er χ^2 -approximationen eksakt.

3.2.1 Tilfælde A: Knæpunkt til et kendt tidspunkt

I dette tilfælde undersøges om trenden skifter karakter undervejs i tidsserien til et kendt tidspunkt. Nulhypotesen formuleres som en simpel lineær sammenhæng mod alternativet af to sammensatte lineære stykker, som er forbundet i det kendte knæpunkt k (figur 3.4).

Figur 3.4 Afbildning af nulhypotesen og den alternative hypotese for knæpunkt til kendt tidspunkt k .



Lad os antage, at observationerne i tidsserien X_1, X_2, \dots, X_n er normalfordelte, og at deres udvikling med tiden beskrives med følgende model

$$X_t = \begin{cases} \mu + \beta \cdot t & t < k \\ \mu + \beta \cdot t + \delta \cdot (t - k) & t \geq k \end{cases}$$

Signifikansen af knæpunktet kan derfor undersøges ved følgende hypotese:

$$H_0: \delta = 0 \text{ mod alternativet } H_1: \delta \neq 0$$

Denne model kan formuleres inden for rammerne af generelle lineære modeller, og significansen af knæpunktet kan derfor undersøges ved t-test på størrelsen af parameteren δ eller F-test for den variation, som udelukkende kan tilskrives den alternative hypotese. Alternativt kan likelihood-funktionerne for de to hypoteser udregnes, og significansen af knæpunktet undersøges vha. kvotient testet.

Eksempel 1: Fosforniveauet i danske fjorde og kyster

Fosforkoncentrationerne har været faldende efter Vandmiljøplanen blev vedtaget i 1987. Vi vil derfor undersøge, om der er sket en mærkbar ændring i trenden efter 1987. Dette kan udføres som en multipel regression med to variable, hvor den ene er årstal ($t = 1981-2004$) og den anden variabel, δ , har værdien 0 for 1981-1987 og derefter antallet af år siden 1987. Resultaterne opstilles i et variansanalyseeskema og med parameter estimater (tabel 3.2).

Tabel 3.2 Variansanalyseeskema og parameterestimer for eksemplet med fosfor middelkoncentrationer.

Variation	SAK	F	S ²	F-test	P
År	7874,34	1	7874,34	237,69	<0,0001
Knæpunkt	5,79	1	5,79	0,17	0,6802
Residual	695,69	21	33,13		
Total	8575,82	23			

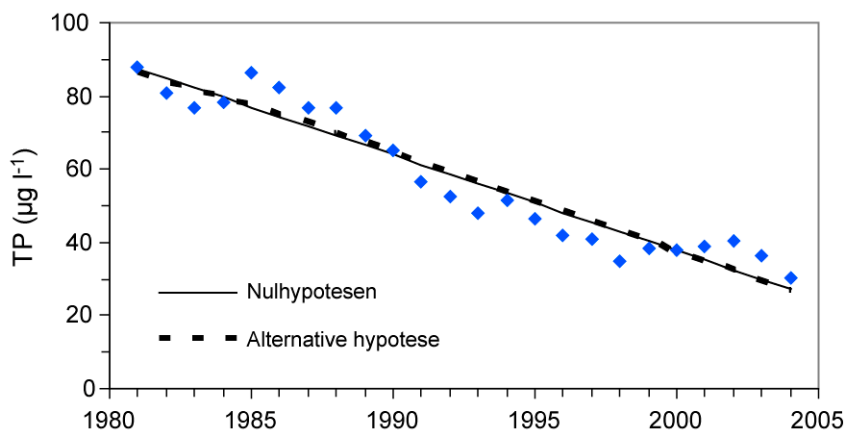
Parameter	Estimat	Spredning	t-test	P
μ (skæringspunkt)	4614,01	1607,98	2,87	0,0092
β (år)	-2,29	0,81	-2,82	0,0102
δ (ændring)	-0,40	0,97	-0,42	0,6802

Likelihood-funktionerne under nulhypotesen og den alternative hypotese bliver $\log(L_0(X; \theta_0)) = -74,56$ og $\log(L_1(X; \theta_1)) = -74,46$, hvilket resulterer i

$$-2 \log(\Lambda) = -2 \log(L_0(X; \theta_0)) + 2 \log(L_1(X; \theta_1)) = 0,198$$

som for χ^2 -fordelingen med 1 frihedsgrad svarer til en P-værdi på 0,6595. Dette viser, at de to eksakte test (F-test og t-test) og det approksimative χ^2 -test giver det samme resultat: der er ikke noget signifikant knæpunkt i 1987 for TP-koncentrationer (accept af nulhypotesen). Den meget lidt signifikante ændring af hældningen i 1987 fremgår tydeligt, når de to trend-modeller plottes, idet de stort set ikke kan skelnes (figur 3.5). Ud fra denne analyse er der derfor intet belæg for at hævde, at den nedadgående trend i TP-niveauerne ændrede sig som følge af vedtagelsen af Vandmiljøplanen. Det skal dog bemærkes, at residualerne omkring linien ikke ser ud til at være uafhængige, hvilket vil blive behandlet senere.

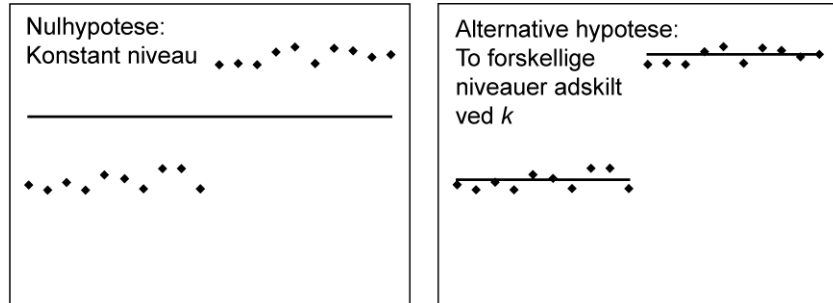
Figur 3.5 Årsmiddelkoncentrationer af TP for danske fjorde og kystnære områder. De to linier viser en lineær trend og en sammensat lineær trend.



3.2.2 Tilfælde B: Spring til et kendt tidspunkt

I dette tilfælde undersøges, om trenden skifter fra et niveau til et andet til et kendt tidspunkt i tidsserien. Nulhypotesen formuleres som et konstant niveau mod alternativt to forskellige niveauer, hvor springet sker til det kendte knæpunkt k (figur 3.6).

Figur 3.6 Afbildning af nulhypotesen og den alternative hypotese for spring til kendt tidspunkt k .



Lad os antage, at observationerne i tidsserien X_1, X_2, \dots, X_n er normalfordelte, og at deres udvikling med tiden beskrives med følgende model

$$X_t = \begin{cases} \mu & t < k \\ \mu + \delta & t \geq k \end{cases}$$

Signifikansen af springet kan derfor undersøges ved følgende hypotese:

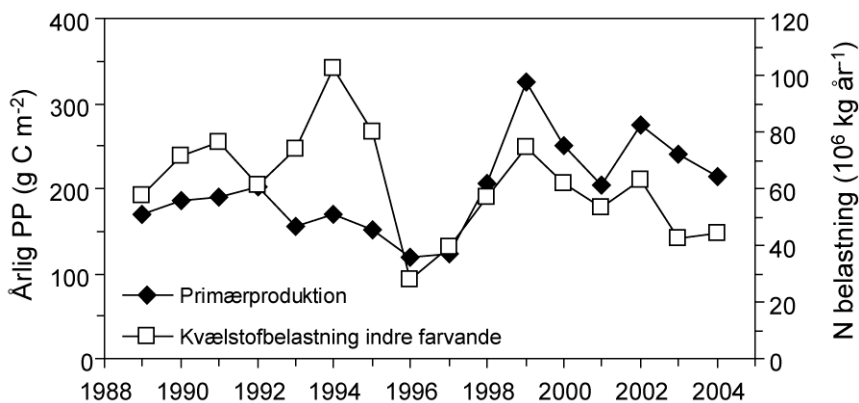
$$H_0: \delta = 0 \text{ mod alternativet } H_1: \delta \neq 0$$

Denne model svarer til en simpel to-stikprøve, men kan også formuleres inden for rammerne af generelle lineære modeller, og significansen af knæpunktet kan derfor undersøges ved t-test på størrelsen af parameteren δ eller F-test for den variation, som udelukkende kan tilskrives den alternative hypotese. Alternativt kan likelihood-funktionerne for de to hypoteser udregnes, og significansen af knæpunktet undersøges vha. kvotient testet.

Eksempel 2: Metodeskift i primærproduktionsmålinger

Ved overgangen til NOVA i 1998 blev den tekniske anvisning for udførelse af primærproduktionsmålinger ændret, og dette påvirkede de beregnede arealproduktioner (figur 3.7). Selv om årsproduktionen (ny produktion) i de åbne farvande afhænger af tilførslen af kvælstof (Carstensen et al. 2003), er der ikke en direkte signifikant sammenhæng mellem kvælstoftilførsel og årsproduktion, og der tages derfor ikke højde for variationer i kvælstoftilførsler i perioden før og efter metodeskiftet.

Figur 3.7 Årlig primærproduktion i Storebælt (station 6700053) og kvælstofbelastningen til de indre danske farvande (oktober-september).



Nulhypotesen er derfor, at årsproduktionen er konstant mod den alternative hypotese, at der sker et niveauspring, $\delta \neq 0$, i $k = 1998$ som følge af den ændrede beregning for arealproduktionen. Resultaterne opstilles i et variansanalytiskema sammen med parameterestimaterne (tabel 3.3).

Tabel 3.3 Variansanalytiskema og parameterestimater for eksemplet med primærproduktion.

Variation	SAK	F	S2	F-test	P
Spring	26612	1	26612	20,45	0,0005
Residual	18219	14	1301		
Total	44831	15			

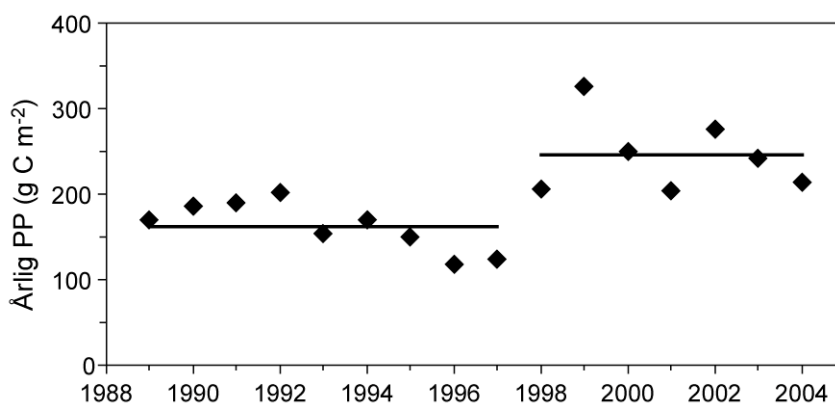
Parameter	Estimat	Spredning	t-test	P
μ (middel)	162,89	12,02	13,55	<0,0001
δ (niveauspring)	82,21	18,18	4,52	0,0005

Likelihood-funktionerne under nulhypotesen og den alternative hypotese bliver $\log(L_0(X; \theta_0)) = -86,21$ og $\log(L_1(X; \theta_1)) = -79,00$, hvilket resulterer i

$$-2 \log(\Lambda) = -2 \log(L_0(X; \theta_0)) + 2 \log(L_1(X; \theta_1)) = 14,41$$

som for χ^2 -fordelingen med 1 frihedsgrad svarer til en P-værdi på 0,0001. Dette viser, at de to eksakte test (F-test og t-test) og det approksimative χ^2 -test giver det samme resultat: der er sket en forøgelse af årsproduktionen på ca. 50% (figur 3.8) ved metodeskiftet (afvisning af nulhypotesen). Kvælstoftilførslen til de indre farvande var ca. 16% højere i perioden 1989-1997 end for 1998-2004, så sandsynligvis giver den nye beregningsmetode mere end 50% højere værdier.

Figur 3.8 Årlig primærproduktion på station 6700053 i Storebælt udregnet ved den gamle metode (1989-1997) og den nye metode (1998-2004).



3.2.3 Tilfælde C: Knæpunkt til et ukendt tidspunkt

I dette tilfælde undersøges om trenden skifter karakter undervejs i tidsserien til et ukendt tidspunkt. Nulhypotesen formuleres som en simpel lineær sammenhæng mod alternativet af to sammensatte lineære stykker, der er forbundet i et knæpunkt k , som kontinuert kan variere over tidsserien (figur 3.4).

Lad os antage, at observationerne i tidsserien X_1, X_2, \dots, X_n er normalfordelte, og at deres udvikling med tiden beskrives med følgende model:

$$X_t = \begin{cases} \mu + \beta \cdot t & t < k \\ \mu + \beta \cdot t + \delta \cdot (t - k) & t \geq k \end{cases}$$

Signifikansen af det ukendte knæpunkt kan derfor undersøges ved følgende hypotese:

$$H_0 : \delta = 0 \text{ mod alternativet } H_1 : \delta \neq 0 \text{ og } 1 \leq k \leq n$$

Modellen under den alternative hypotese har to ekstra frie parametre (δ og k) i forhold til modellen under nulhypotesen. Modellen kan ikke formuleres inden for rammerne af generelle lineære modeller, idet der ikke kan opstilles to design variable for δ og k (eksempelvis vil kolonnen med 0- og 1-taller, som skitseret i eksempel 1, for parameteren δ afhænge af parameteren k). Derfor kan de traditionelle t-test og F-test inden for generelle lineære modeller ikke bruges, hvorimod kvotient testet stadig kan anvendes. Modellen er en ikke-lineær model, som bestemmes ved iterativt at optimere fx likelihood-funktionen med hensyn til parametrene. For at få optimeringsalgoritmen til at konvergere er det ofte en fordel at give et startgæt på parameterverdierne, som er i nærheden af de forventede værdier men ikke alt for tæt på de endelige estimater. Ofte må man prøve sig frem med flere forskellige startgæt. Det vil også være nemmere at opnå konvergens, hvis k begrænses til at variere mellem start- og sluttidspunktet i tidsserien.

Eksempel 3: Fosforniveauet i danske fjorde og kyster (fortsat)

I eksempel 1 forudsattes at en eventuel ændring i trenden for fosforkoncentrationerne skulle ske i 1987 som følge af Vandmiljøplanens vedtagelse. Der var intet påviselig knæpunkt i tidsserien i 1987. Alternativt kunne det undersøges, om der er sket en ændring i trenden et tilfældigt sted i tidsserien. Under nulhypotesen var likelihood-funktionen $\log(L_0(X; \theta_0)) = -74,56$, og ved at formulere en model under den alternative hypotese finder vi parameterestimaterne i tabel 3.4.

Tabel 3.4 Parameterestimater med tilhørende statistik for knæpunktmodellen for fosfor middelkoncentrationer.

Parameter	Estimat	Spredning	t-test	P
μ (skæringspunkt)	6222,31	546,2	11,39	<0,0001
β (starthældning)	-3,10	0,27	-11,26	<0,0001
δ (ændring)	2,54	1,17	2,18	0,0413
k (knæpunkt)	1997,83	2,42	825,53	<0,0001

Likelihood-funktionen bliver $\log(L_1(X; \theta_1)) = -69,55$, hvilket resulterer i

$$-2 \log(\Lambda) = -2 \log(L_0(X; \theta_0)) + 2 \log(L_1(X; \theta_1)) = 10,01$$

hvor det første af de tre liniestykker har hældningen β , det andet liniestykke har hældningen $\beta + \delta_1$ og det tredje liniestykke har hældningen $\beta + \delta_1 + \delta_2$. De tre liniestykker er forbundet i de to knæpunkter k_1 og k_2 . Nulhypotesen er da, at der kun eksisterer et knæpunkt mod alternativet to knæpunkter. Likelihood-funktionen under nulhypotesen er nu lig $\log(L_0(X; \theta_0)) = -69,55$, som skal sammenlignes med $\log(L_1(X; \theta_1)) = -60,84$, hvilket resulterer i en kvotient test:

$$-2\log(\Lambda) = -2\log(L_0(X; \theta_0)) + 2\log(L_1(X; \theta_1)) = 17,43$$

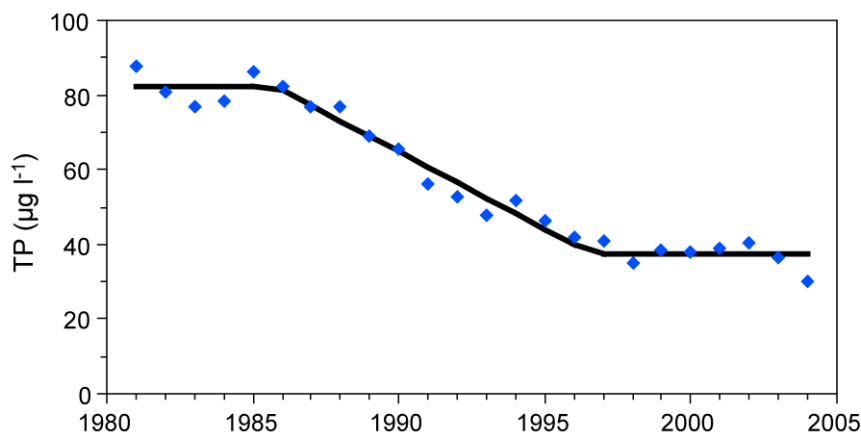
som med χ^2 -fordelingen med 2 frihedsgrader (der benyttes to frie parametre til beskrivelse af hvert knæpunkt) svarer til en p-værdi på 0,0002 (afvisning af nulhypotesen). Data taler derfor for, at der er to knæpunkter i tidsserien frem for et enkelt. Den estimerede model med to knæpunkter viser dog kun svage hældninger i det første og sidste liniestykke. Et konstant niveau i første del af tidsserien undersøges med hypotesen $H_0 : \beta = 0$, som resulterer i $\log(L_0(X; \theta_0)) = -60,89$ og deraf $-2\log(\Lambda) = 0,10$. Da $P = 0,7468$ i χ^2 fordelingen med 1 frihedsgrad accepteres nulhypotesen om et konstant niveau i den første del af tidsserien. På tilsvarende vis undersøges for et konstant niveau i sidste del af tidsserien med hypotesen $H_0 : \delta_1 + \delta_2 = 0$, hvilket resulterer i $\log(L_0(X; \theta_0)) = -62,77$ og deraf $-2\log(\Lambda) = 3,75$. Da $P = 0,0527$ for $\chi^2(1)$ -fordelingen er større end det valgte 5% signifikansniveau, accepteres nulhypotesen om et konstant niveau i den sidste del af tidsserien.

Den estimerede model for udviklingen i TP-koncentrationerne viser et konstant niveau på $82 \mu\text{g l}^{-1}$ frem til ca. 1986 (tabel 3.5), hvor TP faldt med $4,1 \mu\text{g l}^{-1}$ om året indtil ca. 1997, hvor niveauet stabiliserede sig omkring $37 \mu\text{g l}^{-1}$ (figur 3.10).

Tabel 3.5 Parameterestimer med tilhørende statistik for modellen med 2 knæpunkter og konstante niveauer i starten og slutningen af tidsserien.

Parameter	Estimat	Spredning	t-test	P
μ (startniveau)	82,09	1,14	72,17	<0,0001
β (hældning)	-4,14	0,51	-8,09	<0,0001
k_1 (1. knæpunkt)	1985,83	0,85	2345,98	<0,0001
k_2 (2. knæpunkt)	1996,66	0,72	2789,81	<0,0001

Figur 3.10 Den fundne udvikling i årsmiddelkoncentrationer af TP for danske fjorde og kystnære områder. Modellen består af to konstante niveauer med et fald mellem 1986 og 1997.



3.2.4 Tilfælde D: Spring til et ukendt tidspunkt

I dette tilfælde undersøges for spring, som optræder til et ukendt tidspunkt i tidsserien. Nulhypotesen formuleres som et konstant niveau mod alternativt to forskellige niveauer, hvor springet kan ske til et vilkårligt tidspunkt k (figur 3.6).

Lad os antage at observationerne i tidsserien X_1, X_2, \dots, X_n er normalfordelte og at deres udvikling med tiden beskrives med følgende model:

$$X_t = \begin{cases} \mu & t < k \\ \mu + \delta & t \geq k \end{cases}$$

Signifikansen af det potentielle spring kan derfor undersøges ved følgende hypotese:

$$H_0 : \delta = 0 \text{ mod alternativet } H_1 : \exists k \in \{2, \dots, n\} \text{ således at } \delta \neq 0$$

Dette betyder, at det undersøges, om der er sket et skift på et hvilket som helst tidspunkt i tidsserien. Da der derved beregnes flere teststørrelser for den samme hypotese, kan vi ikke anvende de almindelige statistiske principper for hypotesetestning. Nulhypotesen testes som regel ved at udregne en tilsvarende teststørrelse (eksempelvis t-test størrelse, *Jarušková 1996*), og så beregne fordelingen eller kritiske værdier for fordelingen af denne teststørrelse under nulhypotesen. I litteraturen anvendes ofte en teststørrelse svarende til likelihood kvotient testet, men den afgørende forskel er, at fordelingen af denne teststørrelse ikke er χ^2 -fordelt.

$$Z_n = \max_{1 \leq k < n} (-2 \cdot \log \Lambda_k)$$

hvor

$$\Lambda_k = \frac{L_0(X; \mu)}{L_1(X; \mu, \delta)} = \frac{\max_{\mu} \prod_{1 \leq i \leq n} f(X_i; \mu)}{\max_{\mu, \delta} \prod_{1 \leq i < k} f(X_i; \mu) \prod_{k \leq i \leq n} f(X_i; \mu + \delta)}$$

idet $f()$ angiver tæthedsfunktionen og δ angiver ændringen i niveauet μ til tidspunkt k . Da der derved principielt foretages mange test i tilfælde D, vil de kritiske værdier for test af Z_n være højere end for $-2\log(\Lambda)$ i tilfælde B. Den beregnede værdi af Z_n sammenholdes med nedenstående kritiske værdier på 5% signifikansniveau for skellige antal observationer i tabel 3.6. De tabellerede værdier er fundet som 95%-fraktilen i fordelingen af Z_n simuleret 10000 gange under nulhypotesen. Kritiske værdier for flere typer af fordelinger og test kan findes i *Gombay & Horvath (1996)*. Til sammenligning er den kritiske værdi for en kvotient test $\chi^2(1) = 3,84$.

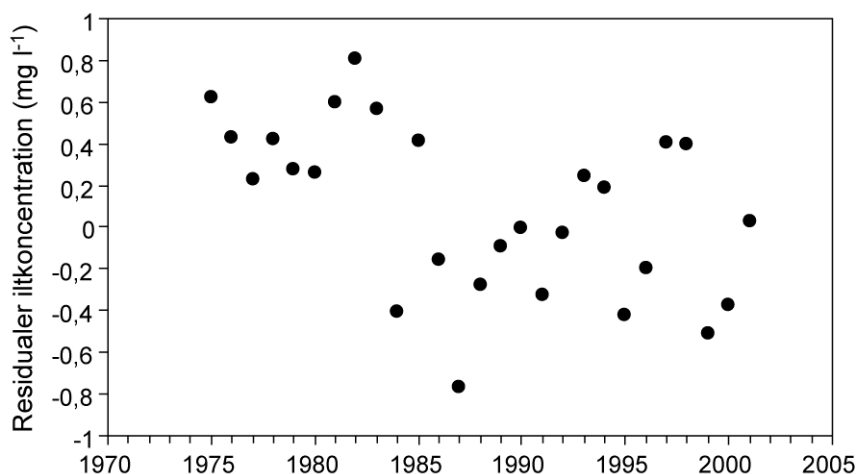
Tabel 3.6 Kritiske værdier for Z_n på 5% signifikansniveau under antagelse af normalfordelte data. Gengivet fra *Gombay & Horvath (1996)*.

N =	C =	N =	C =	N =	C =	N =	C =	N =	C =
6	11,09	11	9,73	16	9,61	21	9,30	26	9,55
7	10,50	12	9,61	17	9,49	22	9,30	27	9,18
8	10,30	13	9,55	18	9,30	23	9,42	28	9,24
9	10,05	14	9,18	19	9,18	24	9,36	29	9,42
10	9,73	15	9,36	20	9,24	25	9,30	30	9,30

Eksempel 4: Iltsvind i de indre danske farvande

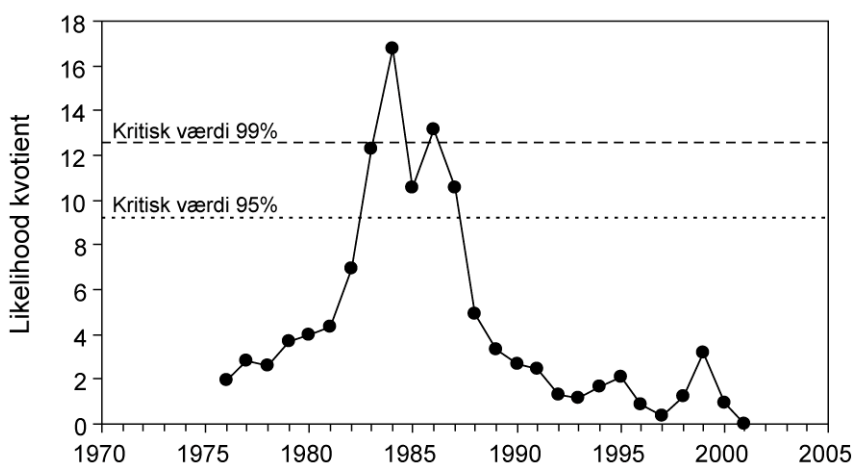
Conley et al. (in press) beskriver udviklingen i iltkoncentrationen i bundvandet i de indre danske farvande. Efter at de overordnede tidlige variationer er beskrevet ud fra kvælstofbelastning fra land, den advektive transport i bundlaget og temperaturen viste residualerne fra denne analyse et markant skift i midten af 1980'erne (figur 3.11). Dette spring fortolkes som et regimeskift mellem to tilstande i bundfaunaen, et samfund med høj diversitet og et samfund med et fåtal af iltsvindstolerante arter. Vi vil nu undersøge, om der findes et spring i niveauet for residualerne på et tilfældigt tidspunkt i tidsserien mod nulhypotesen, at residualerne har et konstant niveau.

Figur 3.11 Residualer for iltkoncentrationen ved bunden i de indre danske farvande (juli-november) efter variationer som følge af kvælstofbelastning, advektiv transport i bundlaget og temperatur er forklaret. $n = 27$ år.



Likelihood-funktionen for nulhypotesen er $\log(L_0(X; \theta_0)) = -13,38$, og likelihood-funktionen beregnes for 26 potentielle skift i tidsserien mellem 1976 og 2001, hvilket resulterer i værdier af $\log(L_1(X; \theta_1))$ mellem $-13,37$ og $-5,00$. Likelihood-kvotienten har den maksimale værdi for $k = 1984$ (figur 3.12), som er større end 95%- og 99%-fraktile for Λ_k under nulhypotesen. Vi forkaster derfor nulhypotesen og accepterer, at der er sket et skift i iltkoncentrationen på $-0,57 \text{ mg l}^{-1}$ fra 1983 til 1984.

Figur 3.12 Den beregnede værdi af Λ_k for spring i tidsserien mellem $k = 1976$ og 2001.



4 Diskussion af metoder

Denne anvisning indeholder beskrivelser af statistiske metoder til analyser af de lange tidsserier. Den vigtigste indgang til at belyse den tidlige udvikling i en given miljøvariabel er en grafisk afbildning af udviklingen, som kan dirigere analysen i den rigtige retning. En sådan afbildning kan i første omgang bruges til at undersøge, om der er tale om en monoton stigende eller aftagende udvikling, eller om udviklingen er sammensat af flere forskellige tendenser. Det kan i nogle tilfælde være svært visuelt at afgøre om tendensen udelukkende er monoton, da enkelte observationer kan give indtryk af en ændring i trenden. GAM er i den sammenhæng et nyttigt værktøj til en indledende statistisk analyse, idet analysen vil give svar på, om en lineær trend er tilstrækkelig, eller om der er signifikante højere ordens udviklinger. Hvis der er variationer i tidsserien ud over den lineære udvikling, vil GAM analysen også indikere, hvorvidt en udvikling er monoton eller ikke-monoton. GAM analysen vil ikke kunne identificere abrupte spring i data, idet trenden beskrives ved en glat funktion. Det må derfor afgøres ud fra afbildning af data, om udviklingen indeholder spring.

Den lineære regression, GAM modellen og change-point detection metoderne forudsætter alle, at data følger en parametrisk fordeling. Typiske fordelinger, som kan beskrives ved disse modeller, er normal fordelingen, lognormal fordelingen (ved transformation), gamma fordelingen, binomial fordelingen og poisson fordelingen. Mann-Kendall's trend test er derimod ikke-parametriske, hvilket betyder, at der ikke forudsættes nogen fordeling for data, idet det afgørende for analysen er observationernes indbyrdes rangordning. Ikke-parametriske metoder er mere robuste overfor outlier observationer, men til gengæld knapt så effektive til at påvise tendenser med tilstrækkelig styrke ved korte tidsserier. Ikke-parametriske metoder har den fordel, at brugeren ikke behøver at tænke i fordelinger, men til gengæld er metoderne designet til specifikke problemstillinger uden større fleksibilitet. For eksempel er det forholdsvis overkommeligt at inkludere andre forklarende variable i en parametrisk analyse (ferskvandsafstrømning, salinitet, m.m.), foruden at de enkelte observationer kan vægtes afhængig af antallet af målinger, som indgår til at beregne observationerne til trendanalysen (eksempelvis antal observationer til beregning af månedsgennemsnit). Desuden er det muligt for langt de fleste observationer, evt. ved passende transformation, at tilnærme data til en parametrisk fordeling. En stor del af observationerne i overvågningsprogrammet er koncentrationsmålinger, som kan være normal eller lognormal fordelte. Tælleletal (fx antal arter i en prøve eller antallet af positive test ud af et total antal) beskrives typisk ved poisson eller binomial fordelingen. Kategoriske data (eksempelvis indeks for imposex i snegle eller Dansk VandløbsFauna Index) kan beskrives ved multinomial fordelingen.

Derimod forudsætter både de parametriske og ikke-parametriske metoder, at observationerne er uafhængige medmindre metoden er designet til at kunne håndtere serielt korrelerede observationer. Den beskrevne metode for Mann-Kendall's sæson trend test kan håndtere korrelerede observationer, hvorimod de andre metoder med undtagelse af GAM kan

udvides til at håndtere korrelation mellem observationer. For den lineære regression m/u sæson beskrives korrelation typisk ved en 1. ordens korrelationsparameter, som indgår i kovariansmatricen for observationerne og estimeres som en del af modellen. Sådanne modeller kaldes blandede modeller. Change-point detection metoderne kan ligeledes udvides til at håndtere korrelerede observationer ved at formulere problemet inden for blandede modeller (tilfælde A, B og C). I tilfælde D (spring til ukendt tidspunkt) er den vigtigste ændring, at de kritiske værdier for testet bliver større, når der er seriel korrelation i data. Disse problemstillinger er yderligere behandlet i *Tang & MacNeill (1993)*, *Kim (1996)* og *Antoch et al. (1997)*. GAM metoden finder stadig anvendelse som beskrivende værktøj til udviklingen i data, men signifikansen af komponenterne, som indgår i GAM modellen kan ikke bruges, når observationerne er serielt korrelerede.

5 anbefalinger

Trendanalyser bør udføres efter følgende koncept:

1. Afbild data og vurder om udviklingen er lineær, monoton eller ikke-monoton. Anvend GAM som et beskrivende værktøj til at analysere om en lineær trend er tilstrækkelig til at beskrive udviklingen (hvis den glatte trendkurve, ud over den lineære del, ikke er signifikant). Ud fra den deskriptive analyse vurderes om udviklingen skal beskrives som lineær (pkt. 2), monoton men ikke lineær (pkt. 3), sammensat af forskellige tilnærmelsesvis lineære tendenser (pkt. 4) eller abrupt spring mellem to eller flere niveauer (pkt. 5). GAM analysen kan også udgøre trendanalysen alene, hvis der ikke ønskes en mere kvantitativ vurdering af udviklingen med estimater for hældninger, knæpunkter, m.m.
2. Hvis trenden kan beskrives som en lineær udvikling, foretages en lineær regression af data, og residualerne undersøges for korrelation og normalfordeling. Evt. foretages transformation af data eller den lineære regression udføres under antagelse af en anden parametrisk fordeling.
3. Hvis trenden er gradvist aftagende eller stigende (monoton) anvendes Mann-Kendall's trend test.
4. Hvis tidsserien ændrer gradient i løbet af tidsserien anvendes change-point detection metoder (tilfælde A eller C), og residualerne undersøges for korrelation og normalfordeling. Evt. foretages transformation af data eller metoden udføres under antagelse af en anden passende parametrisk fordeling.
5. Hvis udviklingen springer mellem to niveauer anvendes change-point detection metoder (tilfælde B og D), og residualerne undersøges for korrelation og normalfordeling. Evt. foretages transformation af data eller metoden udføres under antagelse af en anden passende parametrisk fordeling.

Hvis data indeholder sæsonvariationer, anvendes de respektive metoder for data med sæsonsvingninger. Alternativt kan sæsonvariationen fjernes ved at bestemme de forskellige sæsonkomponenter og derefter subtrahere disse fra tidsserien.

6 Referencer

Antoch, J., Hušková, M. og Prášková, Z. 1997: Effect of dependence on statistics for determination of change. – *Journal of Statistical Planning and Inference* 60: 291-310.

Carstensen, J., Conley, D.J. & Müller-Karulis, B. 2003: Spatial and temporal resolution of carbon fluxes in a shallow coastal ecosystem. *Marine Ecology Progress Series* 252: 35-50.

Chambers, J.M. & Hastie, T.J. (Ed.) 1992: *Statistical models in S*. Pacific Grove. Wadsworth & Brooks/Cole.

Cleveland, W.S. & Devlin, S.J. 1988: Locally-weighted regression: An approach to regression analysis by local fitting. – *Journal of American Statistical Association* 83: 596-610.

Conley, D.J., Carstensen, J., Ærtebjerg, G., Christensen, P.B., Dalsgaard, T., Hansen, J.L.S. & Josefson, A.B. (in press): Long-term changes and impact of hypoxia in Danish coastal waters. – *Ecological Applications*.

Conover, W.J. 1980: *Practical nonparametric statistics*. Second Edition. John Wiley and Sons, New York.

Gilbert, R.O. 1987: *Statistical methods for environmental pollution monitoring*. Van Nostrand Reinhold. New York.

Gombay, E. & Horvath, L. 1996: On the rate of approximations for maximum likelihood tests in change-point models. – *Journal of Multivariate Analysis* 56: 120-152.

Hastie, T.J. & Tibshirani, R. J. 1990: *Generalized additive models*. New York: Chapman and Hall.

Helsel, D.R. & Hirsch, R.M. 1992: *Statistical methods in water resources*. Elsevier. Amsterdam.

Hirsch, R.M. & Slack, J.R. 1984: A nonparametric trend test for seasonal data with serial dependence. – *Water Resources Research* 20: 727-732.

Hirsch, R.M., Slack, J.R. & Smith, R.A. 1982: Techniques of trend analysis for monthly water quality data. – *Water Resources Research* 18: 107-121.

Jarušková, D. 1996: Change-point detection in meteorological measurements. – *Monthly Weather Review* 124: 1535-1543.

Kendall, M.G. 1975: *Rank correlation methods*. Charles Griffin, London.

Kim, H.-J. 1996: Change-point detection for correlated observations. – *Statistica Sinica* 6: 275-287.

Page, E.S. 1954: Continuous inspection schemes. - *Biometrika* 41: 100-116.

Tang, S.M. & MacNeill, I.B. 1993: The effect of serial correlation on tests for parameter change at unknown time. - *The Annals of Statistics* 21: 552-575.

van Belle, G. & Hughes, J.P. 1984: Nonparametric tests for trend in water quality. - *Water Resources Research* 20: 127-136.

Wahba, G. 1990: Spline functions for observational data. - CBMS-NSF Regional Conference series. SIAM, Philadelphia.

Bilag A - Matematiske definitioner af gennemsnit, median, tidsvægtede gennemsnit og vandføringsvægtede gennemsnit

Som inputvariable til trendanalyserne er der nævnt en række deskriptive statistiske størrelser for en typisk årlig eller månedlig miljøvariabel, som skal analyseres, fx koncentrationer af et næringsstof i vandløb, søer eller marine områder. Disse deskriptive statistiske størrelser er gennemsnit, median, tidsvægtede gennemsnit og vandføringsvægtede gennemsnit.

I det følgende gives en matematisk beskrivelse af, hvordan disse størrelser beregnes. Derfor antager vi, at x_1, x_2, \dots, x_N er de givne observationer af en miljøvariabel, fx koncentrationer af totalt kvælstof målt i en bestemt periode på en bestemt station.

Gennemsnit

Det sædvanlige (aritmetiske) gennemsnit er defineret som summen af de givne observationer divideret med antallet af observationer. Matematisk beskrives gennemsnittet som:

$$\bar{x} = \frac{1}{N}(x_1 + x_2 + \dots + x_N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$$

Median

Median angiver den typiske observerede værdi og er således upåvirket af nogle enkelte meget store eller små værdier. Medianen beregnes ved at rangordne observationerne. Hvis N er ulige, så er medianen den midterste værdi af de rangordnede observationer. Medianen har den egenskab, at halvdelen af observationerne er mindre end og den anden halvdel er større. Hvis N er lige, så er medianen defineret som gennemsnittet af observationen lige under midten og observationen lige over midten.

Tidsvægtede gennemsnit

Denne størrelse benyttes især ved beregning af årsgennemsnit af koncentrationsmålinger pr. station, idet en prøvetagningsstrategi med flere målinger i vintermånederne end i sommermånederne vil give det almindelige gennemsnit en bias med vinterværdier, og dermed ikke afspejle den med hensyn til tiden gennemsnitlige koncentration. Det tidsvægtede gennemsnit beregnes på følgende vis: Antag at x_i er målt til tiden t_i i en periode med M døgn ($1 \leq t_i \leq M$). Beregn for $i = 1, 2, \dots, N - 1$

$$x_j = \frac{x_i \cdot (t_{i+1} - j) + x_{i+1} \cdot (j - t_i)}{t_{i+1} - t_i}, \text{ for } t_i < j < t_{i+1}$$

x_j angiver således de lineært interpolerede døgnkoncentrationer for døgn mellem t_i og t_{i+1} . For $1 \leq j \leq t_1$ sættes

$$x_j = x_1$$

og for $t_N \leq j \leq M$ sættes

$$x_j = x_N$$

Nu kan det tidsvægtede gennemsnit defineres som:

$$\bar{x}_t = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M x_j$$

Matematisk set er det tidsvægtede gennemsnit et aritmetisk gennemsnit af alle døgnkoncentrationer, beregnet ved lineær interpolation, i perioden med M døgn.

Vandføringsvægtede gennemsnit

Da mange miljøvariable målt i vandløb afhænger af størrelsen af vandføringen, vil det almindelige gennemsnit have en bias, hvis koncentrationsmålingerne er taget ved overvejende lave eller overvejende høje vandføringer. Det aritmetiske gennemsnit vil derfor ikke afspejle gennemsnitskoncentrationen med hensyn til vandløbets vandføringer. Det vandføringsvægtede gennemsnit beregnes således: Lad T betegne transporten af det pågældende stof i en periode på M døgn og lad Q betegne den samlede vandføring i perioden. Det vandføringsvægtede gennemsnit defineres som

$$\bar{x}_q = \frac{T}{Q} = \frac{\sum_{j=1}^M x_j \cdot q_j}{Q} = \sum_{j=1}^M w_j \cdot x_j$$

hvor

$$w_j = \frac{q_j}{Q}$$

Det vandføringsvægtede gennemsnit er således matematisk set et vægtet gennemsnit af døgnkoncentrationer og vægtene er døgnmiddelvandføringsens andel af den samlede vandføring. Døgnkoncentrationer er bestemt ved lineær interpolation mellem de målte koncentrationer (x_1, x_2, \dots, x_N) som under tidsvægtede gennemsnit.

Danmarks Miljøundersøgelser

Danmarks Miljøundersøgelser – DMU – er en forskningsinstitution i Miljøministeriet.
DMU's opgaver omfatter forskning, overvågning og faglig rådgivning inden for natur og miljø.

Henvendelser kan rettes til:

URL: <http://www.dmu.dk>

Danmarks Miljøundersøgelser
Frederiksborgvej 399
Postboks 358
4000 Roskilde
Tlf.: 46 30 12 00
Fax: 46 30 11 14

*Direktion
Personale- og Økonomisekretariat
Forsknings-, Overvågnings- og Rådgivningssekretariat
Afd. for Systemanalyse
Afd. for Atmosfærisk Miljø
Afd. for Marin Økologi
Afd. for Miljøkemi og Mikrobiologi
Afd. for Arktisk Miljø*

Danmarks Miljøundersøgelser
Vejlsovej 25
Postboks 314
8600 Silkeborg
Tlf.: 89 20 14 00
Fax: 89 20 14 14

*Forsknings-, Overvågnings- og Rådgivningssekretariat
Afd. for Marin Økologi
Afd. for Terrestrisk Økologi
Afd. for Ferskvandsøkologi*

Danmarks Miljøundersøgelser
Grenåvej 14, Kalø
8410 Rønde
Tlf.: 89 20 17 00
Fax: 89 20 15 15

Afd. for Vildtbiologi og Biodiversitet

Publikationer:

DMU udgiver populærfaglige bøger ("MiljøBiblioteket"), faglige rapporter, tekniske anvisninger samt årsrapporter.
Et katalog over DMU's aktuelle forsknings- og udviklingsprojekter er tilgængeligt via World Wide Web.
I årsrapporten findes en oversigt over det pågældende års publikationer.

Anvisningen beskriver statistiske metoder til trendanalyse af monotone og ikke-monotone udviklinger i overvågningsdata. Anvisningen indbefatter både parametriske og ikke-parametriske metoder. Fremstillingen er generel med eksempler til illustration af metoderne, men analyserne vil kunne tilpasses konkrete overvågningsdata. Anvisningen tjener som inspiration til nye måder at undersøge tidslige udviklinger i overvågningsdata.