Modellering af nitrat fra udvaskning til kildeplads

Afgangsprojekt

1. juni 2016

Aalborg Universitet
Vand & Miljø

Kristian Stokbro Thomsen
Teis Stouby Friis Nielsen

AALBORG UNIVERSITY
STUDENT REPORT

Det Teknisk-Naturvidenskabelige Fakultet
School of Engineering and Science
Sofiendalsvej 11
9200 Aalborg SV
http://www.ses.aau.dk

Titel:

Modellering af nitrat fra udvaskning til kildeplads

Projektperiode:
1. september 2015 - 1. juni 2016

Forfattere:

Kristian Stokbro Thomsen

Teis Stouby Friis Nielsen

Vejledere:
Jacob Birk Jensen

Ole Munch Johansen

Oplagstal: 5
Sidetal: 142
Appendiks-sidetal: 23
Bilags CD: 151 files
Afsluttet den: 01-06-2016

Rapporten må offentliggøres efter aftale med forfatterne.

Synopsis:

Nærværende rapport omhandler modellering af nitrat fra udvaskning til kildeplads for et område sydvest for Aalborg. I dette område er der påvist stigende nitratkoncentrationer potentielt til risiko for forsyningssikkerhed af rent drikkevand til den almene forbruger i fremtiden.
En til formålet uprøvet grey box metode opstilles til modelleringen af den umættede zone til simulering af nitrattransport i både enkelt- og dobbeltporøse medier. Strømningsresultaterne fra en udleveret grundvandsmodel benyttes til partikeltracking, hvilket udgør nitrattransporten i den mættede zone. Den umættede og mættede zone sammenkobles i et Modelkompleks og anvendes stokastisk ved GLUE-metodologien til belysning af prædiktions- og parameterusikkerhed. Hertil foretages en validering af Modelkompleksets evne til at simulere nitratkoncentrationer.
Modelkomplekset anvendes til fremskrivning af nitratkoncentrationen i udvalgte vandforsyningsboringer til år 2100. Heraf udarbejdes, på baggrund af det opstillede Modelkompleks, en langsigtet risikovurdering. Hertil undersøges effekten af allerede etablerede indsatser for nitratbeskyttelse i helhedsplanområdet nær Drastrup. Desuden implementeres Fødevare- og landbrugspakken som ændret nitratudvaskning, hvor effekten af denne undersøges. Afslutningsvis udpeges grundvandsdannende områder, hvor det vurderes til særlig gunst at foretage en arealomlægning på baggrund af et ekstremscenarie.

Forord

Nærværende rapport, *Modellering af nitrat fra udvaskning til kildeplads*, er udarbejdet af Teis Stouby Friis Nielsen og Kristian Stokbro Thomsen, kandidatstuderende ved Vand og Miljø, School of Engineering and Science, Det Teknisk-Naturvidenskabelige Fakultet, Aalborg Universitet. Rapporten er et mellemlangt (45 ECTS) afgangsprojekt udarbejdet i perioden 1. september 2015 til 1. juni 2016. Projektet omhandler opsætning, validering og anvendelse af et innovativt, stokastisk Modelkompleks til modellering af nitrat fra udvaskning til kildeplads. Rapporten tager udgangspunkt i området sydvest for Aalborg, hvor der påvises stigende nitratkoncentrationer i den almene vandforsyning.

Rapporten er udført i samarbejde med NIRAS A/S, Aalborg. Der skal derfor rettes en særlig tak til NIRAS A/S for at stille lokaler, opstille projektrelevante seminarer og yderligere praktisk hjælpsomhed i løbet af perioden for udarbejdelse af rapporten.

Læsevejledning

Rapporten består af 4 hoveddele; Undersøgelse af nitratproblematikken, Opsætning af Modelkompleks til simulering af nitrat fra udvaskning til kildeplads, Evaluering af Modelkomplekset og Risikovurdering. Igennem rapporten vil der introduceres flow-diagrammer, således metoden for tilvejebringelse af resultatet og opnåelse af formålet er klarlagt. Læser vil opleve reference ledende til appendiks eller bilags-CD. Appendiks indeholder supplerende materiale til rapporten, hvor der refereres som appendiks efterfulgt af blokbogstav og nummer, eksempelvis appendiks A.1. Hvis der er supplerende materiale til et kapitel, vil henvisningen tildeles ét specifikt blokbogstav i appendiks. Indhold i elektronisk bilag fremgår efter indholdsfortegnelsen til rapporten. Elektroniske bilag vedlægges på en CD bagerst i rapporten. Bilags-CD indeholder modeller, data, samtlige dokumenter, der er angivet i litteraturlisten med undtagelse af hjemmesider og bøger, således resultater fra rapporten kan reproduceres. Referencer til elektronisk bilag vil fremgå som bilags-CD efterfulgt af blokbogstav, nummer og sti, eksempelvis bilags-CD D.1 - *mappe- eller filnavn*.

Symbolliste fremgår på side 1 og vil indeholde forklaring samt sidetal for, hvornår symbolet anvendes i rapporten første gang. Igennem rapporten opstilles ligeledes symbolforklaring med tilhørende enhed.

I nærværende rapport anvendes Harvard Metode som referencesystem. Referencen placeres efter teksten, hvor referencen tilknyttes. Hvis referencen er placeret inden punktum er denne tilhørende den isolerede sætning. Er referencen placeret efter punktummet tilhører referencen hele det foregående afsnittet. Referencen indeholder efternavnet på forfatteren efterfulgt af året for udgivelse. Hvis mere end to forfattere, vil referencen fremgå som med efternavn for første forfatter alfabetisk efterfulgt af "et al", eksempelvis: [Jensen et al. 2010]. På de enkelte figurer i rapporten, er henvisning ligeledes anvendt i henhold til Harvard metoden. Figurer uden referencer er forfattet af projektforfatterne med mindre figuren illustrer Sydvest-området. Figurer der er redigeret fra en reference vil være angivet med ”#”. En reference til en figur vil være af formen: figur *nummer*. Hvis flere figurer er placeret under samme reference, vil den efterfølgende signaturforklaring være tilhørende samtlige figurer. Til opbygning af baggrundskort i figurer anvendes shape-filer fra NIRAS [2015] og Geodatastyrelsen [2015]. Referencer til tabeller og formler er tilsvarende. Højdesystem er DVR90 mens koordinatsystem er UTM32.

Abstract

This report examines modelling of nitrate from the root zone to extraction wells in the Sydvest-området. In this particular area, increased nitrate concentrations in the drinking water are causing potential risk for the security of supply of clean drinking water for the consumers in the future. The primary source of nitrate in the area derives from agricultural over-fertilizing of the crops. In spite of comprehensive groundwater protection in the area, only minor effects of these seem to be monitored.

A grey box method is established to simulate transport of nitrate in the unsaturated zone for both single and double porous media. The model is set up as a simple one-dimensional mass balance model for the unsaturated zone and interconnects existing data from a groundwater model. Thus, using complex methods often lead to a corresponding difficult parametrisation on a regional scale. The groundwater model and the flow field make it is possible to track particles in the saturated zone from the groundwater table, where the particles have been inserted, to extraction at wells. The modelling of nitrate transport in the unsaturated and saturated zone is connected in a so-called Modelkompleks. This Modelkompleks, which is optimized in regards of calculation time, is used stochastic by the GLUE methodology.

In the stochastic analysis it is found that the primary parameters regarding the unsaturated zone model is particularly insensitive. It is concluded that correlation between transport describing parameters is present. These parameters are capable of scaling the breakthrough of nitrate in time. This includes the double porous media model in the unsaturated zone. A more simplistic method using a linear reservoir approach is considered, it is, however, not suitable for this report's specific configuration. A validation of the performance of the Modelkompleks is established by including and modelling a number of additional extraction wells. It is found that the validation of the Modelkompleks is delimited by erroneous placing of the reduction zone in the saturated zone.

Finally, the Modelkompleks is used in a long-term risk assessment by extrapolating nitrate concentrations at extraction wells until the year of 2100. Based on the risk assessment it is found that particularly extraction well 34.2407, 34.908 and 34.1670 are to be at risk of exceeding the limit for nitrate in drinking water within the extrapolation period. In addition, the effects of already established actions to reduce nitrate concentrations in the area of Drastrup is included in extrapolation. Overall, the implemented action plan has a reducing effect on the nitrate concentration within 17 to 59 years from implementation, which occurred in the year of 2000. The effect is variable and is deemed most efficient at well 34.2407 and 34.1670. The action plan does not prevent exceeding the nitrate concentration limit at $50\,\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}$. A future abandonment of extraction wells at AKV Drastrup 1 is deemed probable.
Moreover, the relevant implementation of the Fødevare- og landbrugspakke is included to examine the effects of national initiatives regarding nitrate. By implementing a 10 % increased leaching, a minimal impact on nitrate concentration is simulated. Lastly, every catchment area is established as an area of solely nature as an extreme scenario. This results in an identification of areas, where initiatives to protect the groundwater from leeching nitrate is particular effective.

Indholdsfortegnelse

1 Symbol- og akronymliste **1**

2 Indledning **3**

I Undersøgelse af nitratproblematikken **5**

3 Sydvest-området **7**
3.1 Nitratforurening af grundvand og arealanvendelse 8
3.2 Regulering af nitratudvaskning 12
3.3 Geologisk sammensætning af umættet zone 16
3.4 Sammenfatning 21

4 Problemformulering **23**

II Opsætning af Modelkompleks til simulering af nitrat fra udvaskning til kildeplads **25**

5 Systemanalyse **27**
5.1 Procesforståelse 27
5.2 Konceptuel model 30
5.3 Metode 31

6 Modellering af gennembrudskurver i den umættede zone **33**
6.1 Formål 33
6.2 Metode 33
6.3 Modelområde 34
6.4 Opsætning 35
6.5 Modelinput 44
6.6 Præliminær parameteranalyse 49
6.7 Sammenfatning 53

7 Modellering af nitrattransport i et samlet Modelkompleks **55**
7.1 Formål 55
7.2 Metode 55
7.3 Partikeltracking 56
7.4 Opsætning 61
7.5 Inputanalyse 65
7.6 Sammenfatning 67

III Evaluering af Modelkomplekset **69**

8 Stokastisk analyse **71**
8.1 Formål 71
8.2 Metode 71
8.3 Valg af observationspunkter 73

8.4 Sampling af parametersæt . . . 76
8.5 Evaluering af Monte Carlo simuleringer . . . 78
8.6 Kalibrering og parameterusikkerhed . . . 83
8.7 Validering . . . 97
8.8 Diskussion af validering . . . 103
8.9 Supplerende undersøgelser . . . 104
8.10 Sammenfatning . . . 108

IV Risikovurdering **111**

9 Risikovurdering for Sydvest-området **113**
9.1 Formål . . . 113
9.2 Opstilling af scenarier . . . 114
9.3 Fremskrivning til år 2100 . . . 117
9.4 Effekt af grundvandsrelaterede initiativer . . . 123
9.5 Sammenfatning . . . 133

10 Konklusion **135**

11 Videre undersøgelse og forbedringer **137**

Litteratur **139**

Appendiks **A1**

A Forundersøgelse **A1**
A.1 Nitratmonitorering i vandforsyningsboringer . . . A1

B Dokumentation af UZ-Model **A7**
B.1 Kontinuitetsprincippet . . . A7
B.2 Undersøgelse af reservoirtykkelse . . . A12
B.3 Analyse af input til UZ-Model . . . A13

C Partikeltracking **A19**
C.1 Undersøgelse af tilstrækkeligt partikelantal . . . A19
C.2 Single vs. Double . . . A20

D Elektronisk bilag **A23**
D.1 Dokumenter til litteraturlisten . . . A23
D.2 Boreprofiler . . . A23
D.3 Modelkompleks . . . A23
D.4 Beregning af nitratudvaskning . . . A23
D.5 Partikeltracking . . . A23

Kapitel 1

Symbol- og akronymliste

Symbolliste angiver symbol, kort beskrivelse samt sidetal, hvor symbol præsenteres første gang. Desuden angives enheden som anvendt i rapporten. Yderligere foreligger der en akronymliste, der angiver akronymer anvendt i rapporten.

Symbolliste	Beskrivelse	Enhed	Side
A_{acc}	: andel accepterede simuleringer	$[-]$	103
a	: observationfejl svarende til acceptkriterie	$[-]$	82
a_p	: antalpartikler med endepunkt i samme vandforsyningsboring	$[-]$	61
$a_{tp,redox}$	: den samlede opholdstid under redoxgrænsen	$[\%]$	124
b	: observationfejl svarende til standardafvigelse	$[-]$	82
C_0	: udvaskningskoncentration	$[\mathrm{mg \cdot L^{-1}}]$	44
$C_{gvs,(k)}$	: gennembrudskurve fra UZ-Model til partikelbane k	$[\mathrm{mg \cdot L^{-1}}]$	61
C_m	: observeret nitratkoncentration ved vandforsyningsboring	$[\mathrm{mg \cdot L^{-1}}]$	79
$C_{m,max}$	: øvre niveau for nitratkoncentration	$[\mathrm{mg \cdot L^{-1}}]$	79
$C_{m,min}$	: nedre niveau for nitratkoncentration	$[\mathrm{mg \cdot L^{-1}}]$	79
C_n	: nitrattilførsel til reservoir n	$[\mathrm{mg \cdot L^{-1}}]$	41
C_s	: simuleret nitratkoncentration ved vandforsyningsboring	$[\mathrm{mg \cdot L^{-1}}]$	61
$C_{s,r}$	: reduceret nitratkoncentration ved vandforsyningsboring	$[\mathrm{mg \cdot L^{-1}}]$	63
c	: observationsfejl svarende til standardafvigelse	$[-]$	82
c_0	: ledningsevneparameter ved h=0 for reservoir n	$[\mathrm{m \cdot d^{-1}}]$	38
$c(h)$	: ledningsevneparameter som funktion af vandstand	$[\mathrm{m \cdot d^{-1}}]$	38
$d_{kalk,gns}$	: gennemsnitlig tykkelse af kalk	[m]	124
$d_{ler,gns}$	: gennemsnitlig tykkelse af ler	[m]	124
$d_{sand,gns}$	: gennemsnitlig tykkelse af sand	[m]	124
d	: observationsfejl svarende til acceptkriterie	$[-]$	82
dt	: tidskridt	[d]	37
e	: Eulers naturkonstant	$[-]$	38
F	: sandsynlighed	$[-]$	92
f	: fyldningsgrad	$[-]$	40
g	: geologisk lag g	$[-]$	17
h_n	: vandstand i reservoir n	[m]	37
I	: infiltration	$[\mathrm{mm \cdot d^{-1}}]$	44
$I_{a,b}$	: hældningen for den trapezformede likelihoodfunktion	$[-]$	82
$I_{b,c}$	: hældningen for den trapezformede likelihoodfunktion	$[-]$	82
$I_{c,d}$	: hældningen for den trapezformede likelihoodfunktion	$[-]$	82
i	: måling	$[-]$	79
K	: 1. ordens nedbrydningsrate	$[\mathrm{d^{-1}}]$	63
k	: partikelbane	$[-]$	61
kr	: udvaskningskorrigering	$[-]$	77
ℓ	: likelihood	$[-]$	72
ℓ_{global}	: global likelihood	$[-]$	81
ℓ_p	: likelihood for observationspunkt p	$[-]$	81
L	: nedre grænse for acceptabilitet	$[-]$	80
L_n	: tykkelse af reservoir n	[m]	38

M	: Modelkomplekset	$[-]$	72
N	: antal observationspunkter	$[-]$	81
N_{acc}	: antal accepterede simuleringer	$[-]$	84
N_{obs}	: antal observationer i observationspunkt	$[-]$	74
N_{sim}	: antal simuleringer	$[-]$	76
n	: reservoir nummer	$[-]$	37
p	: observationspunkt	$[-]$	81
$\overline{q}_{gvs,(a_p)}$	: gennemsnitlig vandhastighed for alle partikler a	$[\mathrm{m}\cdot\mathrm{år}^{-1}]$	61
$q_{gvs,(k)}$	: vandhastighed fra UZ-Model til partikelbane k	$[\mathrm{m}\cdot\mathrm{år}^{-1}]$	61
q_n	: vandhastighed fra reservoir n	$[\mathrm{m}\cdot\mathrm{d}^{-1}]$	37
$score$	: score	$[-]$	79
s_g	: stejlhedsparameter for geologisk lag g	$[-]$	38
T	: antal målinger for p	$[-]$	81
t	: tid	[d]	37
t_0	: begyndelsestid for simulering	[d]	61
$t_{90\%}$	: 90%-konfidensinterval for hvornår grænseværdien overskrides	[år]	124
$t_{p,90\%}$	: 90%-konfidensinterval for transporttid for partikler	[år]	124
$t_{p,(k)}$	: transporttid for partikel k	[d]	61
$t_{p,median}$	: median for transporttid for partikler	[år]	124
t_r	: opholdstid for partikel under redoxgrænsen	[d]	63
U	: øvre grænse for acceptabilitet	$[-]$	80
u	: gennemsnitlig porevandshastighed	$[\mathrm{m}\cdot\mathrm{år}^{-1}]$	49
v	: darcy flux	$[\mathrm{m}\cdot\mathrm{år}^{-1}]$	49
ω	: vægtet score	$[-]$	80
σ	: standartafvigelse	$[-]$	79
Θ	: vektor af stokastiske parameter	$[-]$	72
$\theta_{eff,g}$	: effektiv porøsitet for geologisk lag g	$[\mathrm{m}^3\cdot\mathrm{m}^{-3}]$	37
θ	: totalporøsitet for geologisk lag	$[\mathrm{m}^3\cdot\mathrm{m}^{-3}]$	41

Akronymliste

GLUE	: Generalized Likelihood Uncertainty Estimation
gvs	: Grundvandsspejl
JOF	: Jordoverflade
NSE	: Nash Sutcliffe Efficiency
RMSE	: Root Mean Squared Error
SOG	: Simuleringer Over Grænseærdien
UZ	: Umættet Zone

Kapitel 2

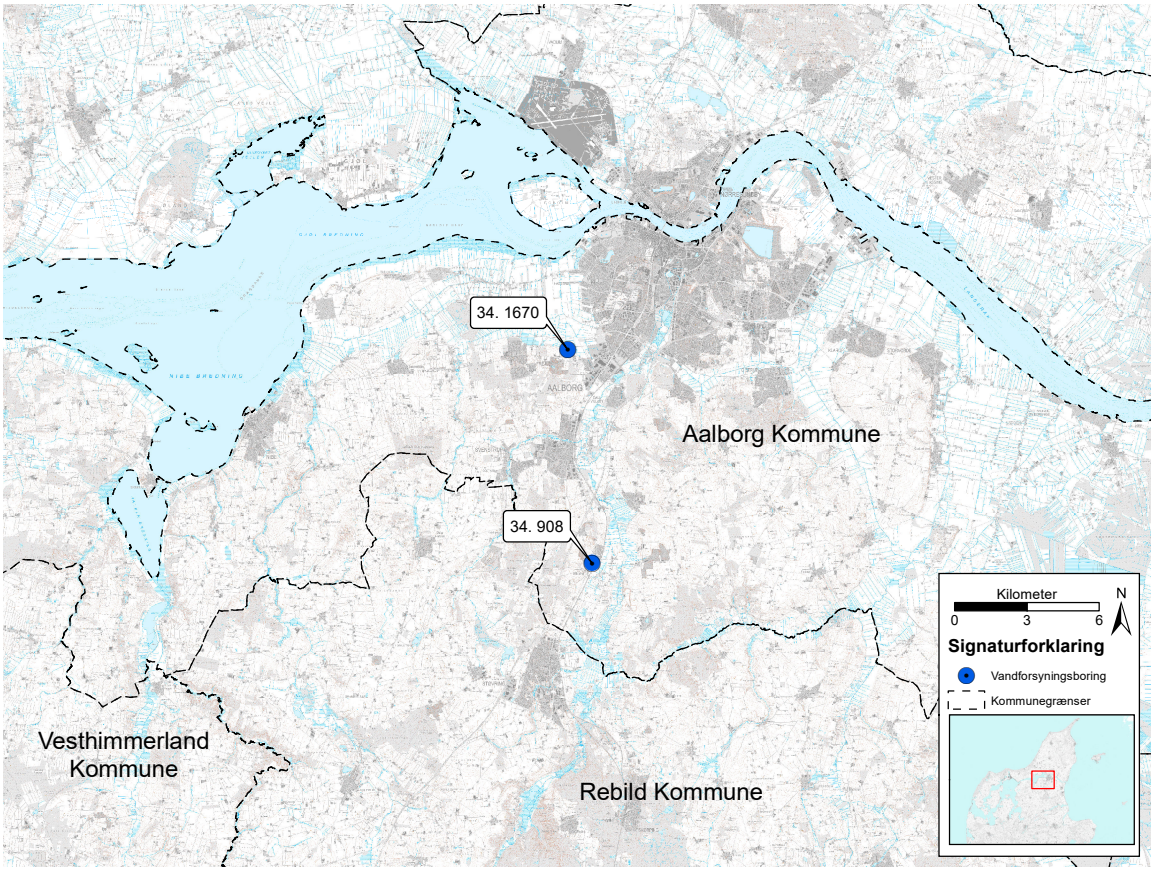
Indledning

Gennem det 20. århundrede udvikledes landbruget i Danmark til at udgøre en markant indflydelse på samfundet både økonomisk og politisk. En stigende indflydelse som betød en række hensyn og behov til en stadig stigende intensivering af landbrugsdriften. Mere intens landbrugsproduktion betød et stigende behov for gødning med bl.a. kvælstof, hvor effektivisering af agerdyrkningen blev foretaget med begrænset opmærksomhed på effekten af det omkringliggende miljø. Kvælstof, hvori nitrat udgør en bestanddel anvendes sammen med fosfor og kalium, til forbedring af agerens frugtbarhed og derved afgrødens vækstrate og kvalitet. [Naturstyrelsen, 2010]

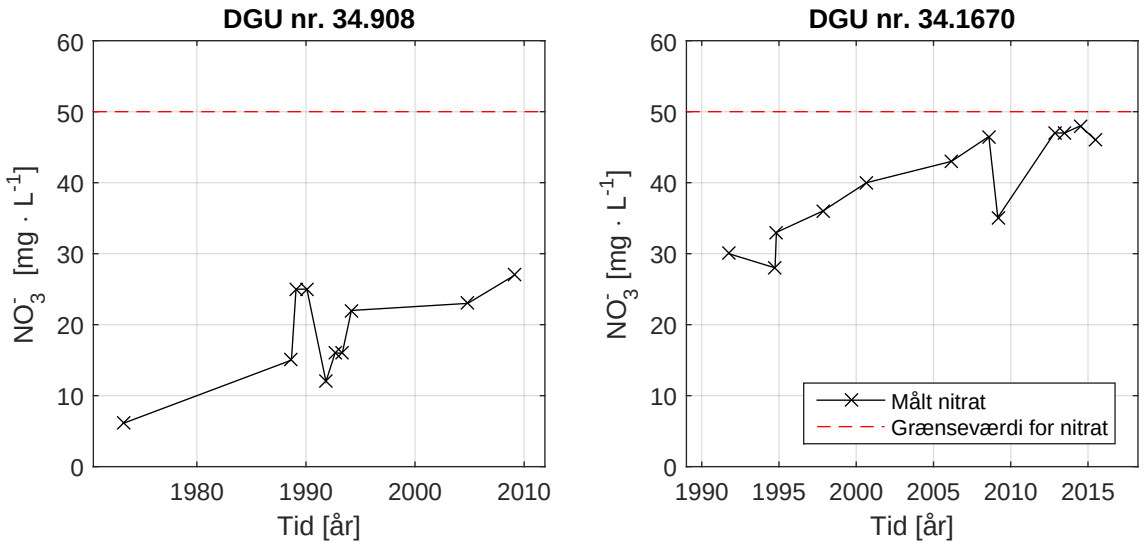
I dag ses effekten af mange års ringe udnyttelse af husdyrgødning. Iltsvind som følge af eutrofiering i vandløb og søer kan medføre altødelæggende påvirkning på økosystemer i naturen. Desuden er grundvandskvaliteten i nogle områder truet af stigende koncentrationer af nitrat, som følge af nitratforurening på baggrund af en øget kvælstofudvaskning. Dette er i konflikt med at 99 % af drikkevand i Danmark kommer tilnærmelsesvis urenset fra grundvandet, hvorfor den ellers tilstrækkelige ressource begrænses af forurening [GEUS, 2009]. Indtagelse af forhøjede nitratkoncentrationer i drikkevand udgør en risiko for spædbørn, da det kan forsage problemer med iltning af blodet. Desuden udgør nitrat en potentiel risiko for dannelse af mavekræft. [Sundhedsstyrelsen, 1994]
Grundet de omtalte sundhedsrisici er der af WHO [2011] opsat en anbefalet grænseværdi på $50\,\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}$, hvilket er i overensstemmelse med den maksimalt tilladelige koncentration for distribueret drikkevand fra vandværker i Danmark [Miljøstyrelsen, 2005]. Vandforsyningssikkerheden er i nogle områder af Danmark truet som følge heraf, da der i Danmark ikke renses for nitrat på vandværkerne ved hverken normal eller udvidet vandbehandling [DANVA, 2010].
Som følge af kvælstoftabet fra 60'erne frem mod start 90'erne er en række tiltag iværksat som følge af vedtagelsen af den første vandmiljøplan i 1986, der bl.a. havde til formål at reducere nitratudvaskningen [Retsinformation, 1986].

Aalborg Kommunes forsyningssikkerhed er særligt truet af stigende nitratkoncentrationer, hvorfor nitrat er et særligt indsatsområde for kommunen [Aalborg Kommune, 2015]. Grundvandsmagasinerne i kommunen er karakteristiske ved at være bestående af skrivekridt og underliggende kalklag, hvor der ikke i alle områder er en beskyttende lerlag [GEUS, 2015]. Dette medfører at grundvandet er særligt sårbart for nitratforurening i netop disse områder. Aalborg Kommune har, som resten af Danmark, skulle indordne sig under EU iværksatte direktiver, hvorfor der ligeledes er foretaget en række tiltag og deklarationer for at formindske nitratudvaskningen fra rodzonen. Ikke desto mindre bemærkes stadig stigende nitratkoncentrationer i drikkevandet, hvorfor virkningen af den reducerede udvaskning endnu ikke registreres [GEUS, 2015]. Dette skyldes at nitraten sandsynligvis tilbageholdes, hvorfor tiltagseffekten stadig er et emne til diskussion. Det er heraf interessant, at undersøge hvorvidt og hvornår den potentielt markante nitratpulje, ophobet fra overgødningens tid, rammer vandforsyningsboringerne og udgør gene for forsyningssikkerheden.
Aalborg Forsyning, Vand A/S, forsyner store dele af Aalborg Kommune med rent drikkevand, herunder Aalborg og Nørresundby by samt en række byer i oplandet. Aalborg Vand A/S [2015] er etableret med formålet om at; *"sikre og forsyne forbrugerne med rent vand på et miljømæssigt- og samfundsansvarligt grundlag"*. Vand A/S har en samlet indvindingstilladelse på 9,4 mio. $\mathrm{m}^3\cdot\mathrm{år}^{-1}$, med en oppumpet mængde på 7,2 mio. $\mathrm{m}^3\cdot\mathrm{år}^{-1}$. Den tillagte buffer på omtrent 25 % medvirker at forsyningssikkerheden overholdes i tilfælde af pludselige driftsproblemer [Grønvald, 2015].

For vandforsyningsboring 34.908 tilknyttet Ellidshøj Vandværk og 34.1670 tilknyttet AKV-Drastrup 1 er der målt en stigende tendens i nitratkoncentrationen for det oppumpede vand. Nitrathistorikken for de udvalgte vandforsyningsboringer er vist i figur 2.2 mens placering i Aalborg Kommune er vist i figur 2.1.



Figur 2.1. Placering af vandforsyningsboring 34.908 tilknyttet Ellidshøj Vandværk og 34.1670 tilknyttet AKV-Drastrup 1 i Aalborg Kommune.



Figur 2.2. Målt nitratkoncentration i vandforsyningsboring 34.908 tilknyttet Ellidshøj Vandværk og 34.1670 tilknyttet AKV-Drastrup 1.

Det vurderes, ved en betragtning af figur 2.2 på baggrund af målte, stigende nitratkoncentrationer nær grænseværdien, at forsyningssikkerhed kan være truet på både kort- og lang, hvorfor en risikovurdering på regional skala studeres.

Del I

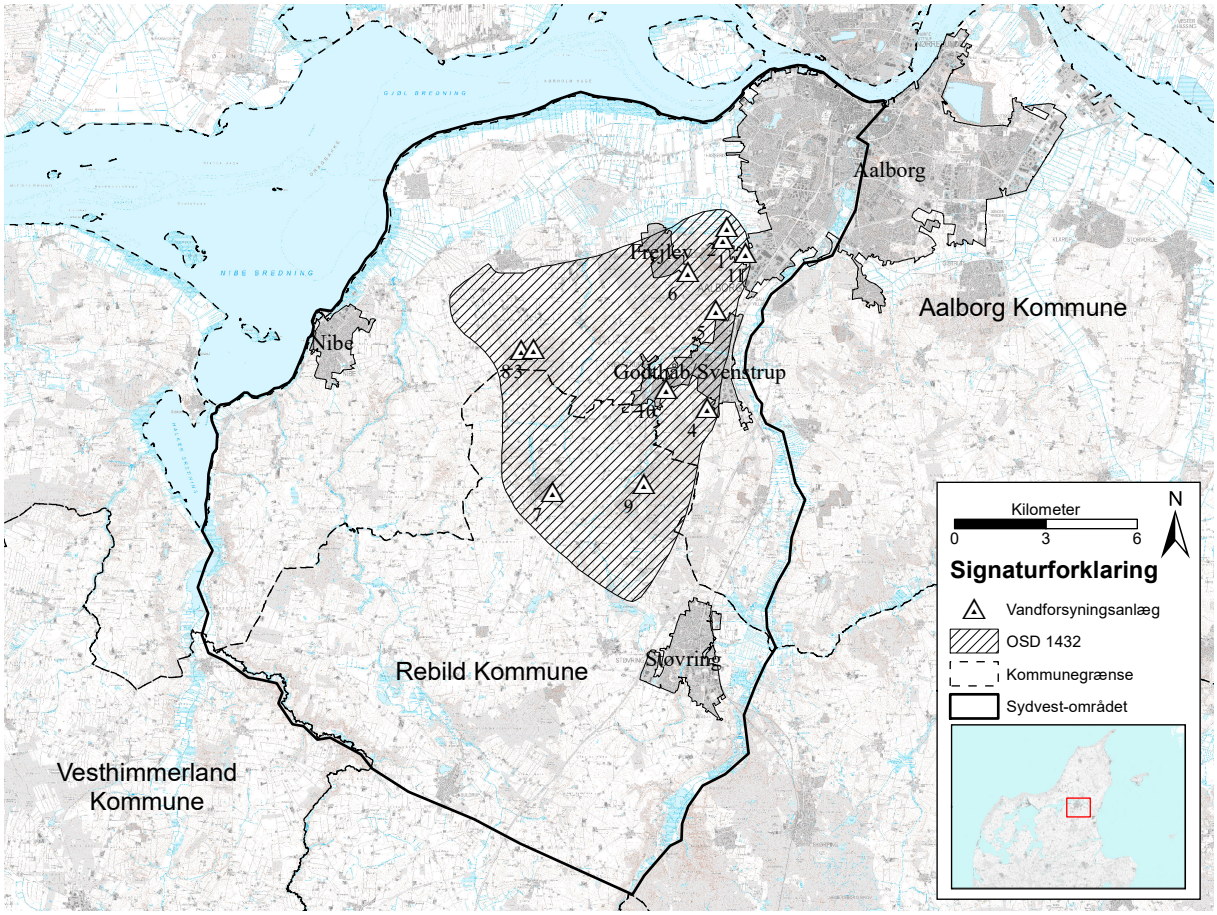
Undersøgelse af nitratproblematikken

Kapitel 3

Sydvest-området

Som nævnt i indledning er forsyningssikkerheden i Aalborg Kommune truet som følge af stigende nitratkoncentrationer. I området sydvest for Aalborg er der iværksat omfattende grundvandsbeskyttelse, for at imødekomme den stigende tendens. Som følge af påviste stigende nitratkoncentrationer er det essentielt at undersøge, hvorledes situation forventes udviklet i fremtiden. I nærværende afsnit vil et afgrænset område til modellering af nitrattransport præsenteres. Området defineres som Sydvest-området. Da landbruget som nævnt udgør den primære forureningskilde udarbejdes en undersøgelse af arealanvendelsen. Desuden gives en redegørelse af de nationale og europæiske planmæssige initiativer iværksat med henblik på grundvandsbeskyttelse mod nitratforurening. Afslutningsvis undersøges det hvorvidt allerede iværksatte initiativer kan monitoreres.

Sydvest-området, vist ved figur 3.1, afdækker i alt 393 km^2 [NIRAS, 2015]. Området afgrænses af Limfjorden i nord og vest, Østerå og Lindenborg å i øst samt Rebild og Vesthimmerlands Kommune i syd. Den vestligste del af Aalborg by samt Svenstrup, Godthåb, Frejlev, Nibe og Støvring er desuden indbefattet af Sydvest-området. Sydvest-område er ligeledes bestående af et *Område med særlige drikkevandsinteresser* (OSD). I et sådant område varetages grundvandet med særlig bæredygtig omhu med fokus på grundvandets beskyttelse og indvinding i fremtiden jf. Miljøministeriet [2012]. OSD 1432 i Sydvest-området dækker over dele af Aalborg- og Rebild Kommune og udgør 76 km^2.



Figur 3.1. Placering af offentlige- og private fælles vandforsyningsanlæg i OSD 1432.

Vandforsyningsanlæg beliggende i OSD 1432 skal fremtidssikres således der nu og i fremtiden leveres vand til forbrugerne uden anvendelse af udvidet vandbehandling [Miljøministeriet, 2012].

Grundet målsætningen om opretholdelsen af forsyningssikkerhed, studeres udelukkende offentlige- og private fælles vandforsyningsanlæg. Som vist på figur 3.1 udvælges i OSD 1432 fire offentlige fælles vandforsyningsanlæg samt syv private fælles vandforsyningsanlæg. Der er samlet udstedt tilladelse til vandindvinding på ca. 3,3 mio. $m^3 \cdot år^{-1}$ for de udvalgte offentlige- og private fælles vandforsyningsanlæg i OSD 1432. De gældende indvindingstilladelser er rangeret i tabel 3.1, hvor "Nr." refererer til figur 3.1 for placering. Vandindvinding med andet formål end forsyning af almen borger, som eksempelvis markvanding, dambrug eller forsyning til privat husholdning, studeres ikke yderligere.

Tabel 3.1. Gældende indvindingstilladelse for udvalgte offentlige- og private fælles vandforsyningsanlæg i OSD 1432. [GEUS, 2015]

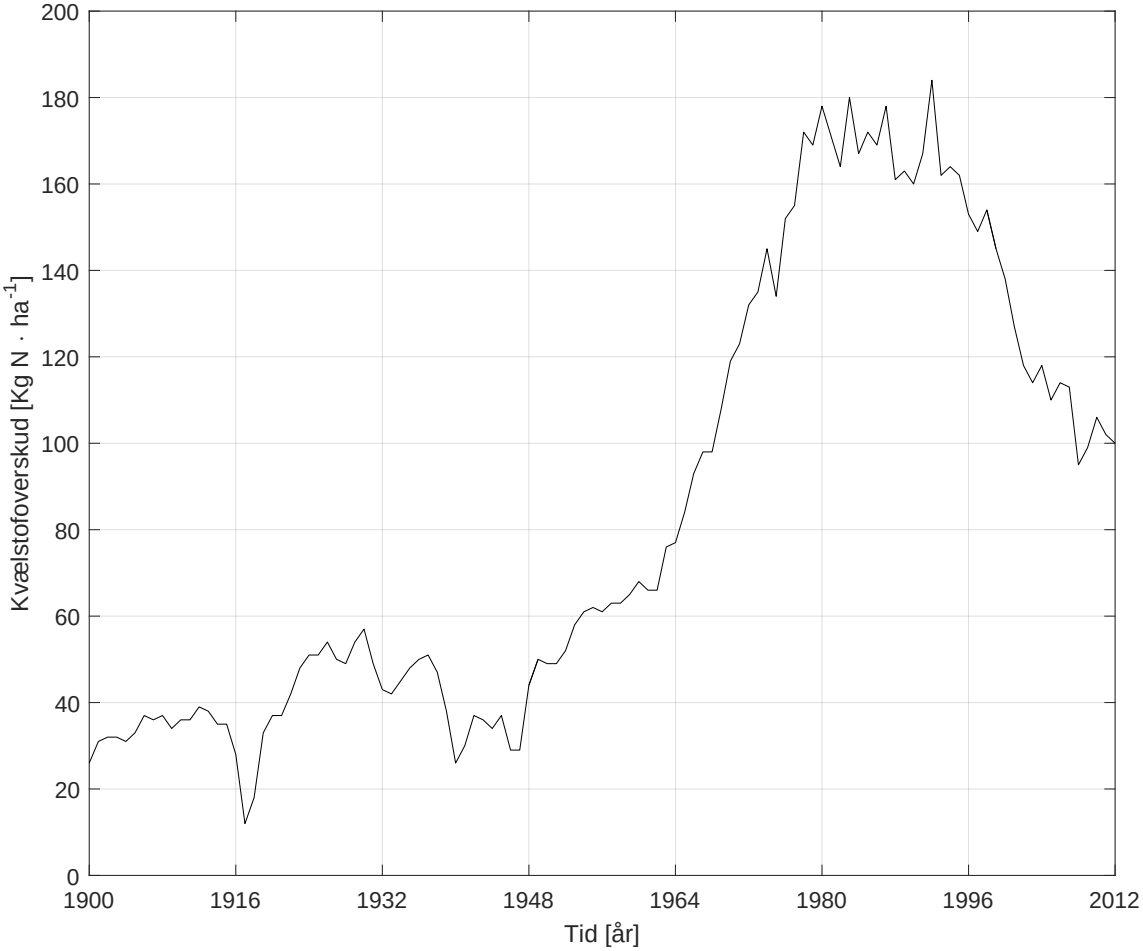
Nr.	**Anlægnavn**	**Indvindingstilladelse** $[m^3 \cdot år^{-1}]$	**Type**
(1 og 2)	AKV-Drastrup 1+2	2.100.000	Offentlig
(3)	AKV-Nibe	350.000	Offentlig
(4)	AKV-Fløndal	210.000	Offentlig
(5)	Svenstrup Vandværk	175.000	Privat
(6)	Frejlev Vandværk	167.000	Privat
(7)	Øster Hornum Vandværk	85.000	Privat
(8)	Sønderholm Vandværk	80.000	Privat
(9)	Guldbæk Vandværk	70.000	Privat
(10)	Godthåb Vandværk	59.000	Privat
(11)	Drastrup Vandværk	15.000	Privat

Som vist i tabel 3.1 indvindes en betragtelig andel af drikkevandet på AKV-Drastrup kildepladserne, hvorfor forsyningssikkerheden er afhængig af driften her. Flere af de nævnte vandforsyningsanlæg, som er essentielle for forsyningssikkerheden, har indvinding i særligt nitratsårbare områder og er derfor truet af eventuelle sløjfninger af vandforsyningsboringer og i yderste konsekvens kildeplads- og vandværkslukning.
Da Sydvest-området således er præsenteret vil der i det følgende udfærdiges en redegørelse for, hvorledes nitratproblematikken udspringer, udviklingen i OSD 1432, samt en analyse af de tiltag, der er foretaget i forhold til grundvandsbeskyttelse med fokus på nitrat.

3.1 Nitratforurening af grundvand og arealanvendelse

Nitratindholdet i grundvandet stammer som nævnt i overvejende grad fra kvælstofudvaskning fra landbrugsarealer. Kvælstofudvaskning er en betegnelse for den mængde overskydende kvælstof der ikke bliver udnyttet af afgrøderne på landbrugsarealerne, og som efterfølgende bliver udvasket. Udvaskningen af den overskydende kvælstof, hvor nitrat udgør størstedelen, bliver transporteret med regnvandet ned igennem rodzonen og videre til grundvandet [Thorling et al., 2012]. Nitratkoncentrationen måles med vand fra vandforsyningsboringer ved laboratorieanalyse med enten filtreret eller ikke filtreret grundvand. Koncentrationen angives typisk i $mg \cdot L^{-1}$ [GEUS, 2015]. Nitratindholdet i grundvandet afhænger bl.a. af jordtypen, valg af afgrøder, nedbørs- og gødningsmængde, hvilket bidrager til en varierende nitratkoncentrationen i udvaskningen. [Kyllingsbæk, 2008]

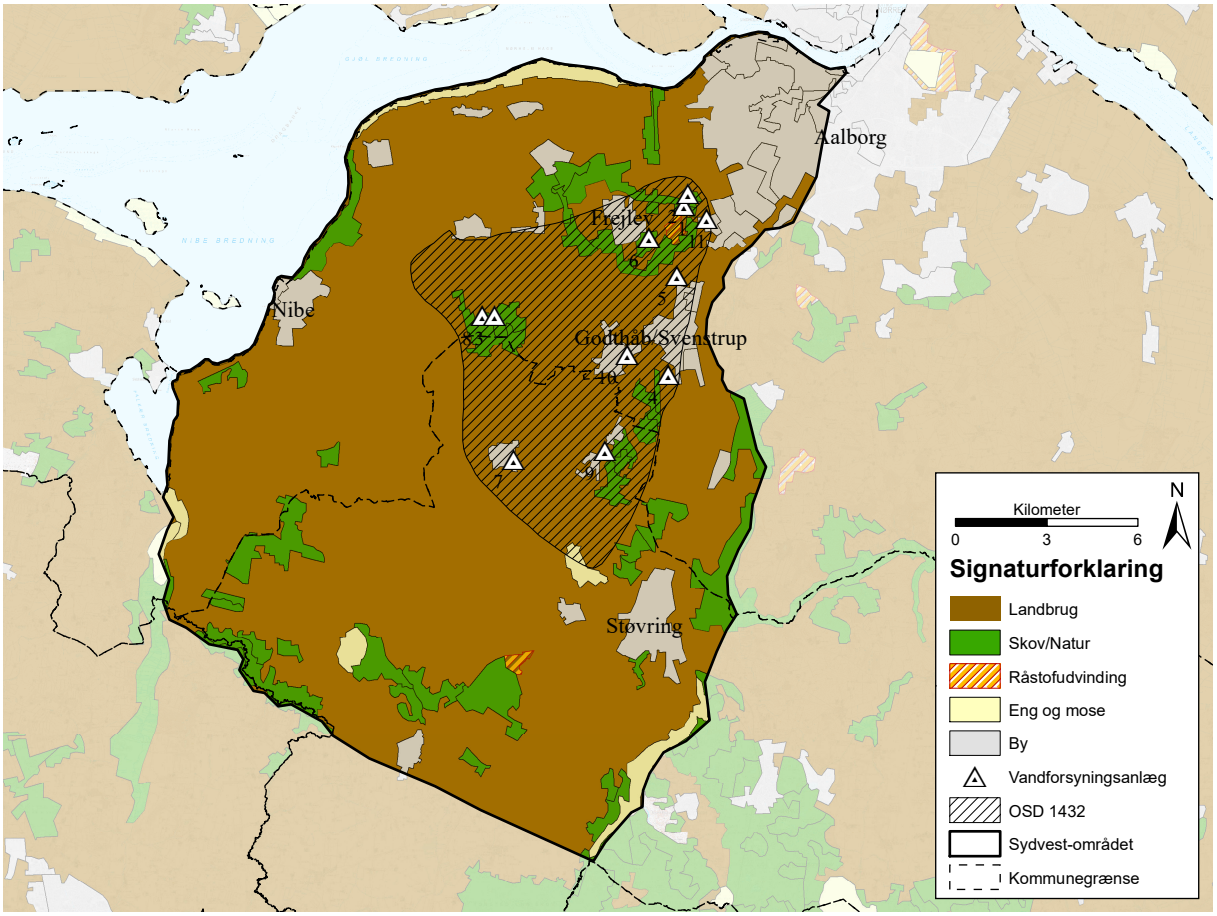
Den omtalte intensiverede landbrugsdrift udgør en potentiel trussel for overskridelse af grænseværdien for nitrat i grundvandet, hvis der drives landbrug i indvindingsoplandene til vandforsyningsboringerne. Kvælstofoverskudet i Danmark pr. hektar dyrket areal fratrukket brakarealer er vist på Figur 3.2, hvor der vises forholdsvis stor variation i udvaskningen.



Figur 3.2. Kvælstofoverskuddet pr. ha dyrket areal fratrukket brakarealer, i Danmark. # [Kyllingsbæk, 2008] og [Vinther og Olsen, 2014]

Som figur 3.2 illustrerer har kvælstofoverskuddet i Danmark historisk set været stigende fra år 1900 til start 90'erne fra et overskud på 26 $\mathrm{kgN \cdot ha^{-1}}$ i år 1900 og til toppunktet i start 90'erne på 184 $\mathrm{kgN \cdot ha^{-1}}$. Den stigende tendens frem mod start 90'erne er kun afbrudt af hhv. første og anden verdenskrig. Efterfølgende er kvælstofoverskuddet aftaget betragteligt frem mod 2012 til en udvasket mængde på ca. 100 $\mathrm{kgN \cdot ha^{-1}}$ i takt med at miljømæssige initiativer er implementeret i den danske lovgivning [Kyllingsbæk, 2008]. På baggrund af den forholdsvis dramatiske udvikling i det landsdækkende kvælstofoverskud i Danmark udfærdiges en undersøgelse af arealanvendelsen i Sydvest-området med henblik på kortlægning af forureningskilderne.

Arealanvendelsen definerer, hvilken aktivitet eller anvendelse, der finder sted på jordoverfladen for et givent areal. I områder, hvor landbruget dominerer arealanvendelsen, kan belastningen fra kvælstofudledning være en potentiel forureningskilde af nitrat i grundvandet, og den omkringliggende natur. Figur 3.3 illustrerer arealanvendelsen i Sydvest-området.



Figur 3.3. Typer af arealanvendelse for Sydvest-området gældende i år 2012. [Geodatastyrelsen, 2015] #. De overordnede betegnelser for arealtypen, er en sammenfatning af flere lignede arealtyper. Arealtyper der indeholder flere bestanddele er angivet. Landbrug: Traditionelt- og forskelligartet landbrugsjord og områder med primært landbrug samt mindre områder af vegetation. Skov/Natur: Græsgange, Bredblandet-, Nåle-, blandet skov og krat. By: Sammen- og ikke sammenhængende bystruktur, Industrielle/kommercielle enheder, sports og fritidsfaciliteter, havneområder, grønne byområder og togstationer. Eng og mose: Tørvemose, saltenge, vådområder og mose.

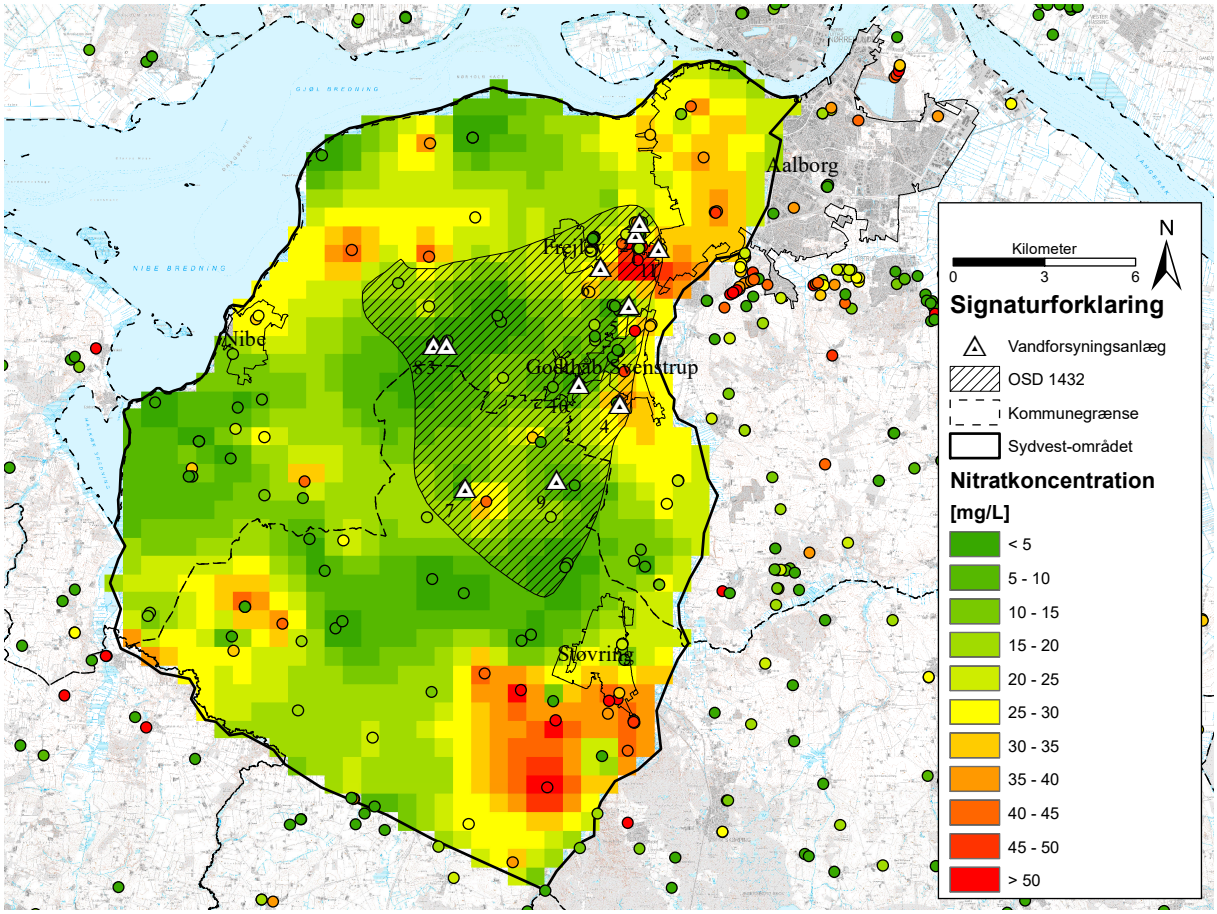
Det bemærkes af figur 3.3 at Sydvest-området klassificeres i fem forskellige typer arealanvendelse. De fem typer er landbrug, by, skov/natur, eng og mose samt råstofudvinding. Det bemærkes at Sydvest-området primært udgøres af landbrug. Tabel 3.2 angiver den procentvise fordeling, af de fem forskellige typer arealanvendelse i Sydvest-området.

Tabel 3.2. Procentvist andel af arealanvendelsestyper i Sydvest-området.

		Landbrug	By	Skov	Eng og mose	Råstofudvinding	Sum
Andel	[%]	78,9	11,7	7,1	2,2	0,1	100

Det bemærkes, af tabel 3.2, hvorledes ca. fire femtedele af det samlede areal for Sydvest-området er udgjort af landbrug. Da det er klarlagt at størstedelen af arealanvendelsen er udgjort af en potentiel kilde til nitratforurening, undersøges den aktuelle målingsbaserede nitratsituation.

Figur 3.4 illustrerer en interpoleret flade af den målte nitratkoncentration i grundvandet. Der interpoleres imellem punktbaserede målinger, for at fremskaffe en nitratflade afdækkende hele Sydvest-området til beskrivelse af den aktuelle nitratsituation.



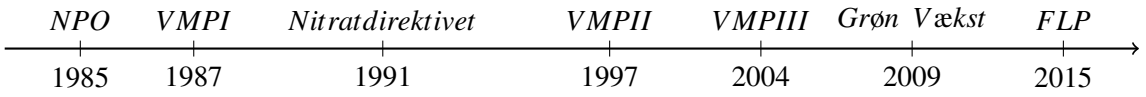
Figur 3.4. Interpoleringen baseres på 2.250 vandforsyningsboringer fordelt i Nordjylland, hvor seneste nitratmåling efter år 2000 anvendes. GEUS [2015].

Som vist på figuren 3.4, er flere områder belastede af forhøjede nitratkoncentrationer. Særligt områderne omkring AKV-Drastrup 1 og 2, Frejlev og Støvring Vandværk er nitratbelastede. Der måles i områder nær de beskrevne vandforsyningsanlæg koncentrationer over grænseværdien for nitrat. Det bemærkes ligeledes, at der i områder for den nordvestlige- nordøstlige-, sydvestlige- og sydlige del af Sydvest-området måles nitratkoncentrationer ved grænseværdien.
Områder hvor koncentrationen af nitrat er relativ lav forefindes i vid udstrækning i den centrale del af Sydvest-området. Derudover er nitratkoncentrationen forholdsvis lav i både den vestlige og nordlige del. Der tages ved interpolationen forbehold for usorteret filtersætningsinterval, hvilket kan medføre afvigelser i interpolationens korrekthed grundet variabel indtagsdybde i grundvandsmagasinet.

Til illustration af udviklingen af nitratsituationen for de aktive vandforsyningsboringer til de præsenterede vandforsyningsanlæg er der i appendiks A.1 på side A1 udfærdiget en dataopsamling af målt nitrat, jf. GEUS [2015]. Det bemærkes, at der forekommer relativt markant difference i nitratkoncentrationerne både internt til vandforsyningsanlægget og eksternt anlæggene imellem. Særligt vandforsyningsboringer tilknyttet AKV-Drastrup 1 og AKV-Flødal, har registreret forholdsvis høje nitratkoncentrationer over $40\,\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}$ i flere af vandforsyningsboringerne. Ligeledes er der for AKV-Drastrup 2 og Frejlev registreret stigende tendens i nitratkoncentrationen.
Grundet den påviste stigende tendens for nogle af områdets mest centrale vandforsyningsanlæg er der påbegyndt en række initiativer til beskyttelse af grundvandet mod nitrat. For at reducere arealerne af landbrug omkring kildepladserne har Aalborg Kommune udarbejdet indsatsplaner der kan imødekommet problemet med den stigende nitratkoncentration i grundvandet. Følgende afsnit omhandler desuden implementering af indsatsplaner i den danske lovgivning.

3.2 Regulering af nitratudvaskning

Følgende afsnit vil indledningsvis give en redegørelse af de nationale og europæiske planmæssige initiativer iværksat med henblik på grundvandsbeskyttelse mod nitratforurening. Desuden vil afsnittet indeholde en præsentation af de lokale indsatser for grundvandsbeskyttelse ved Drastrup. På baggrund af de dokumenterede udfordringer vedrørende øget udvaskning af nitrat, er der i Danmark foretaget markante initiativer til regulering af nitratudvaskning fra landbruget. Figur 3.5 illustrerer en tidslinje for skelsættende danske og europæiske miljøtiltag.

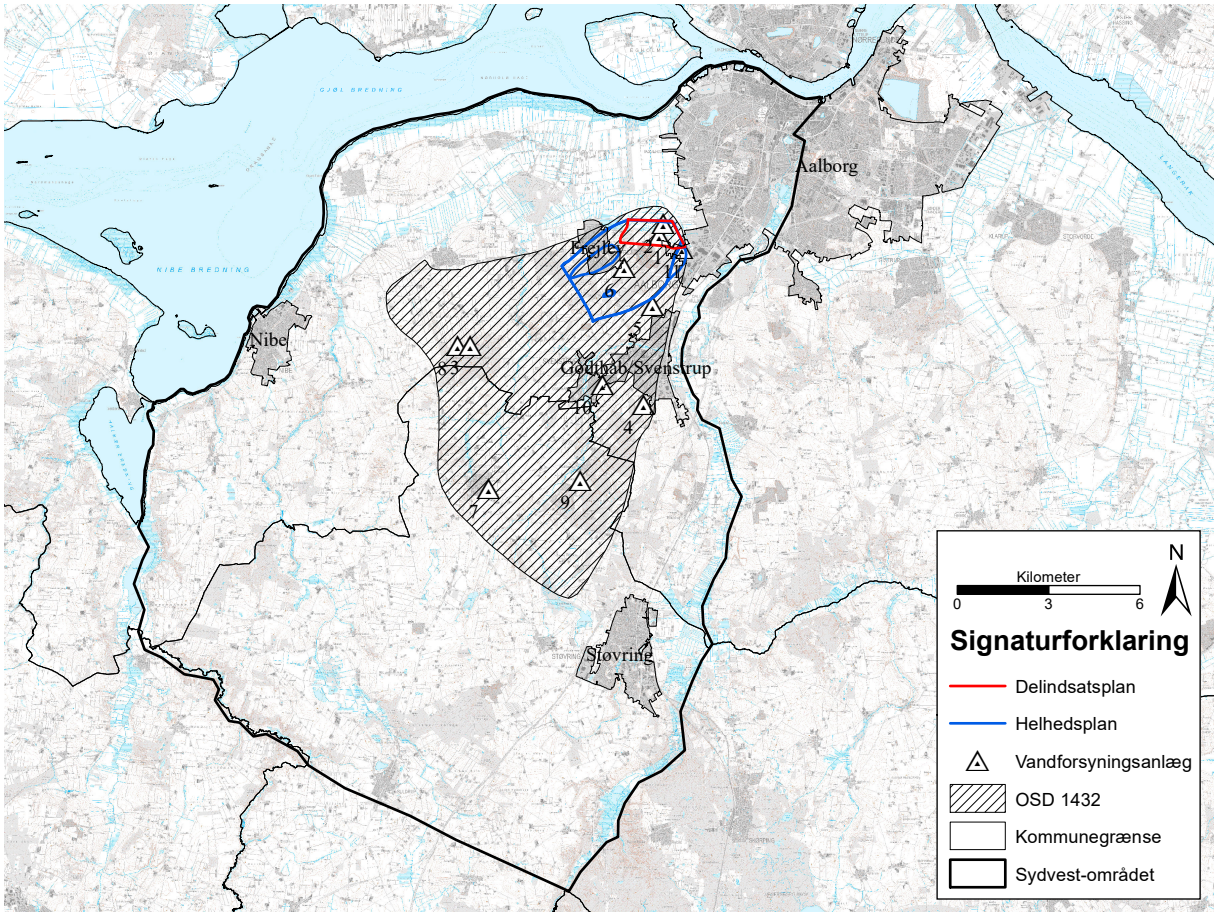


Figur 3.5. Historisk tidslinje for vedtagelse af planer og politiske aftaler vedrørende nitratregulering. *Vandmiljøplanerne (I-III)* forkortes *VMP*, *Nitrat og fosfor-handlingsplanen* forkortes *NPO* mens *Fødevare- og landbrugspakken* forkortes *FLP*. Bemærk tidslinjen ikke er målfast, men blot en skitse.

Den danske lovgivning vedrørende reducering af kvælstofoverskuddet har udspring i NPO-handlingsplanen vedtaget i 1985. Planen bygger på tidligere redegørelser vedrørende stigende frekvens af iltsvindshændelser og nitratkoncentrationer i drikkevand. NPO-handlingsplanen er startskud på landbrugets bidrag til miljøproblematikken vedrørende kvælstofoverskuddet, hvor særligt gødningsopbevaring, gødningseffektivitet er i fokus. [Miljøstyrelsen, 2014]
På baggrund af forsatte iltsvind vedtog folketinget VMP I. I planen er kravet at nitratudvaskningen fra landbrug reduceres med 50 %, hvor særligt håndtering, gødningsmængde og opbevaring af gødning er udspecificeret. Planens hovedområde er restriktioner vedrørende renseanlæg, industri og andre punktforureningskilder. [Retsinformation, 1986]
I 1991 vedtog EU nitratdirektivet, der bl.a. har til formål, på europæisk skala, at beskytte grundvandet i EU medlemslandene. Direktivet pålægger medlemslandende at udarbejde Nitrathandlingsprogrammer, hvor denne i Danmark er indeholdende i Vandmiljøplanerne. [Commission, 2010]
På baggrund af manglende effekt af reduktionen i kvælstofoverskuddet, samt en direkte påtale fra EU, iværksattes VMP II. Planen er direkte udspecificeres på agrikulturens brug af kvælstof og indeholder skærpede krav, herunder nedsættelse af normer for kvælstofkrav. Desuden stilles der nye krav til efterafgrøder, for på den måde at reducere udvaskningen og forøge udnyttelsen af kvælstoffet. [Grant et al., 2002]
Den seneste vandmiljøplan vedrørende reduktion af kvælstof er VMP III fra 2004, hvilken er udført med grundlag i vandrammedirektivet. I planen skærpes kravene yderligere med en minimums kvælstofreduktion for landbruget på 13 % i forhold til VMP II. Desuden indeholder planen en lang række krav til bl.a. etablering af nye randzoner samt beskyttelse af sårbare naturtyper. VMP III er gældende t.o.m. 2015. [Miljøministeriet et al., 2004]
I forbindelse med vedtagelsen om Grøn Vækst aftalen i 2009 er der udarbejdet en separat handlingsplan for nitrat. Handlingsplanen viderefører målsætninger fra VMP III, mens der yderligere pålægges en reduktion på 19.000 tons kvælstof til det akvatiske miljø på national skala. [Miljøstyrelsen, 2010]
Som nævnt udgør landbruget en betragtelig både økonomisk og politisk indflydelse på det danske samfund. Som hensyntagen til det danske landbrug, der er udfordret af miljøreguleringen, er der i dansk politik i 2015 vedtaget en såkaldt Fødevare- og landbrugspakke. Implementeringen af landbrugspakken vil betyde en mere lempet gødskningsrestriktion. På sigt er det formålet med pakken at der ved målrettet regulering kan sikres fordel for både miljø og landbrug. [Miljø- og Fødevareministeriet, 2015] I Fødevare- og landbrugspakken refereres der til 2012 som referenceåret for kvælstofudvaskning. Det forventes, at landbrugspakken vil føre til en øget udvaskning fra 61,6 $\mathrm{kgN \cdot ha^{-1}}$ til 67,8 $\mathrm{kgN \cdot ha^{-1}}$, svarende til en forøgelse på ca. 10 %. [Aarhus Universitet, 2016]
På baggrund af den udfærdigede redegørelse for det tidslige forløb i den nationale regulering af nitratudvaskning undersøges lokale indsatsplaner i Sydvest-området i det følgende afsnit.

3.2.1 Indsatsplaner

En indsatsplan består af tiltag, der har til opgave at beskytte og sikre grundvandsressourcen, der anvendes til drikkevand. Indsatsplanen bliver udarbejdet over arealer for statsligt udpegede indsatsområder i Vandplanen, jf. Miljøministeriet [2011]. Indsatsplanen udgør de planmæssige rammer for indsatsområdet, målsætninger, samt retningslinjerne for tilladelser og myndighedsopgaver. Desuden kræves en samlet angivelse af de tiltag der iværksættes. Lodsejere samt et koordinationsforum indtages for at sikre at de planmæssige rammer og at en nedsat tidshorisont overholdes. Det er kommunalbestyrelsen ansvar, at der udarbejdes indsatsplaner for de udpegede områder [Retsinformation, 2011]. Danmarks første del-indsatsplan mod grundvandsbeskyttelse indførtes i år 2001 for Drastrup området efter implementering af den nye lovbekendtgørelse om indsatsplaner [Aalborg Kommune, 2009]. Figur 3.6 viser placeringen af OSD, samt lokale handlingsplaner i Aalborg Kommune.



Figur 3.6. Placering af OSD, helhedsplan- samt del-indsatsplanområde i Sydvest-området.

Aalborg Kommune har udarbejdet en helhedsplanen, der dækker den betydeligste del indvindingsoplandet for kildepladserne i AKV-Drastrup samt private almene vandværk i Frejlev og Drastrup. Det er til helhedsplanens formål at ændre arealanvendelsen i dette område, som illustreret i tabel 3.3. [Aalborg Kommune, 2000] Metoden til målsætningsopfyldelse er baseret på frivillige aftaler om stop af gødskning og brug af miljøfremmede stoffer. Lodsejer har enten ved salg af jord til Aalborg Kommune fået tildelt økonomisk kompensation eller mulighed for ombytning til jorde uden for helhedsplanområdet. [Aalborg Kommune, 2000] Delindsatsplanen tager hånd om nærområdet ved kildepladserne AKV-Drastrup 1 og 2, hvor bl.a. den fremtidige arealanvendelse er specificeret, hvor formålet er at etablere arealer med skovrejsning og vedvarende græsarealer, der i fremtiden skal sikre rent drikkevand. Af tabel 3.3 bemærkes, at helhedsplanens målsætning hovedsageligt står for omlægning fra landbrug til løvskov i det afgrænsede område.

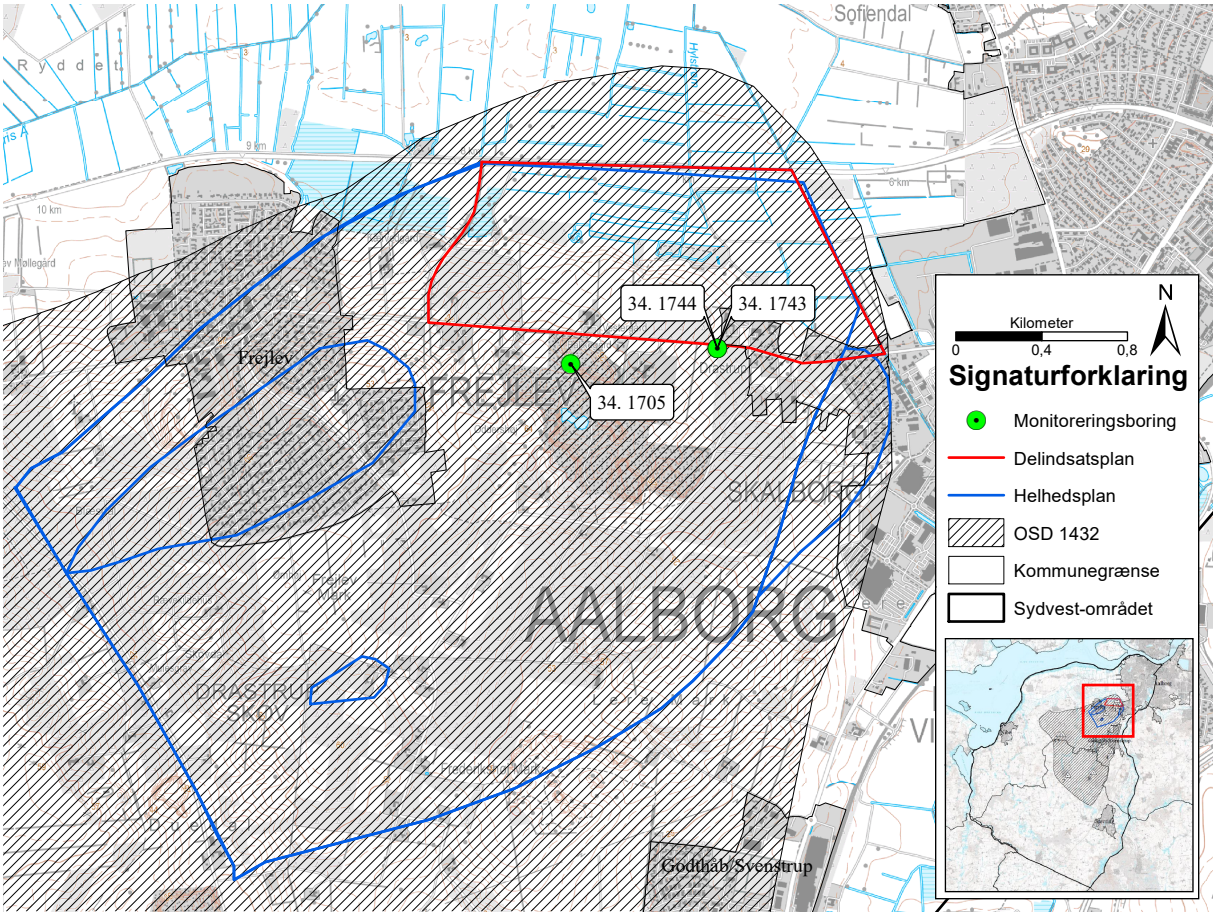
Tabel 3.3. Målsætning for arealanvendelse kontra arealfordeling i år 2000, svarende til året for planvedtagelse for helhedsplanen. [Aalborg Kommune, 2000]

	År 2000 [%]	**Målsætning** [%]
Eng	6	5
Fugtig eng	1	1
Græs	14	14
Landbrug	51	30
Løvskov	15	35
Nåleskov	13	15

Hele del-indsatsplanområdet planlægges landbrugsfrit efter løbende omlægning. [Aalborg Kommune, 2001]

3.2.2 Effekt af indsatser i helhedsplanområde

For at vurdere, i hvilket omfang en indsats ved ændret arealanvendelse er effektiv ved forskelligartet geologisk klassificering, analyseres monitoreringsboringerne med DGU nr. 34.1743, 34.1744 og 34.1705. Alle tre boringer er placeret i området nær AKV-Drastrup, hvorfor der er foretaget en række deklarationer for landbrugsarealer, hvilket samtidigt muliggør en analyse af indsatserne. Boringernes placering er vist på figur 3.7.

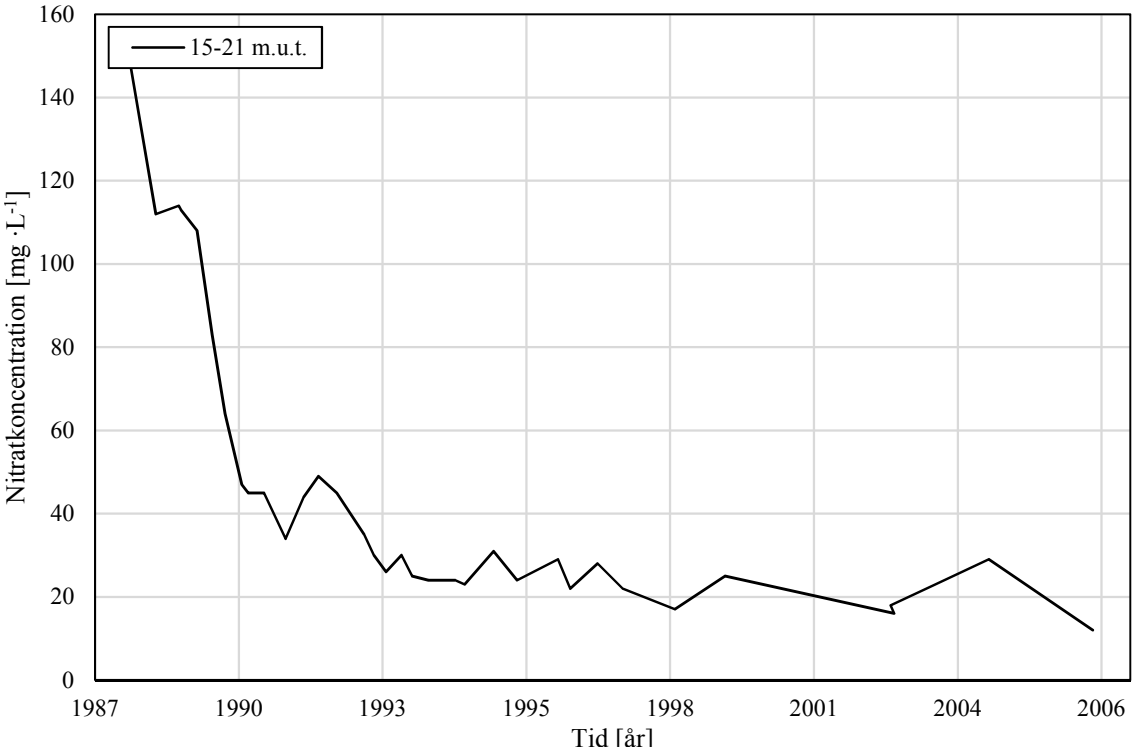


Figur 3.7. Placering af udvalgte monitoreringsboringer i heldhedsplanområdet.

På figur 3.7 bemærkes, at der er relativ kort afstand ca. 700 m imellem boringerne. Betragtes boreprofiler for de udvalgte monitoreringsboringer bemærkes forholdsvis store geologiske forskelle indenfor den korte afstand. Jf. GEUS [2015] er boringerne 34.1743 og 34.1744 udført i kalkdomineret geologi, mens 34.1705 består af hovedsageligt sand. Derved muliggøres en sammenligning af indsatseffekten for området indbefattet af helhedsplanen og de tilknyttede indsatser herunder. For grafisk boreprofil se bilags-CD D.2 - *Boreprofiler*.

Boring 34.1705

Med udgangspunkt i en sanddomineret geologi i boring 34.1705, bemærkes det af figur 3.8, at der forekommer en signifikant reduktion i nitratkoncentrationen. Sandet er karakteriseret som mellem- til grovkornet aflejret smeltevandssand med en minimal lergrænse ved 12,6 m.u.t.

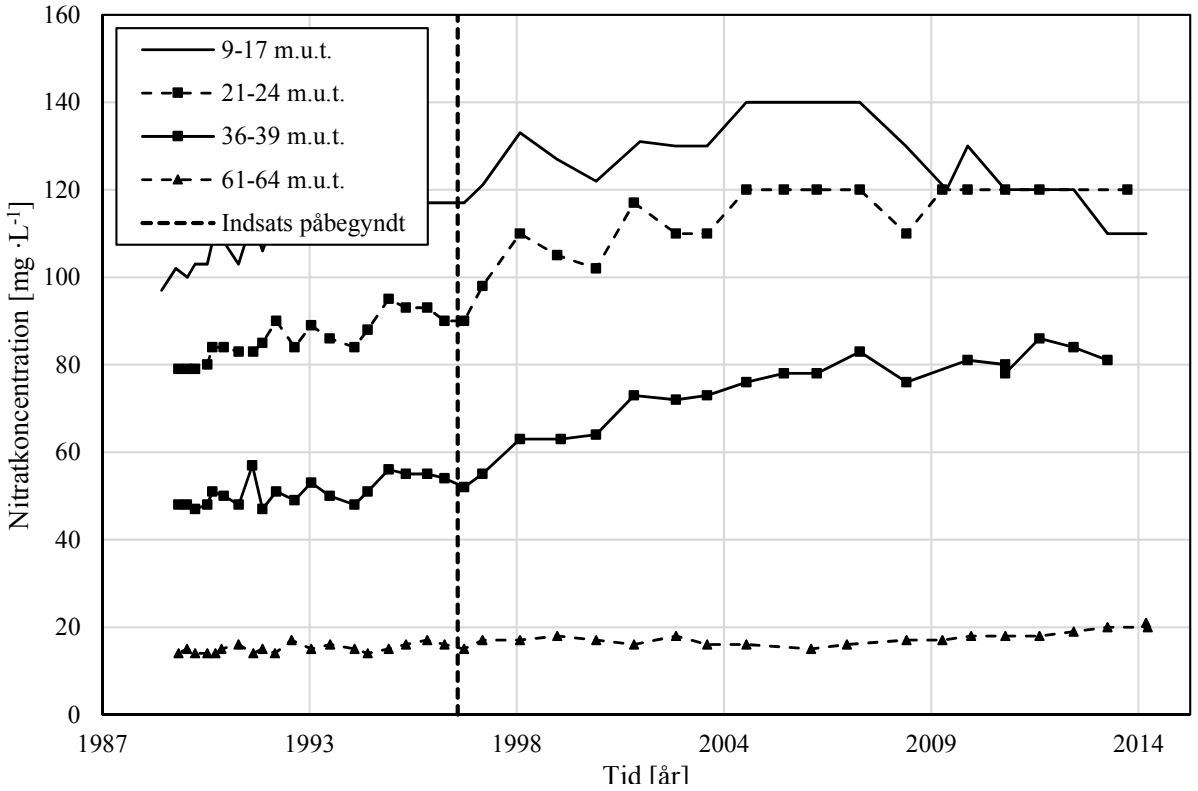


Figur 3.8. Nitratmonitorering i monitoreringsboring 34.1705 mellem Frejlev og AKV-Drastrup. Monitoreringsboringen er filtersat som angivet i signaturforklaringen. Grundvandsstand er ca. 7,8 m.u.t. [GEUS, 2015].

Af figur 3.8 fremgår et markant fald i nitratkoncentrationen i perioden fra etablering i år 1988 til 1993. Da dette fald registreres forinden helhedsplanen er færdiggjort i år 2000, kan effektens årsag ikke direkte tilbagespores. Det vurderes dog ikke sandsynligt at tiltagende er blevet iværksat før NPO-handlingplanen i 1985, jf. figur 3.5. Jf. Aalborg Kommune [2001] indførtes den første omlægning fra landbrug til natur år 1987 i Drastrup området. Således fremkommer et overslag med ca. en indsats effekt med en forsinkelsestid på maksimalt 5 år til reduktionen ophører i 1993. Samlet set forventes høj infiltrationshastighed og nitratkoncentration i det infiltrerende vand, hvorfor en indsats og arealanvendelsesændring i denne sandholdige geologi har relativ stor effekt indenfor en begrænset tidshorisont.

Boring 34.1743 og 34.1744

Til sammenligning belyses effekten af heldhedsplanen i en kalkdomineret geologi. Der tages som nævnt udgangspunkt i monitoreringsboringerne med DGU nr. 34.1743 og 34.1744. Monitoreringsboringerne er placeret syd for AKV-Drastrup 1 og er samlet set filtersat i fire forskellige dybder, hvorfor det muliggøres at monitorere ved forskellige indtagsniveauer. Boring 34.1744 udgør det øvre indtag, mens 34.1743 udgør de resterende tre dybe indtag. Nitrathistorikken for de to monitoreringsboringer er vist på figur 3.9.

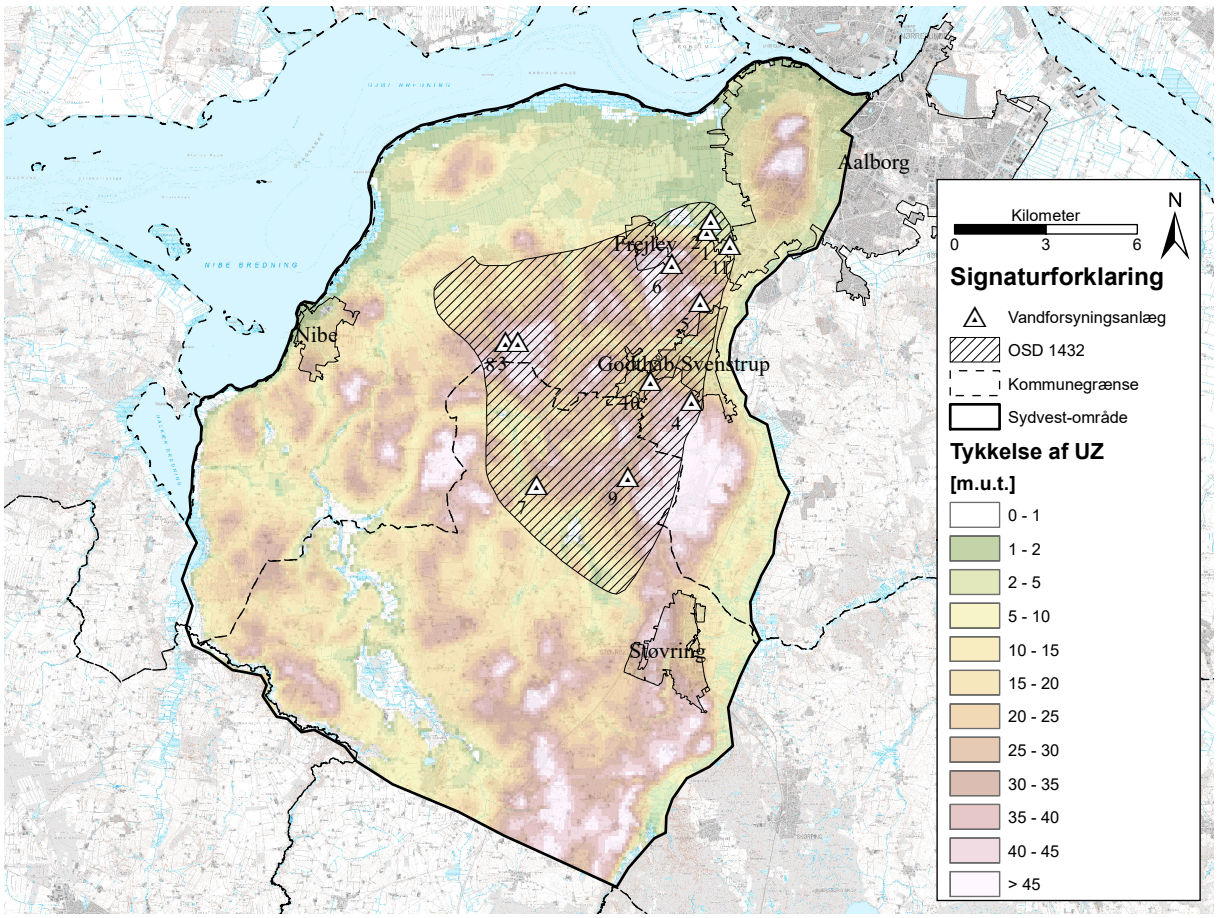


Figur 3.9. Nitratmonitorering ved fire forskellige filtersætninger i monitoreringsboringerne 34.1743 og 34.1744 nær AKV-Drastrup 1. Signaturforklaringen angiver filtersætningsinterval. Grundvandsstand er ca. 9,5 m.u.t. [GEUS, 2015].

Figur 3.9 illustrerer udviklingen af nitrat ved forskellige indtagsintervaller i den mættede zone i kalkdomineret geologi. Øverste indtag ved 9-17 m.u.t. er svarende til den øverste sektion i grundvandsmagasinet. Der bemærkes signifikant stigende nitratkoncentrationer frem mod 2005-2006 i de tre øvre indtagsintervaller, mens der for det nedre indtag er tilnærmelsesvis konstant nitratkoncentration på $20\,\mathrm{mg \cdot L^{-1}}$ over hele måleperioden. Dette tyder på at denne del af magasinet endnu ikke er påvirket af kvælstofoverskuddet. Indsatsen for indvindingsoplandet påbegyndtes i år 1997, jf. Grønvald [2015] og er markeret på figuren. Det bemærkes for det øverste indtag ved 9-17 m.u.t., at der kan registreres aftagende koncentrationer fra ca. år 2006-2007, hvorfor der omtrent er 10 års forsinkelse på effekten af de tiltag, der er iværksat ved jordoverfladen og tidligere omtalt. Desuden bemærkes det at nitratkoncentrationer for det underliggende indtag fra 21-24 m.u.t. er stigende i hele måleperioden til over $100\,\mathrm{mg \cdot L^{-1}}$, hvorfor indsatserne endnu ikke har nogen målbar effekt i dette indtag. Det kan diskuteres, hvorvidt der registreres et plateau i indtaget ved 21-24 m.u.t. og en endelig konklusion vil kræve flere års nitratmonitorering. Der foreligger en lineært stigende tendens i nitratkoncentrationer for indtaget i dybden 36-39 m.u.t.
Den målte forsinkelse på omkring 10 år gennem den umættede zone, skyldes formegentlig den geologi, der er tilstede i indvindingsoplandet, hvorfor en geologisk undersøgelse er nødvendig.

3.3 Geologisk sammensætning af umættet zone

Med baggrund i påvisningen af relativt markant differens i effekten af implementering af indsatsplaner i Sydvest-området er det essentielt at klarlægge den geologiske sammensætning af den umættede zone. Sammensætningen har en påvist afgørende betydning for med hvilken hastighed nitrat transporteres til grundvandet. Tykkelsen af den umættede zone er varierende for Sydvest-området, og spænder fra få meter til omkring 70 m. Nær Limfjorden i den nordlige del af området er tykkelsen lav, hvorimod tykkelsen i områderne omkring Frejlev, Sønderholm og syd for Svenstrup er relativt høj. Figur 3.10 illustrerer tykkelsen af den umættede zone.



Figur 3.10. Tykkelse af den umættede zone i Aalborg Sydvest-området.

Tykkelsen af den umættede zone udgør en umiddelbar indikator for, hvor transporttiden vil være relativ lang eller kort. Nitrattransporten afhænger primært af de geologiske egenskaber som den umættede zone er opbygget af, hvorfor en redegørelse for geologien i den umættede zone udarbejdes. Grundet forskellige strømnings- og stoftransportforhold gennem den umættede zone er det nødvendigt, at klarlægge hvorledes geologien er sammensat, for at opnå hydrologisk forståelse af området. Til etablering af geologiske lag anvendes en allerede udarbejdet geologisk model udleveret af NIRAS [2015]. Modellen består af i alt 13 lag og da grundvandspejlets placering er kendt, er det muligt at udregne lagtykkelser over grundvandsspejlet.

Transportforholdene differentieres til egenskaberne for hhv. sand, ler og kalk. Der skælnes mellem sand og ler ved en betragelse af hydraulisk ledningsevne, jf. NIRAS [2015], hvor en ledningsevne større end $1 \cdot 10^{-6}$ $\mathrm{m} \cdot \mathrm{s}^{-1}$ karakteriseres som sand. Der skælnes mellem ler og kalk grundet afvigende strømningsforhold, hvorfor grundlaget for sammenlægning er klarlagt. Heraf er det muligt at udregne akkumulerede lagtykkelser i den umættede zone for hvert medie. Lagenes individuelle klassificering opdeles efter transportforhold, som vist i tabel 3.4.

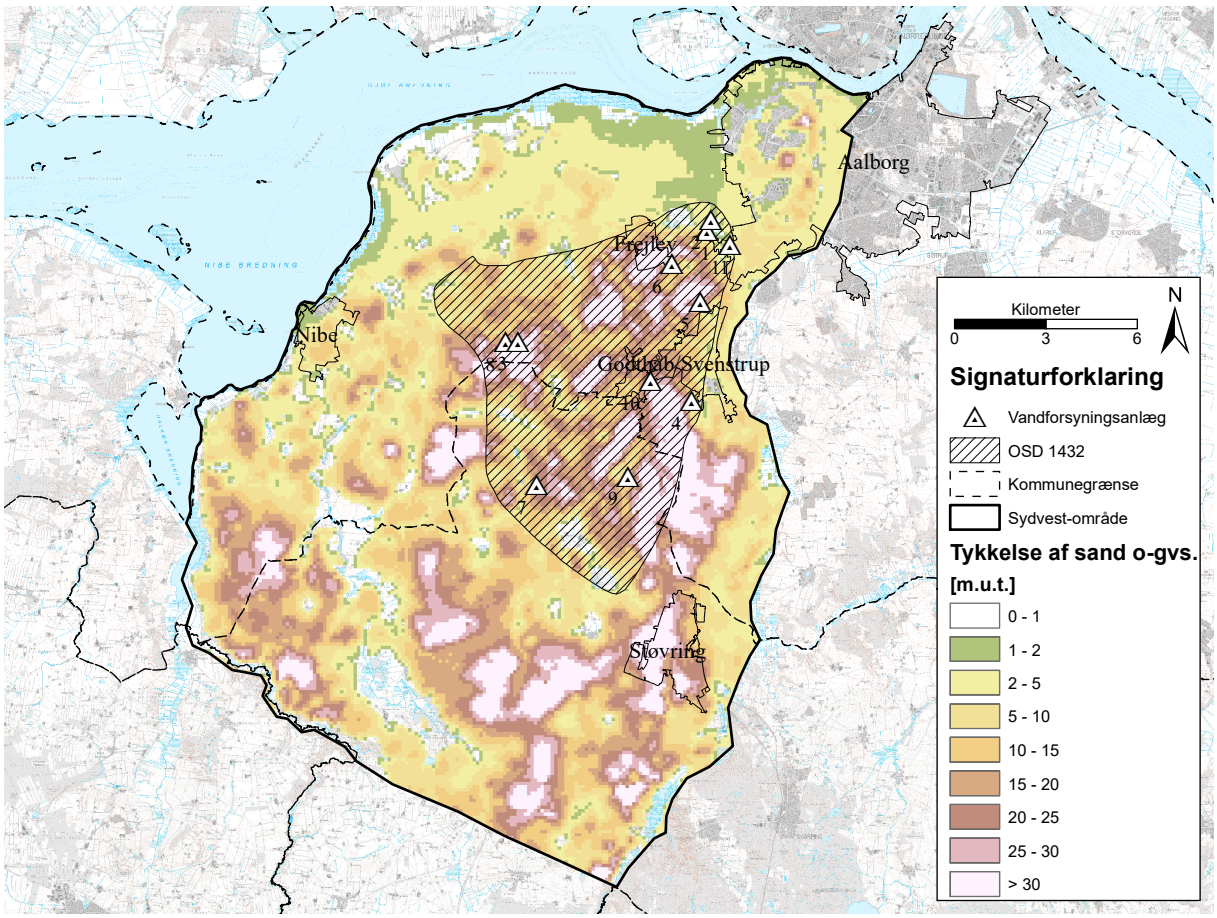
Tabel 3.4. Klassificering af geologiske lag, *g*, til specifikke strømningsforhold. Lag nr. indikerer lag fra terræn, hvorfor 1 er terrænnærest. I nærværende rapport indekseres sand, ler og kalk hhv. 1, 2 og 3.

Lag nr.	Klassificering	Transportforhold
1	Postglacial	Sand
2	Senglacial	Ler
3	Ler	Ler
4	Sand	Sand
5	Ler	Ler
6	Sand	Sand
7	Ler	Ler
8	Sand	Sand
9	Ler	Ler
10	Danien	Kalk
11	Skrivekridt	Kalk
12	Mergel	Ler
13	Skrivekridt	Kalk

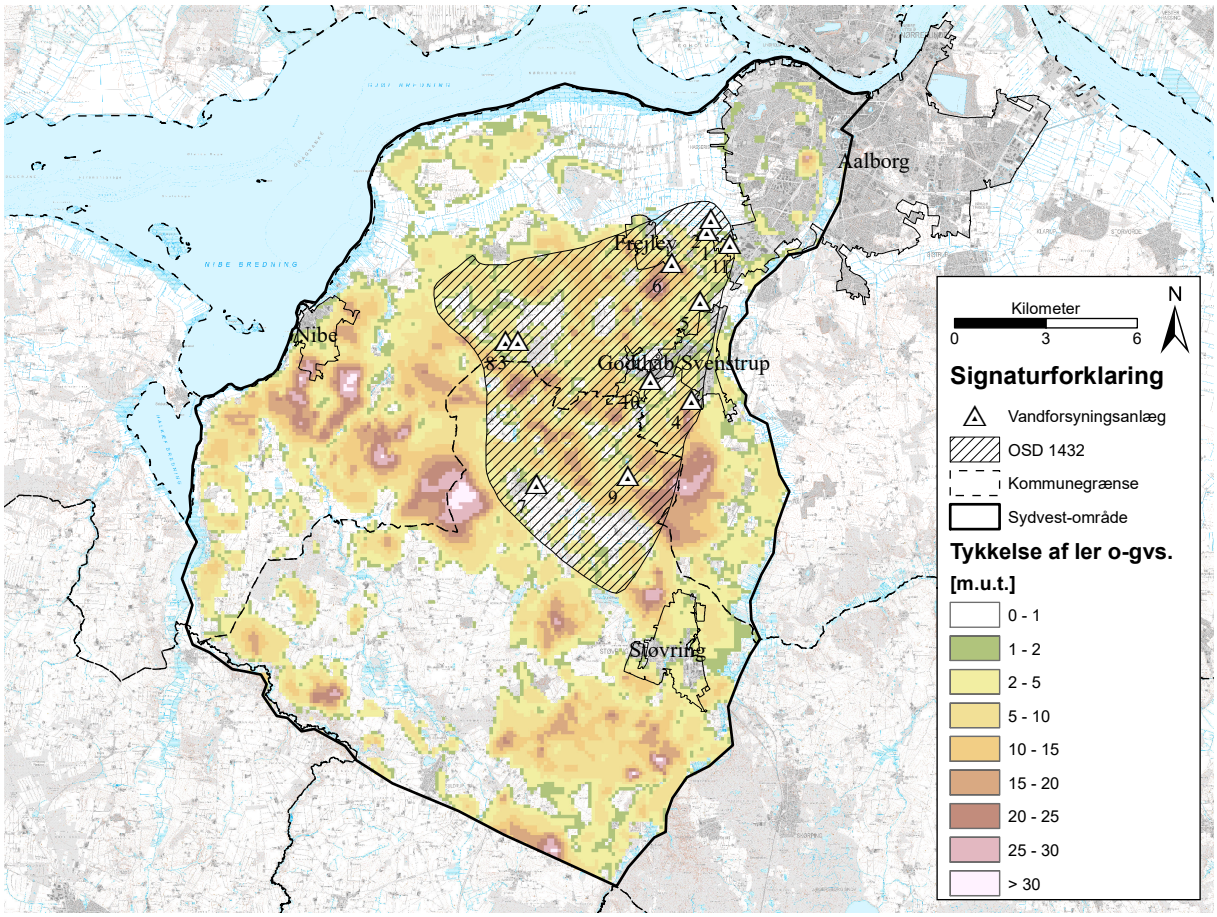
Undersøgelsen af lagtykkelserne er forbundet med strukturel usikkerhed, da interpoleringen baseres på en geologisk model, fremkommende af punktspecifikke boringer. I områder med lav densitet samt kvalitet af geologisk beskrivelse af boreprofiler kan strukturen være usikker. Dette vil eventuelt medføre fejlbehæftet interpolation af både grundvandsspejl og geologiske lag, hvilket vil resultere i afvigelser fra reelle forhold.

Indledningsvis undersøges tykkelse af sand over grundvandsspejlet. I afsnit 3.2.2 på side 14 vurderes det, at hvis der i overvejende grad forefindes sand over grundvandsspejlet, vil en effekt af en ændret arealanvendelse kunne monitoreres i grundvandet indenfor en relativt kort periode. På figur 3.11 illustreres den akkumulerede sanddybde over grundvandsspejlet i henhold til udvalgte vandværker i Sydvest-området.

Jf. figur 3.11 bemærkes, at der i størstedelen af Sydvest-området forefindes sand over grundvandsspejlet. I den nordligste del af området, er der ikke registreret betydelige mængder sand over grundvandsspejlet. Dette skyldes grundvandets terrænære placering, hvilket medfører en minimal tykkelse af den umættede zone i dette område. Sandbakkerne i den midt- og sydlige del af Sydvest-området er primært domineret af store niveauforskellige på grund af de sandholdige morænebakker, hvorfor denne variation også afspejles i den akkumulerede tykkelse af sand over grundvandsspejlet.

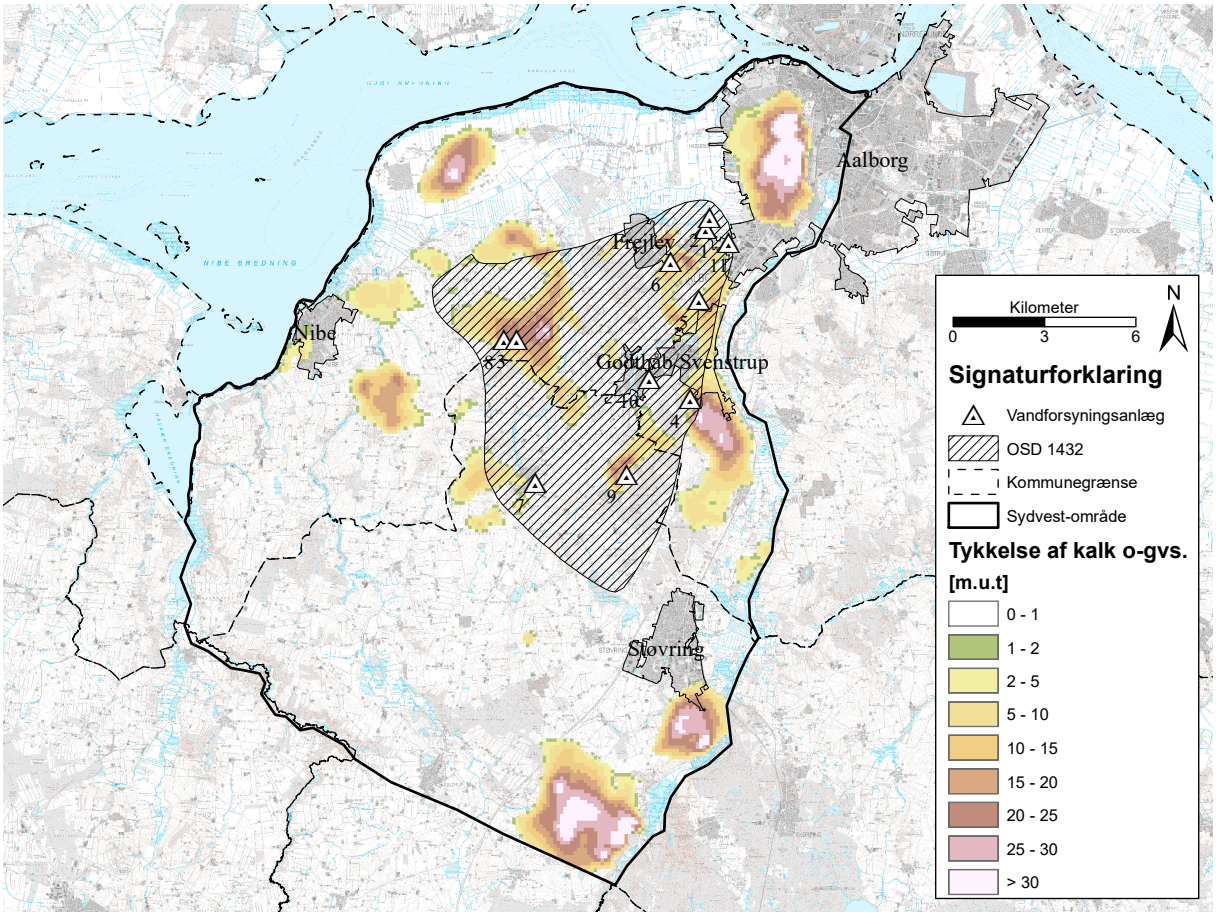


Figur 3.11. Akkumuleret tykkelse af sand over grundvandsspejlet.



Figur 3.12. Akkumuleret tykkelse af ler over grundvandsspejlet.

På grund af den lave hydrauliske ledningsevne, samt evne til tilbageholdelse af nitrat, har ler en beskyttende effekt på grundvandsmagasinet. Lerets beskyttende evne afhænger af homogenitet og tykkelse. Desuden kan der potentielt opstå iltfri forhold i leret, hvilket giver mulighed for denitrifikation. Heraf er det relevant at undersøge i hvilket omfang der forefindes ler over grundvandsspejlet. [Gladsaxe Kommune, 2015] Figur 3.12 viser tykkelsen af de akkumulerede lerlag over grundvandspejlet. Hertil noteres det, at der eksempelvis registreres lerlag under grundvandsspejlet, hvilke også kan have en beskyttende effekt, hvilket eksempelvis er gældende for AKV-Drastrup 2. Det bemærkes at der i markante dele af Sydvest-området ikke forefindes ler over grundvandsspejlet. Dette kan være til ulempe for grundvandskvaliteten, da lerlagenes beskyttende effekt ikke vil være til stede. Det bemærkes ligeledes at lerlagets udstrækning og tykkelse ikke er uniform i modelområdet, men derimod broget, hvor der udelukkende optræder lokale lerlinser særligt i den centrale del af modelområdet.
På baggrund af undersøgelsen af effekten af indsatsplaner i afsnit 3.2.2 på side 14 er det særligt interessant at kortlægge tykkelsen af kalk over grundvandsspejlet. Figur 3.13 illustrerer tykkelsen af kalk over grundvandsspejlet.



Figur 3.13. Akkumuleret tykkelse af kalk over grundvandsspejlet.

Det bemærkes, at der i forholdsvis store dele af Sydvest-området ikke forekommer kalk over grundvands-spejlet. Kalken registreres ved såkaldte kalkøer og forefindes pletvis i det meste af Sydvest-området på nær det sydvestligste hjørne af området. Der registreres imidlertid kalk over grundvandsspejlet sydøst for Frejlev, hvilket vurderes at være i potentiel indvindingszone for AKV-Drastrup og Frejlev kildepladserne. Kalk kan derved have en betragtelig indflydelse på nitrattransporten. Sammenholdes tykkelsen af kalk over grundvandsspejlet med den nuværende nitratsituation på figur 3.4 på side 11 bemærkes det, at der generelt forefindes relativt høje koncentrationer ved påvisning af umættet kalk.

3.4 Sammenfatning

Med baggrund i forundersøgelsen er den nuværende nitratsituation, effekten af indsatsplaner, samt de geologiske forhold i Sydvest-området belyst. Det historiske høje kvælstofoverskud i løbet af 80'erne har utvivlsomt være skyld i den nitratproblematik som vandforsyningen står overfor. Nitratkoncentrationen i grundvandet er stigende og kan potentielt true forsyningssikkerheden i fremtiden, eftersom flere af Aalborg Kommunes mest centrale kildepladser, der ligger i områder af særlig drikkevandsinteresse, er påvirkede. Problematikken forsættes til trods for omfattende regulering af nitratudvaskningen lokalt så vel som på landsplan. Det beskrevne helhedsplanområde nær Drastrup er indeholde monitorerings- og vandforsyningsboringer, hvor effekten af de implementeret indsatsplaner er forskellige. Det er fundet, at der forekommer relativ forskellighed i nitrattransporten, hvilket formegentlig skyldes geologien i området. Dette indikeres jf. monitoreringsboringerne 34.1705, 34.1743 og 34.1744 i Drastrup, hvor der går markant flere år, før den samme reduktion vil blive opnået i kalk sammenlignet med sand. Det er således en udfordring at prædiktere nitratkoncentrationen i vandforsyningsboringer, da nitratkoncentrationen respondere forskellige på de implementeret indsatsplaner.
Det er derfor essentielt for forsyningen at få belyst hvorledes nitratproblematikken udvikles i fremtiden. Hvis en sådan vurdering kan udfærdiges, kan der potentielt foretages mere målrettet indsats mod nitratforurening af grundvand.

Kapitel 4

Problemformulering

Som beskrevet i forundersøgelsen er Sydvest-området truet af stigende nitratkoncentrationer i det oppumpede grundvand. Dette til trods for en omfattende indsats mod nitratforurening, ved grundvandsbeskyttelse i form af arealomlægning, siden midten af 1980'erne. En nitratpulje af en ukendt størrelse truer forsyningssikkerheden i OSD 1432. Et udpræget landbrugsområde, men også et område af særlig drikkevandsinteresse, konflikter. Særligt vandforsyningsboringer udført i kalkdomineret geologi ved Drastrup oplever stadigt stigende nitratkoncentrationer til trods omfattende grundvandsbeskyttelse siden år 1997.

Det er usikkert hvor og hvilken form for indsats, der skal foretages i en målrettet regulering og hvornår en eventuel nitratpulje af en ukendt størrelse slår igennem i vandforsyningen og medfører potentiel trussel for forsyningssikkerheden, hvilket leder til problemformuleringen:

> *Kan der, ved en simpel metode, opsættes og verificeres en beregningsmodel til beskrivelse af nitrattransport fra udvaskning til vandforsyningsboring på regional skala, som gør det muligt at prediktere nitratkoncentrationer samt effekten af ændret udvaskning og indsats i oplandet?*

Der undersøges, hvorvidt der kan opsættes en beregningsmodel til fremskrivning af nitratkoncentrationer i vandforsyningsboringer. På baggrund af modellen vil der, på både lokal- og regional skala, kunne udarbejdes en risikovurdering og estimeres en tidshorisont for potentielle overskridelser af grænseværdi for nitratkoncentrationer i OSD 1432. Modellen skal potentielt danne grundlag for objektiv argumentationen ved fagligt velbegrundede indsatsplaner. Hvis en sådan model kan opsættes vil det medføre muligheden for at benytte modellen til stokastisk modellering og undersøgelse af parameter- og prædiktionsusikkerhed, såvel som den usikkerhed der knyttes til modellens struktur og processer.

Del II

Opsætning af Modelkompleks til simulering af nitrat fra udvaskning til kildeplads

Kapitel 5

Systemanalyse

Dokumentation af de konceptuelle rammer for beregningsmodellen, via grundig systemanalyse og procesforståelse, er essentiel. Kapitlet vil derfor indeholde en præsentation af gældende udfordringer for modelleringen. Procesforståelsen vil betyde mulighed for opsætning af en konceptuel model, som skal danne grundlag for rapportens metode til fortolkning af de processer der forekommer i det naturlige system. Desuden vil beregningsfremgangen for modelleringen af vand- og stoftransport fra udvaskning til vandforsyningsboring blive præsenteret.

Der foreligger en række begrænsninger for, hvorledes modelleringen kan udarbejdes, grundet specifikke strømningsforhold i kalk i den umættede zone. Til at tage højde for variationer i stoftransport for et enkelt- til et dobbeltporøst medium foreligger en række modelværktøjer, som alle ligeledes er begrænsede i anvendelsesmulighed.
En diskret sprækkemodel, til beskrivelse af sprækker og matrice explicit, hvor der tages højde for den enkelte sprækkes placering, er en metode med høj detaljeringsgrad. Denne metode er udfordret vedrørende ukendskabet til sprækkernes placering og udformning, hvorfor metoden ikke anvendes på regional skala. En anden metode, kaldet dobbelt kontinuum metoden, anvender Richards ligningssæt. Her beskrives det dobbeltporøse medium overlappende, kontra en explicit beskrivelse i en diskret sprækkemodel. En dobbelt kontinuum betragtning kræver separate ligningssæt for hvert domæne, hvilket er til ulempe for parameteriseringen og beregningstiden. [Sonnenborg, 2006] Der vælges heraf at undersøge, hvorvidt en alternativ og simplere tilgang til modellering af stof- og vandtransport i den umættede zone kan udfærdiges. Før modellen konceptualiseres, vil der udarbejdes en procesforståelse, for at klarlægge, hvilke elementer modellen skal beskrive.

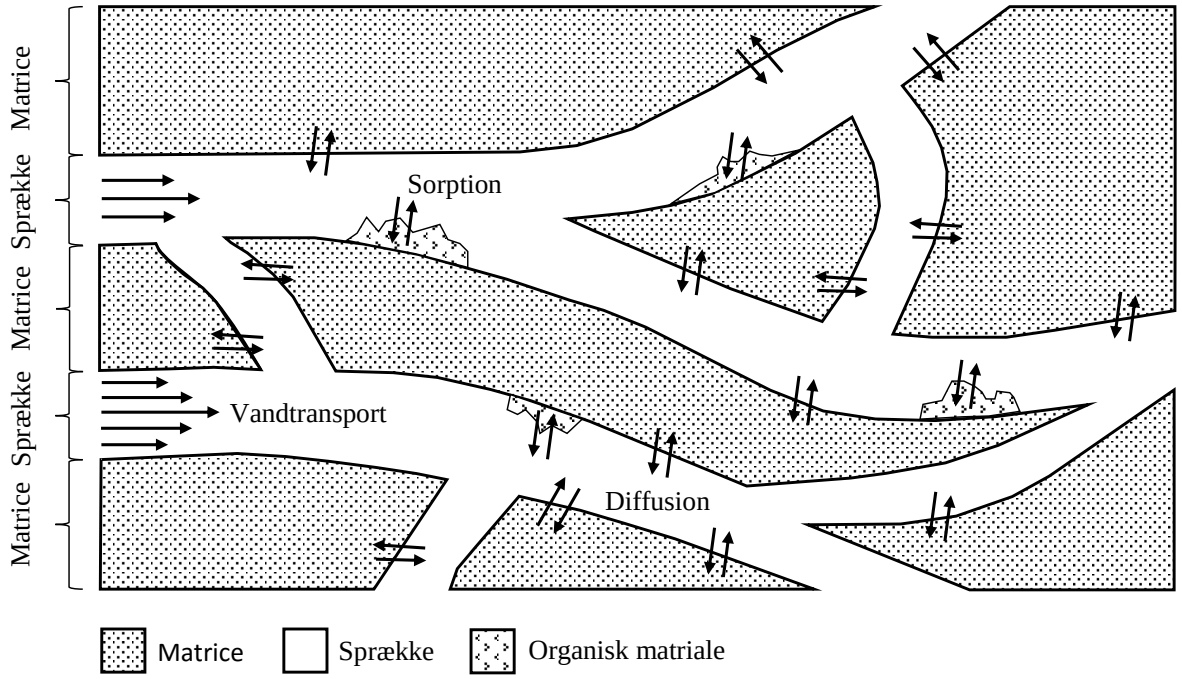
5.1 Procesforståelse

I det følgende afsnit analyseres nitrat som stof samt de processer, som er styrende for transporten af nitrat fra udvaskning ved rodzonen til oppumpning i en vandforsyningsboring på regional skala.
Nitrat, NO_3^-, er som sumformlen angiver en negativ ladet ion, hvorfor binding til andre negativ ladede partikler som f.eks. ler ikke forekommer. Nitrat er karakteriseret ved en høj opløselighed i vand, hvorfor nitrat hovedsageligt følger vandets dynamik fra udvaskning og ned til grundvandet eller andre områder tilhørende det akvatiske miljø. [Hansen et al., 2014]
Et andet karakteristika er at nitrat potentielt nedbrydes i grundvandet ved denitrifikation. Den reducerende proces er en bakteriel, hvor nitrat anvendes om elektronaccepter, hvorefter nitrogen frigives som frit kvælstof. Denitrifikationsraten er kontrolleret af flere faktorer, hvor det er erfaret at en pH-værdi mellem 7 og 8 er ideel. Denitrifikation forekommer i grundvandet, hvis iltindholdet er mindre end $0{,}2\,\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}$, hvilket er tilnærmelsesvis anoxiske forhold. [Feasta et al., 1998]
Denitrifikation kan forekomme ved to processer, hvis forholdende tillader det. Denitrifikation sker ved anvendelse af enten organisk bundet kulstof eller pyrit, af to forskelle typer bakterier. [Miljø- og Fødevareministeriet, 2016] Det er derfor gældende at denitrifikation forekommer hvor iltindholdet er tilstrækkeligt lavt samtidigt med tilstedeværelsen af nødvendig bakterietype samt substrat hertil enten i form af pyrit eller organisk kulstof.

Grundet nitrats beskrevne høje opløselighed vil stoffet som nævnt hovedsageligt følge vandets advektive transport vertikalt med infiltrationen i den umættede zone og herefter videre med grundvandsstrømningerne i den mættede zone. Transporten af vand i den umættede zone adskiller sig ved, at den hydrauliske ledningsevne er afhængig af vandindholdet. Et stigende vandindhold og dermed mætning og faldende

poresug, vil medføre en øget hydraulisk ledningsevne. Omvendt, vil et mindre vandindhold og større poresug medfører en reduceret ledningsevne. Det fulde potentiale for vandtransport sker herved ved fuld saturation i den mættede zone. Den hydrauliske ledningsevnen i den mættede zone er direkte proportional med sedimentets permeabilitet, der afhænger er tortuositeten og den effektive porediameter. Et groft sediment vil have relativt høj hydraulisk ledningsevne sammenlignet med et finere sediment. En proces til tilbageholdelse af nitrat i forhold til den advektive transport er sorption til organisk materiale. Da nitrat, som nævnt er negativt ladet, vil nitraten sorberes til organisk materiale afhængigt af tilgængeligheden, hvilket vil føre til tilbageholdelse fra middelvandshastigheden. [Loll og Møldrup, 2000]

Der foreligger dog, som før nævnt, en række udfordringer i modelleringen af nitrat på større skala gennem diverse geologiske medier. Der forekommer processer i det dobbelt porøse kalk, som er særligt komplekse at modellere. Figur 5.1 illustrerer en principskitse for et udsnit af en kalkmatrice med gennemgående sprækkesystem. Ligeledes illustreres de processer som medfører afvigelser fra den relativt simple advektive nitrattransport.



Figur 5.1. Principskitse for primære transportformer i et dobbeltporøst medium ved betragtning af en dobbelt kontinuum tilgang. Skisten viser transportform i mættet tilstand eller med et aktivt sprækkesystem.#[EPA, 2002]

Som vist på figur 5.1 udgøres selve kalken af en sprække- og matricedel. Betragtes de to dele separat, vil sprækkesystem, jf. Mathias [2005], have en høj hydraulisk ledningsevne med lav effektiv porøsitet, mens selve matricedelen omvendt vil have lav hydraulisk ledningsevne og høj totalporøsitet [Loll og Møldrup, 2000]. Dette vil nødvendigvis medføre en spredning, hvor en del af nitraten vil gennembryde hurtigt fra sprækkerne, mens nitraten der overføres ved diffusion mellem sprække- og matricedomæne vil medføre en markant lavere transporthastighed som forsinkelse.

Betragtes den umættede zone i kalken, jf. Sonnenborg [2006], forefindes imidlertid yderligere grad af kompleksitet. Selve kalkmatricen dræner ikke i tørre perioder, hvilket vil medføre at matricen konstant er vandmættet. Det er således udelukkende kalksprækkerne der, hvis infiltrationsmønstret tillader det, dræner i tørvejr. Desuden vil der, i tilfælde af koncentrationsgradient mellem matrice og sprække foregå ind diffusionsudveksling herimellem. Samlet set vil den relativt hurtige sprække transport og det diffusive tab ud i matricen medføre et gennembrud, samt en efterfølgende lang haledannelse på gennembrudskurven.

[Sonnenborg, 2006] Desuden bemærkes det også at der kan forekomme tilbageholdelse i form af sorption til organisk materiale både i den mættede og umættede zone.
Sprækkesystemet i kalk er ikke konstant aktiveret, da strømningen heri afhænger af afstrømningen fra potentielle overliggende geologiske lag. Overliggende lag vil, afhængig af tykkelsen, udjævne afstrømningshydrografen, hvilket vil betyde at matrice potentielt set kan håndtere en betragtelig proportion af den årlige nedbørsmængde omend afhængig af den daglige variation i nedbørsmønsteret. Jf. Eldrup og Bonnerup [2014] forekommer 80 % af transporten i matricen mens de resterende 20 % foregår i sprækkesystemet. I tilfælde af at kalklaget er i terræn, vil sprækkerne aktiveres afhængigt af nedbørsintensiteten og matricens ledningsevne. Med svingende regnintensitet, som ofte forekommer, vil det medfører, særligt hvis det dobbeltporøse medium er placeret terrænært, at sprækkerne vil skiftevis aktiveres og deaktiveres, hvilket vil medføre varierende transporthastigheder. [Mathias, 2005] Det er således dokumenteret, at selv processuel beskrivelse af transport af nitrat er vanskeligt defineret, hvorfor selve konceptualiseringen er tilsvarende usikker. I det følgende vil der udfærdiges en opsamling af modellerede processer.

5.1.1 Opsamling af modellerede processer

På baggrund af forrige afsnit opsummeres de anvendte processer i beskrivelsen af transport af nitrat fra udvaskning til vandforsyningsboring. De anvendte og negligerede processer i modelleringen af nitrat fra udvaskning til kildeplads er illustreret i tabel 5.1, hvor sand og ler defineres som et enkeltporøst medium, mens kalk er dobbelt porøst.

Tabel 5.1. Anvendte og negligerede processer i modelleringen af nitrat fra udvaskning til vandforsyningsboring.

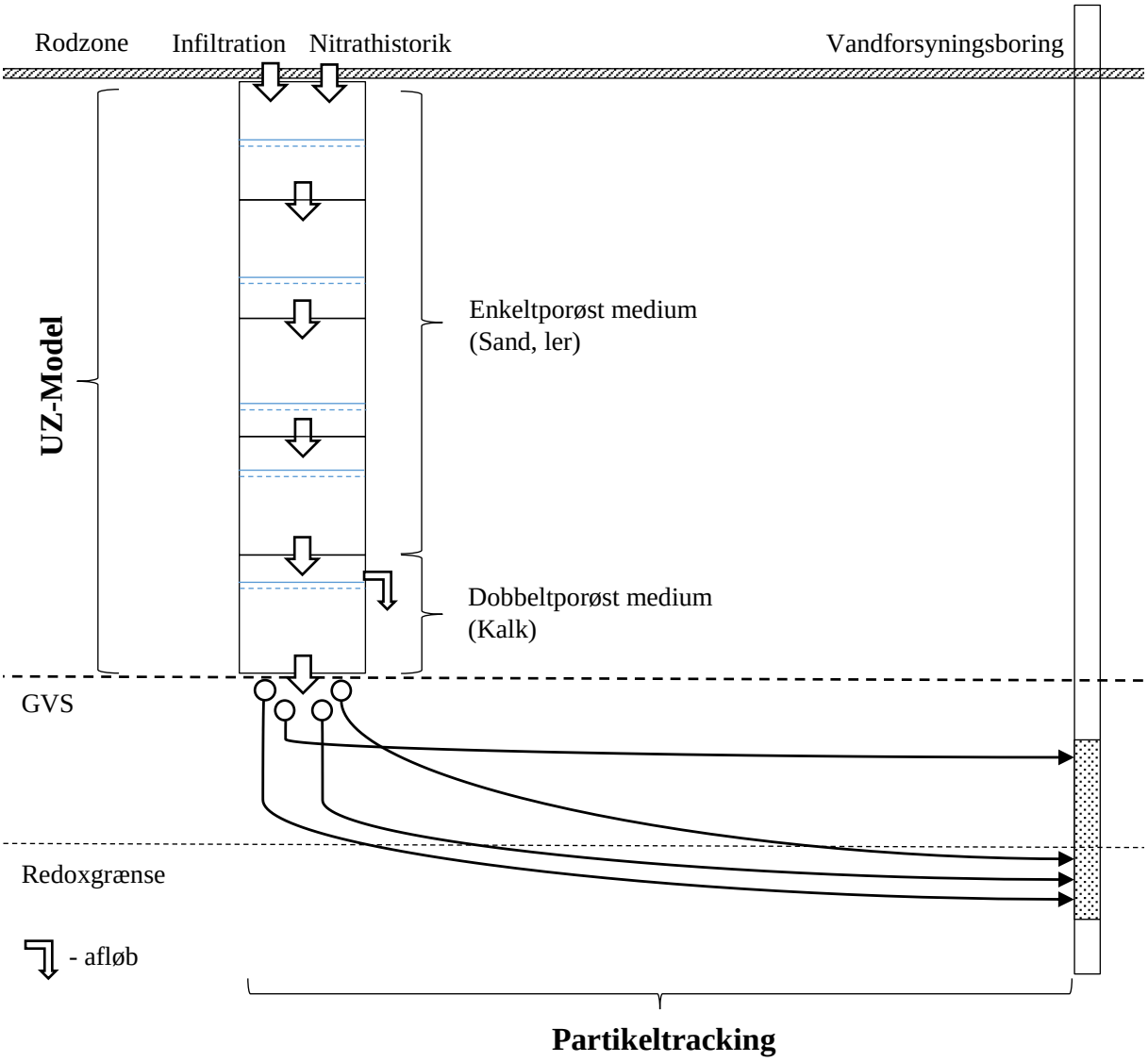
	Enkelt porøst medium		**Dobbelt porøst medium**	
	Mættet zone	Umættet zone	Mættet zone	Umættet zone
Advektion	✓	✓	✓	✓
Sprækkestrømning	-	-	✓	✓
Tilbageholdelse	✓	✓	✓	✓
Nedbrydning	✓	-	✓	-

Tabel 5.1 viser at en række processer ikke modelleres, hvilket vil medfører en stigende modelusikkerhed. Den advektive transport medtages, da denne proces er styrende for transporten af det letopløselige nitrat. Ligeledes medtages muligheden for at modellere dynamiske sprækkestrømninger og den dertilhørende gennemskyllende effekt på nitrattransporten. Der tilstræbes at medtage tilbageholdelse af nitrat gennem både den umættede- og mættede zone for både enkelt- og dobbeltporøse medier. Tilbageholdelsen er inkluderende både sorption til organisk materiale, eventuel diffusiv udveksling mellem matrice- og sprækkesystem og tilbageholdelse i matrice generelt. Det vurderes at tilbageholdelsen vil varierer mellem den effektive porøsitet og den totale porøsitet, svarende til uden og med fuld tilbageholdelse. Derfor undersøges der ligeledes ikke om der nødvendiggøres yderligere mekanisk dispersion. Det vurderes fordelagtig at anvende ekstremer for tilbageholdelsen, da denne proces er særlig kompleks at beskrive på den omtalte skala. Det forventes at der foreligger en relativ stor heterogenitet i geologien, hvorfor der kan kompenseres for denne strukturelle usikkerhed ved at øge parameterusikkerheden for tilbageholdelse. Denitrifikation medtages i den mættede zone, da denne er eneste massefjernende proces i nitrattransporten og derfor potentielt kan reducere en eventuel nedsætning af risiko i forhold til nitratproblematikken. Det vurderes, at den primære denitrifikation vil foregå i den mættede zone under redoxgrænsen, hvorfor denitrifikation i den umættede zone negligeres som proces. Ved negligering af centrale processer til fordel for en relativt simpel betragtning af tilbageholdelse, forøges modelusikkerheden betragteligt, mens

parameterusikkerheden aftager. Det vurderes derfor for en beregningsmodel nødvendigt at anvende end stokastisk tilgang til parameteriseringen, hvis den totale usikkerhed skal minimeres i modelleringen af nitrat fra udvaskning til kildeplads.

5.2 Konceptuel model

I henhold til de beskrevne processer og modelleringsformålet opstilles en konceptuel model til illustration af den forsimpling, der foretages af det naturlige system. Den konceptuelle model forefindes på figur 5.2, hvilken konceptualiserer nitrattransporten fra udvaskning til vandforsyningsboring. De to primære beregningsprocesser i det samlede Modelkompleks udgøres af UZ-Modellen, hvilken beskriver transporten fra udvaskning til grundvandsspejlet og partikeltrackingen, som beskriver den videre transport fra grundvandsspejl til vandforsyningsboring.



Figur 5.2. Konceptuel principskitse af simplificeret modelleringsopbygning fra udvaskning ved rodzonen til vandforsyningsboring. Skitsen er opbygget af fem geologiske lag i den umættede zone. Bemærk at skitsen ikke er målfast eller afbilleder den geologiske model.

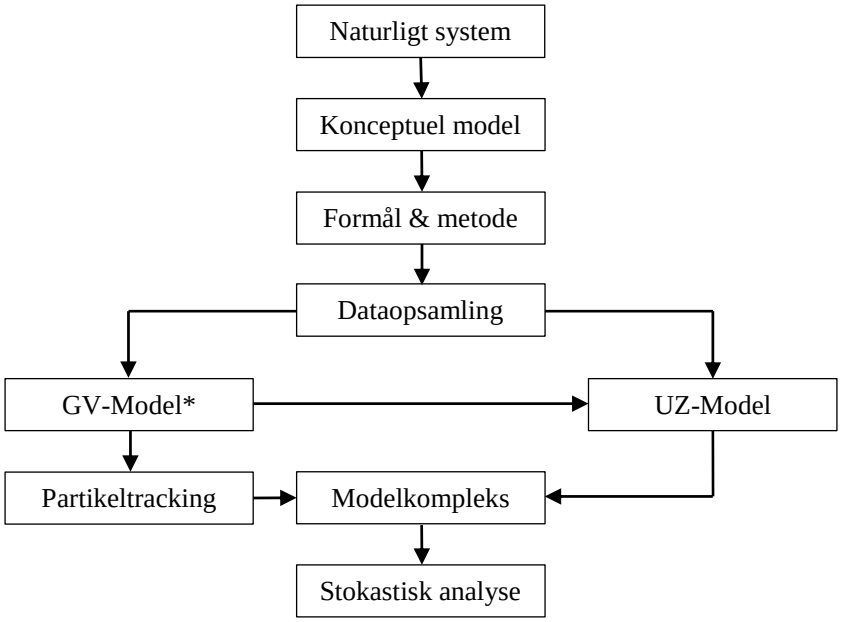
UZ-Modellen baseres på en lineær reservoir tilgang, hvor afstrømningen i reservoiret er modificeret lineært afhængig af vandstanden. Et reservoir betragtes som en numerisk boks, hvor vandstanden kan varierer afhængig af afstrømning til og fra boksen. Således kan vandindholdet varierer i den umættede

zone afhængigt af nedbøren. Det tiltænkes at en kæde af geologisk afhængige reservoirs, skal udgøre modelleringen i den umættede zone. Af figur 5.2 bemærkes, at der tilknyttes to input i form af infiltration og historisk nitratudvaskning til UZ-Modellen. Til modelinput tilknyttes en nitrathistorikken for den specifikke arealanvendelse, således der skelnes mellem historisk udvaskning af nitrat fra landbrug, natur- og byområder. Til hver karakteristisk arealanvendelse tildeles en historisk typekurve for nitrathistorikken. Dette muliggør potentielt, at foretage ændringer i arealanvendelsen og undersøge, hvilken effekt det vil medføre på nitratkoncentrationen i en vandforsyningsboring. Nettonedbøren udgør infiltrationsbidraget til modellen, som er styrende input for vandtransporten.
Vandtransporten i den umættede zone, for hvert reservoir, er afhængig af vandindholdet og en geologisk afhængig ledningsevneparameter, som funktion af vandmætning. Hvert geologisk lag udgøres af ét reservoir klassificeret som enten sand, ler eller kalk. Desuden negligeres horisontal transport til fordel for udelukkende 1-dimensional vertikal vand- og stoftransport. Differentieringen mellem enkelt- og dobbeltporøst medium gøres ved at indlægge afløbstud i alle kalklag i UZ-Modellen. Afløbstuden muliggør, at der i tilfælde af intense og langvarige regnskyl skal ske en sprækkeaktivering, hvor kalksprækkerne vil aflede direkte til det underliggende lag, indtil ledningsevnen for matricen kan håndtere nedbøren.

Af figur 5.2 bemærkes, at der foretages partikeltracking under grundvandsspejlet. Partikeltracking sker som erstatning til en stoftransportmodel i den mættede zone, hvor partiklerne spores 3-dimensionalt med grundvandsdynamikken. Der skælnes i partikeltrackingen mellem en transportid over- og under redoxgrænsen, hvorved denitrifikation ved iltfrie forhold kan medtages som reducerende proces for koncentrationen af nitrat. Partiklerne indsættes ved grundvandsspejlet og spores fremadrettet indtil endedestination. Hver partikel tildeles en gennembrudskurve fra UZ-Modellen, hvor den endelige koncentration ved vandforsyningsboringen er forskudt med partiklens transporttid i den mættede zone. Hver partikel bidrager således med en gennembrudskurve forskudt med transporttiden. Gennembrudskurverne reduceres for at tage højde for denitrifikationen, hvis der forekommer ophold under redoxgrænsen. Nitratmodelleringen sker ved at vægte de enkelte gennembrudskurver for hver partikel, som tilstrømmer én specifik vandforsyningsboring, med deres respektive infiltrationsbidrag ved grundvandsspejlet. Ved at skalere transporttiden med et interval for porøsiteten svarende til mellem effektiv- og totalporøsitet vurderes det, at der kan tages forbehold for tilbageholdelse i dobbelt porøse medier. Den samlede metode for opstilling af beregningsfremgangen forefindes i følgende afsnit.

5.3 Metode

Den konceptuelle model består af en relativt simpel tilgang til modelleringen af nitrat fra udvaskning til vandforsyningsboring. Fremgangsmåden for beregningskonceptet forefindes i figur 5.3. Metoden baseres dog på en række elementer der skal være opsat inden de endelige resultater kan analyseres.



Figur 5.3. Flowdiagram og opsætning af metoden for konstruering af Modelkompleks til nitratmodellering. * indikerer at elementet er udleveret og ikke opsættes og dokumenteres i nærværende rapport.

Indledningsvis er en forståelse, for det naturlige system og processerne herunder, essentiel. Dette resulterer i opsætning af den konceptuelle model, som danner modelleringsgrundlag. Herefter opsamles og fortolkes tilgængelig data og disse konverteres til modelanvendelige oplysninger.
Det samlede Modelkompleks opdeles i to primære beregningsprocesser. Grundvandsmodellen (GV-Modellen), udarbejdet af NIRAS [2015], er opbygget i det kommercielle program MIKE SHE af *Danish Hydrological Institute* (DHI). Programmets primære modul beregner vanddynamikken i grundvandet ved en 3-dimensionsel numerisk grundvandsmodel. Hertil kan en serie af moduler efter formål tilknyttes, herunder partikeltracking, der som nævnt anvendes til nitratfremskrivningen.
Partikelbevægelserne styres udelukkende af vanddynamikken fra grundvandsmodellen, hvor hypotetiske partikler spores fremadrettet. Modulet muliggør anvendelse af registreringszonekoder, hvilket medfører at en detaljeret sporing af partiklers bevægelse lagvis kan dokumenteres. Dette er særligt fordelagtigt, da det medfører at partikeltiden under redoxgrænsen kan estimeres relativt korrekt sammenlignet med en tid bestemt ved eksempelvis lineær interpolation. Partikeltrackingen medfører yderligere muligheden for at kortlægge de grundvandsdannende oplande.

UZ-Modellen udgør den anden primære beregningsprocess, der skal opstilles inden et samlet Modelkompleks kan anskues. UZ-Modellen opbygges i programmet MATLAB® af *Mathworks*. UZ-Modellen baseres på samme geologiske model som danner datagrundlag for den hydrologiske GV-Model. Der er nødvendigt at have en tilgængelig grundvandsmodel der indeholder en velbeskrevet geologi samt placering af grundvandsspejlet. Disse oplysninger udgør struktur og nedre rand for UZ-Modellen. Som vist på figur 5.3 tilstøder de to primære beregningsprocesser til et samlet Modelkompleks, som skal danne grundlag for kalibreringen udført som en stokastisk analyse, hvori der ligeledes vil indgå en validering. Kalibreringen foretages på baggrund af observerede nitratkoncentrationer i vandforsyningsboringer. Afslutningsvis vil der udfærdiges en resultatanalyse, inden Modelkomplekset potentielt kan tages i brug som metode til nitratfremskrivning. I de følgende kapitler vil udfærdigelsen af den samlede metode for Modelkomplekset blive detaljeret dokumenteret startende med UZ-Modellen.

Kapitel 6

Modellering af gennembrudskurver i den umættede zone

I det følgende kapitel opstilles en 1-dimensional numerisk umættet zone model, som baseres på den konceptuelle model. For modellen opstilles udtryk for, hvorledes vand- og stoftransporten i den umættede zone beregnes. I kapitlet klargøres UZ-Modellen til beregning af gennembrudskurver til den mættede zone. Den geologiske model gøres anvendelig ved en diskretisering, således vand og stoftransporten kan beregnes numerisk. Infiltration og historisk nitratudvaskning udgør inputs til modellen, hvorfor en klarlægning af disse vil indgå. Afslutningsvis i kapitlet undersøges modellens evne til at sikre retmæssige transporthastigheder af nitrat gennem den umættede zone. Supplerende dokumentation til UZ-Modellen findes i appendiks B.1 på side A7.

6.1 Formål

Formålet med UZ-Modellen er numerisk at beskrive geologisk afhængige gennembrudskurver for nitrat på regional skala ved en grey box beregningstilgang, da der ønskes korte beregningstider og simpel parameterisering. Det er formålet med modellen at forsimple de komplekse processer for stoftransporten i den umættede zone, således grundig usikkerhedsvurdering kan udføres. Det er i nærværende rapport valgt at benytte en forsimplet beskrivelse af de fysiske processer i umættet zone fordi det forventes at usikkerheden, derved ikke har afgørende betydning for formålet med beregningerne. For at redegøre for usikkerhederne knyttet til denne forsimpling opbygges UZ-modellen således, at den kan anvendes til stokastisk modellering af gennembrudskurver på regional skala. Hvis en sådan model opstilles er det muligt at vurdere nitratsårbarheden i områder med både enkelt- og dobbeltporøse medier, hvorfor modellen potentielt er anvendelig til risikovurdering på regional skala. Ved anvendelse af arealafhængig nitrathistorik, muliggøres en undersøgelse af effekten af både realiserede og planlagte grundvandsbeskyttende indsatsplaner.

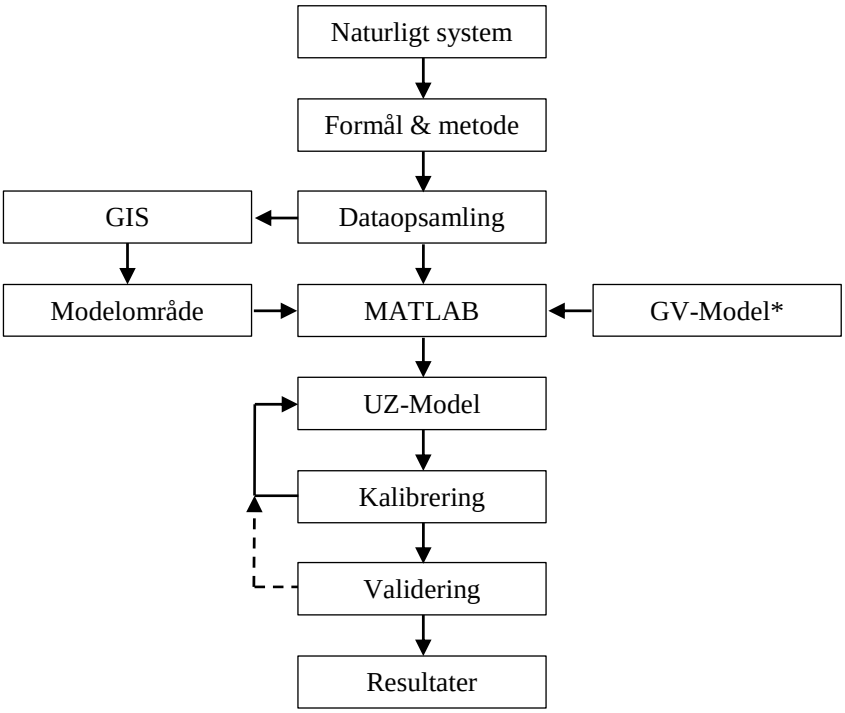
6.2 Metode

I det følgende afsnit præsenteres den anvendte metode for modellering af vand- og stoftransport i den umættede zone. Metoden for anvendelsen af UZ-Modellen er illustreret ved figur 6.1 der viser, hvilke elementer der skal fastlægges forinden UZ-Modellen kan anvendes til stokastisk modellering af gennembrudskurver for nitrat.

Indledningsvis undersøges det, hvilke fysiske- og kemiske processer modellen forventes at skal kunne modellere i beregningen af vand- og stoftransporten, som for UZ-Modellen er præsenteret i afsnit 5.1 på side 27. Formålet med UZ-Modellen er, som beskrevet tidligere, at kunne estimere gennembrudskurver på regional skala uanset geologi. Derfor anvendes en kombination af teoretisk og databaseret viden til at fuldende modellen.

Det følgende element i opsætningen består i dataindsamling der er nødvendig for anvendelse af UZ-Modellen. For UZ-Modellen er det essentielt at have en geologisk model, der indeholder den varierende geologi for det specifikke modelområde. Fra den geologiske model for den umættede zone anvendes tykkelsen for hvert geologisk lag fra terræn til grundvandsspejlet. Det er fordelagtigt, at den geologiske model er i samme opløsning som diskretiseringen af UZ-Modellen, hvis ændringer over en kort geografisk afstand skal modelleres. Beliggenheden af grundvandsspejlet er ligeledes essentiel, da denne definerer den samlede tykkelse for den umættede zone og dermed grænsen for UZ-Modellens gyldighed. For vand- og stoftransporten i UZ-Modellen er infiltrationen og nitratudvaskningen styrende inputs for vandhastigheden

og vandstanden i hvert reservoir og dermed nitratkoncentrationen ved overgangen fra den umættede- til den mættede zone som output. Figur 6.1 viser metoden for opsætning af UZ-Modellen.

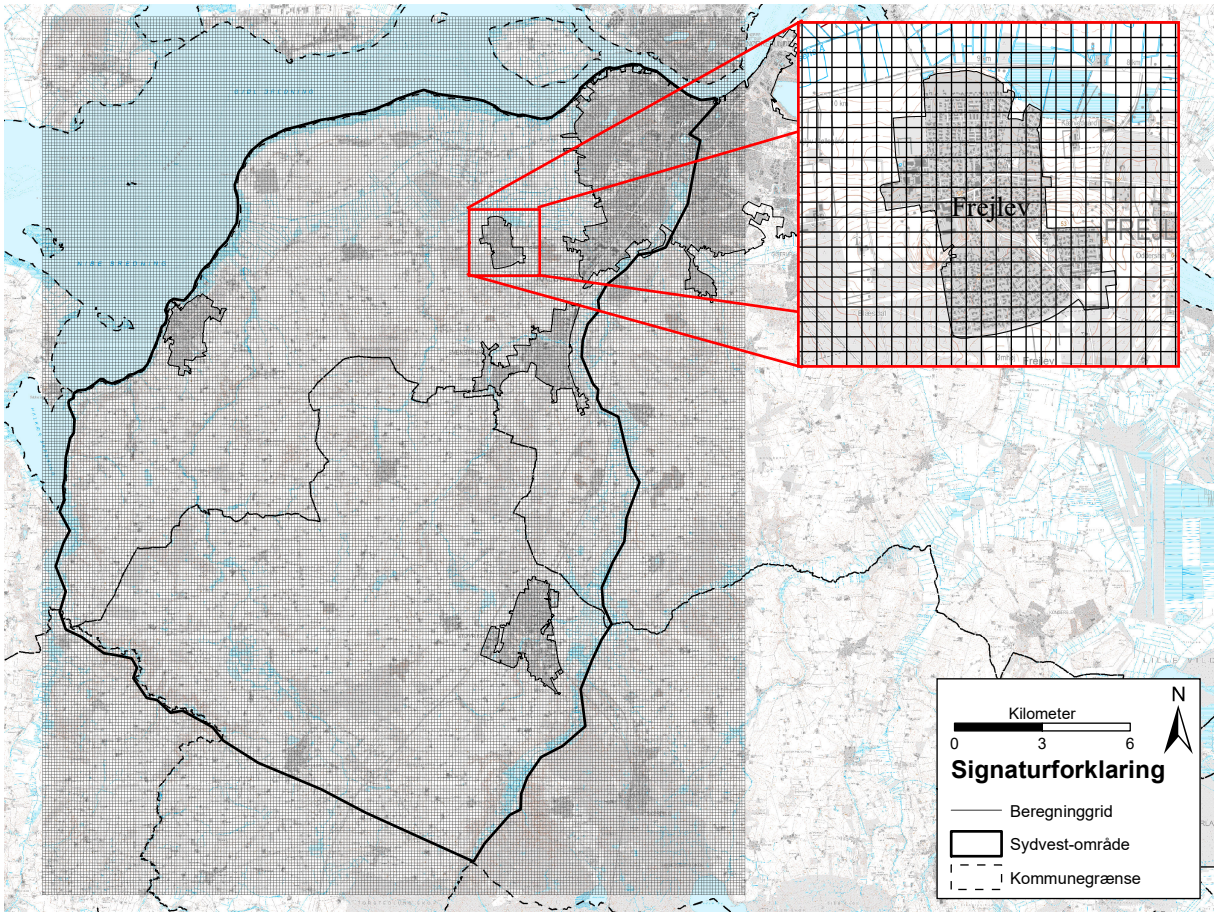


Figur 6.1. Flowdiagram: Metode for konstruering af UZ-Modellen.

Jf. figur 6.1 forsimples det ellers relativt komplekse og usikre naturlige system med grundlag i det beskrevne formål med modelleringen. Der udfærdiges på den baggrund en dataopsamling, hvor data analyseres og fortolkes således det er modelanvendeligt til beskrivelse af et afgrænset modelområde. Med fastlæggelsen af den geologiske model og grundvandsspejlets placering fra den hydrologiske GV-model opsættes en grey box UZ-Model til beskrivelse af nitrattransport fra udvaskning ved rodzonen til grundvandet. Efter opsætning af UZ-Modellen kalibreres og valideres denne imod forventelige transporttider for nitrat igennem den umættede zone, hvor dertil kalibrerede parameter anvendes som udgangspunkt til beregningen af vand- og stoftransporten. Det følgende afsnit indeholder en diskretisering af Sydvest-området. Den komplette opsætning af UZ-Modellen findes på bilags-CD D.3 - *\Modelkompleks\Modelkompleks.mat*.

6.3 Modelområde

Inden der afgrænses til et modelområde forudsættes det som nævnt at en række data opsamles og at der forefindes kendskab til grundvandspejlets placering, eventuelt fra en grundvandsmodel. Der kan ligeledes anvendes interpoleret potentialekort. Modelområdet er vist på figur 6.2, hvor det bemærkes, hvorledes modelområdet indeholder Sydvest-området. Den horisontale diskretiseringen er afdækket af et rektangulært beregningsgrid bestående af kvadratiske beregningsceller tilsvarende den hydrologiske model, da det som nævnt er fordelagtigt at anvende samme horisontale diskretisering. Størrelsesordenen for beregningsgridet og et zoomet billede af Frejlev by, vises ligeledes. Det samlede beregningsgrid måler 30 km i længdegraden og 24 km i breddegraden, og med en størrelse pr. beregningscelle på 100x100 m, er modelområdet udgjort af 72 000 beregningsceller horisontalt. Der bliver således, ved anvendelse af UZ-Modellen, beregnet vand- og stoftransport for hver beregningscelle. Eftersom at modellen simulerer vand- og stoftransporten 1-dimensionalt igennem den umættede zone er vertikal diskretisering for hver beregningscelle nødvendig.



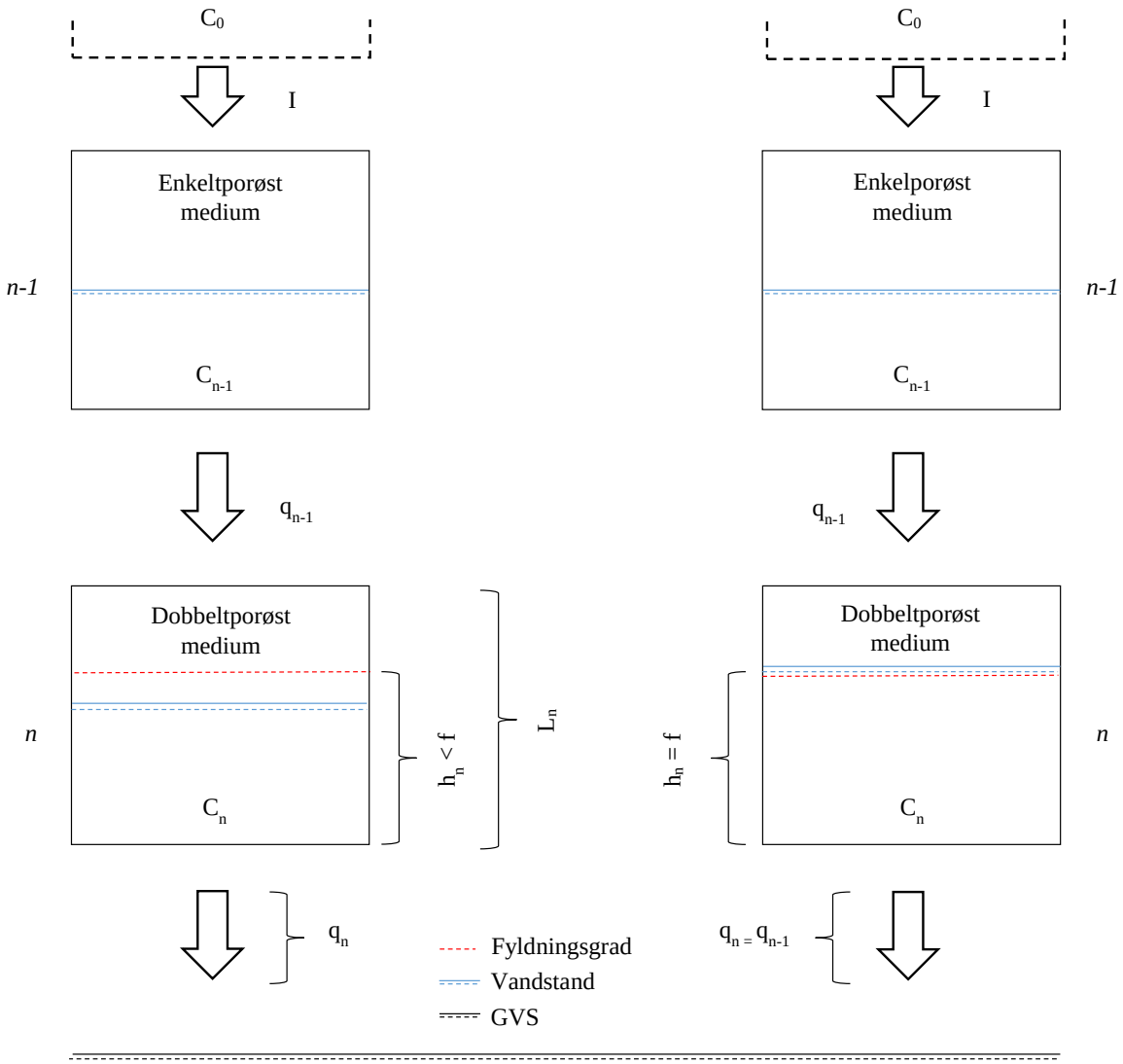
Figur 6.2. Sydvest-området samt placering af et beregninggrid for UZ-Modellen.

For hver beregningscelle tildeles en række reservoir afhængig af diskretiseringen vertikalt, således at hvert geologisk lag er udgjort af ét reservoir. Den vertikale diskretisering tager udgangspunkt i den geologiske model, som beskrevet i afsnit 3.3. Antallet af geologiske lag i Sydvest-området over grundvandsspejlet i hver beregningscelle varierer fra 1 til 11 lag. Minimumstykkelsen af hvert reservoir fastsættes til 0,5 m, hvilket er tilsvarende GV-Modellen. Det reservoir, som er placeret i skæring med grundvandsspejlet er forskelligt i hver beregningscelle. Der anvendes i modellen et stationært grundvandsspejl i opsætningen af UZ-Modellen, hvorfor netop dette reservoir kan beregnes explicit med samme minimumstykkelse. Det er herved fastlagt at den vertikale diskretiseringen af Sydvest-området er udgjort af ét reservoir pr. geologisk lag, hvor reservoiret har samme tykkelse som det geologiske lag eller den fastsatte minimumstykkelse. Da både den horisontale og vertikale diskretiseringen er fastlagt, er det muligt at opsætte den numeriske UZ-Model, således der kan beregnes vand- og stoftransport i hver beregningscelle for hvert reservoir.

6.4 Opsætning

Formålet og forudsætningerne er klarlagt, hvorfor UZ-Modellen kan opsættes. UZ-Modellen baseres ikke på de gængse beregningsmetoder for modellering af nitrattransport i den umættede zone, grundet de dokumenterede udfordringer beskrevet i kapitel 5 på side 27. Derfor studeres en alternativ grey box metode til modellering af hydrologien og stoftransporten i den umættede zone.
Den hydrologiske model for den umættede zone baseres på en lineær reservoir betragtning, som vist på figur 6.4. Infiltrationen fra rodzonen konverteres til afstrømning og udjævnes gennem en sammensat kæde af reservoir, hvor tykkelsen af hvert reservoir følger den geologiske model til grundvandspejlet. Da kontinuitets princippet er gældende og baseres på en vandbalancen vil der i tilfælde af difference mellem den ind og udstrømmende mængde vand forekomme en opmagasinering eller udtømning.

UZ-Modellen modificeres således afstrømning er eksponentielt afhængig vandstanden, hvilket erfaringsmæssigt er en egenskab for ledningsevnen i den umættede zone. Der modelleres for hvert reservoir en koncentration af nitrat, således udvaskningskoncentrationen oplandes fuldt i hele reservoiret. Det er for modellens formål ikke interessant at beskrive kortvarige punktkilder, men udelukkende at kunne beskrive en langvarig fremtidig udvikling af nitratkoncentration i vandforsyningen. Muligheden for modellering af en øget transport af nitrat ved sprækkeaktivering medtages med forbehold for ikke at kunne beskrive abrupte ændringer i nitratudvaskningen.



Figur 6.3. Principskitse for modellering af stoftransport ved en lineær reservoir tilgang i enkelt- og dobbeltporøse medier for den umættede zone. Deaktiveret sprækkesystem (venstre) - aktivt sprækkesystem (højre).

Beskrivelse af afstrømning og stoftransport efter et lineær reservoir princip i den umættede zone er en relativt uprøvet metode, nødvendiggøres opstilling af en række model-essentielle antagelser. For UZ-Modellen opstilles nødvendige antagelser for vand- og stoftransporten således den konceptuelle model oversættes og konkretiseres. Det antages for vandtransporten at;

- der udelukkende forekommer 1-dimensionselle vertikale strømninger.
- grundvandsspejlet er stationært og uafhængigt af bidraget fra UZ-Modellen.
- vandhastigheden som afstrømning fra et reservoir foregår udelukkende ved advektion på baggrund af vandstanden i mobile pore.

- der kan differentieres mellem geologisk forskellige reservoir ved indførsel af effektiv porøsitet, samt en ledningsevneparameter.
- der regnes en vandhastighed og vandstand i de mobile pore for hvert reservoir pr. geologisk lag.
- når vandstanden i et kalkreservoir opnår en fastsat fyldningsgrad ledes vandet direkte til det underliggende reservoir for at tage forbehold for sprækketransport i kalken.

Det antages for stoftransporten at;

- nitratudvaskningen som input kan beskrives arealanvendelsesafhængig og afgrænses til by, natur og landbrugsarealer i form af en tilhørende typekurve.
- det landsdækkende kvælstofoverskud kan omregnes til en nitrathistorik for landbrug ved tabelopslag.
- hvert reservoir vil til enhver tid regnes fuldt opblandet, hvortil den forekommende numeriske dispersion er acceptabel for den umættede zone.
- stoftilbageholdelse medtages ved skalering af porøsitet.

Efter fastlæggelse af antagelserne for vand- og stoftransporten udfærdiges en redegørelse for formuleringen af UZ-Modellen.

6.4.1 Vandtransport i den umættede zone

Da vandtransporten er baseres på kontinuitetsprincippet, kan der ikke opstå eller forsvinde vand i modellen. Vandtransporten modelleres af to indbyrdes afhængige udtryk, hvor det ene er vandhastigheden som afstrømning fra et reservoir og vandstanden i reservoiret. Hvis vandhastigheden til reservoiret er større end vandhastigheden fra reservoiret, vil vandstanden stige, og vise versa. Dette vil modelleres som hhv. stigende og aftagende vandstand. Hvis vandhastigheden til og fra reservoiret er af samme størrelse, vil der ikke forekomme magasinering eller udtømning. Vandstanden er beregnet ved formel (6.1).

$$h(t+1)_n = \left(\frac{q(t)_{n-1} - q(t)_n}{\theta_{eff,g}} \right) \cdot dt + h(t)_n \tag{6.1}$$

hvor:

h_n	Vandstand i reservoir n	[m]
q_n	Vandhastighed fra reservoir n	$[\mathrm{m} \cdot \mathrm{d}^{-1}]$
$\theta_{eff,g}$	Effektiv porøsitet for geologisk klassificering	$[\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{m}^{-3}]$
dt	Tidsskridt	[d]
n	Reservoir nummer	$[-]$
t	Tid	[d]

Betragtes formel (6.1) bemærkes det, hvordan en forskel i vandstand for et reservoiret er styret af ændringen i vandhastighed. Vandstandsændringen udregnes på baggrund af vandhastigheder fra det forrige tidsskridt. Den reelle vandstand beregnes så ved at addere vandstanden fra det forrige tidsskridt med ændringen i vandstand. Det bemærkes ligeledes, hvordan der udelukkende regnes på vandstand i de mobile pore ved at tage højde for at vandstandsændringen udelukkende kan forekomme i den effektivt porøse del af reservoiret. Den effektive porøsitet varierer afhængig af geologisk klassificering. Den immobile vandmængde negligeres, da denne i nærværende opsætning ikke har betydning for vandtransporten.

Formel (6.2) angiver udtrykket for, hvorledes vandhastigheden fra et reservoir beregnes.

$$q(t)_n = \frac{c(h(t)_n)}{L_n} \cdot h(t)_n \tag{6.2}$$

hvor:

q_n	Vandhastighed fra reservoir n	$[\mathrm{m} \cdot \mathrm{d}^{-1}]$
c	Ledningsevneparameter	$[\mathrm{m} \cdot \mathrm{d}^{-1}]$
h_n	Vandstand i reservoir n	[m]
L_n	Tykkelse af reservoir n	[m]
n	Reservoir	$[-]$
t	Tid	[d]

Som formel (6.2) viser, er vandhastigheden fra et reservoir afhængig af en ledningsevneparameteren, vandstanden og tykkelsen af reservoiret. Tykkelsen af et reservoirer angiver den afstand, hvormed vandet skal transporteres i det enkelte reservoir. Herved tages der forbehold for, at vandet skal transporteres afhængigt af den geologiske model og dertilhørende vertikal diskretisering. Der vil altså forekomme en udjævning af fluktuationer i vandhastigheden afhængigt af reservoirtykkelse. I praksis er det forventeligt, at des større afstand til grundvandsspejlet, des mere udjævning af infiltrationen.
Da det forudsættes at modellens skal være i stand til at modellere forskellige geologiske klassificeringer, er det nødvendigt, at indføre et udtryk for en geologisk afhængig egenskab for vandtransport. Det vurderes at implementering af en eksponentielt voksende ledningsevneparameter ved stigende vandstand afspejler de reelle fysiske forhold med større tilfredsstillelse sammenlignet med en konstant. Derved opsættes et udtryk for en ledningsevneparameter som funktion af vandstand, der beskrives ved formel 6.3.

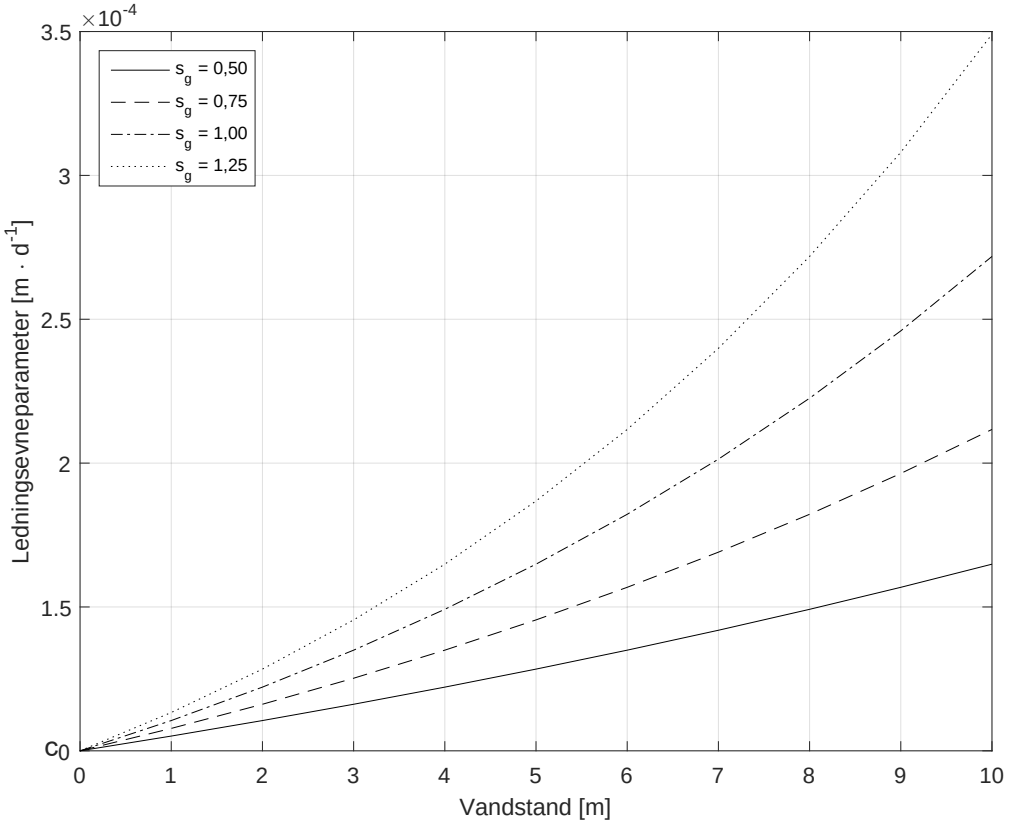
$$c(h(t)_n) = c_0 \cdot e^{\left(s_g \cdot \left(\frac{h(t)_n}{L_n}\right)\right)} \tag{6.3}$$

hvor:

c	ledningsevneparameter	$[\mathrm{m} \cdot \mathrm{d}^{-1}]$
c_0	ledningsevneparameter ved h=0 for reservoir n	$[\mathrm{m} \cdot \mathrm{d}^{-1}]$
s_g	Stejlhedsparameter for geologisk lag	$[-]$
h_n	Vandstand i reservoir n	[m]
L_n	Tykkelse af reservoir n	[m]
n	Reservoir	$[-]$
t	Tid	[d]

Af formel (6.3) bemærkes, at ledningsevneparameteren beskrives ved et eksponentielt udtryk afhængig af forholdet mellem vandstanden og reservoirtykkelsen, samt en geologisk stejlhedsparameter. Forholdet mellem vandstanden og reservoirtykkelsen angiver en vandmætningsgrad, som et udtryk for hvor stor en andel af de mobile pore, som er vandmættede. Sammenholdes dette med indførelsen af stejlhedsparameteren i udtrykket for, c, tages der forbehold for den stigende vandtransport ved øget vandmætningsgrad. Hertil er stejlhedsparameteren styrende for i hvilken grad ledningsevneparameteren er ekponentielt voksende ved stigende vandmætningsgrad.

Det bemærkes ligeledes af formel (6.3) at der indføres en ledningsevneparameter til beskrivelse af vandhastigheden, når reservoireret udtømmes. Ved en vandstand gående mod nul vil ledningsevneparameteren være styrende for vandhastigheden. Det vurderes at ledningsevneparameteren ved $h = 0$ ikke vil være geologisk afhængig, da vandhastigheden forventes at gå mod 0 når vandstanden aftager uanset geologisk klassificering. Udtrykket for ledningsevneparameteren er ikke direkte fysisk omsættelig, hvorfor opslagsværdier ikke kan anvendes, men i stedet skal undersøges statistisk. Figur 6.4 illustrerer en principiel beskrivelse af ledningsevneparameteren som funktion af stigende vandstand og stejlhedsparameter.



Figur 6.4. Principskitse af ledningsevneparameteren som funktion af stejlhedsparameter og vandstand.

Det illustreres på figur 6.4, hvorledes stejlhedsparameteren er styrende for ledningsevneparameteren vækstrate ved stigende vandmætningsgrad. Det bemærkes ligeledes at ledningsevneparameteren ved $h = 0$ angiver skæringspunkt med den vertikale akse for ledningsevneparameteren. En relativt høj stejlhedsparameter vil repræsentere en geologisk klassificering med bedre evne til at transportere vand sammenlignet med en lavere stejlhedsparameter. Med en stejlhedsparamter på $s = 0$ vil det eksponentielle udtryk for ledningsevneparameteren i formel (6.3) være lig med ledningsevneparameteren ved $h = 0$. Når $s = 0$ vil der derfor være lineær proportionalitet mellem vandstanden og vandhastigheden i et reservoir.

Da UZ-Modellen er baseret på det fysiske princip for vandbalance er det essentielt at undersøge om der i vandtransporten i den umættede zone forekommer kontinuitet imellem mængden af infiltrerende vand og mængden af grundvandsdannende vand. Således er der vandbalance mellem hvad der tilføres og forlader UZ-Modellen over en lang tidshorisont. Undersøgelsen er dokumenteret i appendiks B.1.1 på side A9, hvor det findes at vandbalancen er opretholdt, hvorfor kontinuitetsbetragtningen er gældende. Da der således er opsat en model til beskrivelse af vandtransport for et enkeltporøst medium i den umættede zone efter gældende principper implementeres den dobbeltporøse struktur i kalk, for at tilgodese de afvigende strømningsforhold.

Implementering af dobbeltporøsitet

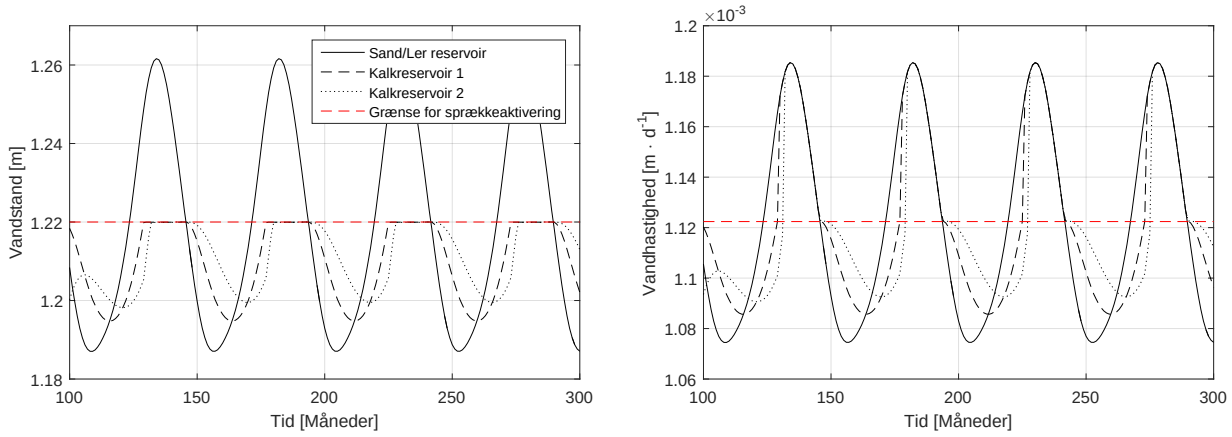
Som beskrevet under antagelser for vandtransporten, foretages en korrigering af vandhastigheden i det dobbeltporøse medium, når et kalkreservoir er vandmættet i en tilstrækkelig grad. Det forventes, at der ved højintense regnhændelser vil forekomme en aktivering af sprækker til vandtransport. Dette hvis afstanden til terræn er tilstrækkelig minimal til at medvirke at selve afstrømningen ikke bliver udjævnet inden vandet når det dobbeltporøse medie. Der modelleres udelukkende dobbeltporøst i kalk. En principskitse af, hvordan der tages forbehold for korrigeringen af vandhastigheden i UZ-Modellen er illustreret på figur 6.4.

Som vist i figur 6.4 indføres en fyldningsgrad, f, for det dobbeltporøse medie. Fyldningsgraden er en konstant, som angiver den andel af den fulde reservoirtykkelse, der skal være vandmættet, før sprækkestrømningen træder i kraft. Implementeringen af dobbeltporøsitet træder således i kraft når understående kriterie er opfyldt. Vandhastigheden korrigeres;

- **hvis** vandstanden er større end en fastlagt fyldningsgrad af tykkelsen af kalkreservoiret
  ellers modelleres udelukkende matricestrømning jf. formel (6.2)

Når kriteriet træder i kraft, vil vandhastigheden fra kalkreservoiret blive lig med vandhastigheden fra det overliggende reservoir. Vandet transporteres ved matricestrømning fra det overliggende reservoir fra et enkeltporøst medium og videreføres ved sprækkestrømning, til det underliggende reservoir eller grundvandet, som vist på figur 6.4.

Det må forventes at sprækkerne kun er aktive så længe den tilførte vandhastighed er tilstrækkelig høj. Korrigeringen af vandhastighed vil således vare indtil det opsatte kriterie ikke længere er opfyldt. Herefter modelleres vandhastigheden igen som ren matricestrømning. Det allerede opsatte kriterie vil medvirke, at når vandhastigheden til kalkreservoiret er mindre end vandshastigheden fra reservoiret så vil sprækkerne deaktiveres. Ved det opstillede kriterie muliggøres det at modellere en dynamisk sprækkeaktivering- og deaktivering som følge af varierende infiltration. Et eksempel på dynamisk korrigering af vandhastighed som følge af sprækkeaktivering findes på figur 6.5.



Figur 6.5. Eksempel på dynamisk korrigering af vandshastighed som følge af vandstand større end fyldningsgrad. Eksemplet viser en umættet zone bestående af et enkeltporøst reservoir som buffer, samt to underliggende kalkreservoir. Kriteriet for vandstanden (venstre) og korrigering af vandhastighed ved sprækkeaktivering (højre). Signaturforklaring er tilhørende begge illustrationer.

Det bemærkes af figur 6.5, hvorledes kriteriet for fyldningsgrad for sprækkeaktivering medfører en forøget vandhastighed. Det bemærkes ligeledes, hvordan vandstanden er konstant, så længe kriteriet er gældende, hvilket skyldes at vandhastighed til reservoiret er lig vandhastigheden ud. Fastlæggelse af fyldningsgraden og den resterende parameterisering er afgørende for, hvor ofte sprækkedomænet aktiveres

i det dobbeltporøse medie. Fyldningsgraden er derfor også fordelagtig at inddrage i en stokastisk analyse. Det forventes ikke at UZ-Modellen kan beskrive pludselige ændringer i koncentration, men udelukkende ændringer over en længerevarende tidshorisont, hvorfor en tidsskala for en erfaringsmæssig sprækketransport ikke kan overholdes. Korrigeringen vurderes acceptabel til beskrivelse af en samlet nitrattransport i både matrice- og sprækkedomæne på årsbasis.
Da der er opsat en model for transporten af vand i både enkelt- og dobbeltporøse medier er det muligt at implementere en model til beskrivelse af stoftransport hertil. I det følgende afsnit vil opsætningen af stoftransporten for UZ-Modellen blive gennemgået.

6.4.2 Stoftransport i den umættede zone

For UZ-Modellen baseres stoftransport af nitrat i den umættede zone på den opstillede vandtransport. Derfor kan stoftransporten betragtes som et tillagt modul, hvor stoffet følger vandets dynamik. Stoftransporten baseres som nævnt på kontinuitetsprincippet, hvorved der ikke kunstigt kan opstå eller forsvinde nitrat efter tilførsel. Stoftransporten i UZ-Modellen beregnes af formel (6.4).

$$C(t+1)_n = \left(\frac{C(t)_n \cdot h(t)_n \cdot \theta_g + (q(t)_{n-1} \cdot C(t)_{n-1} - q(t)_n \cdot C(t)_n) \cdot dt}{h(t+1)_n \cdot \theta_g} \right) \tag{6.4}$$

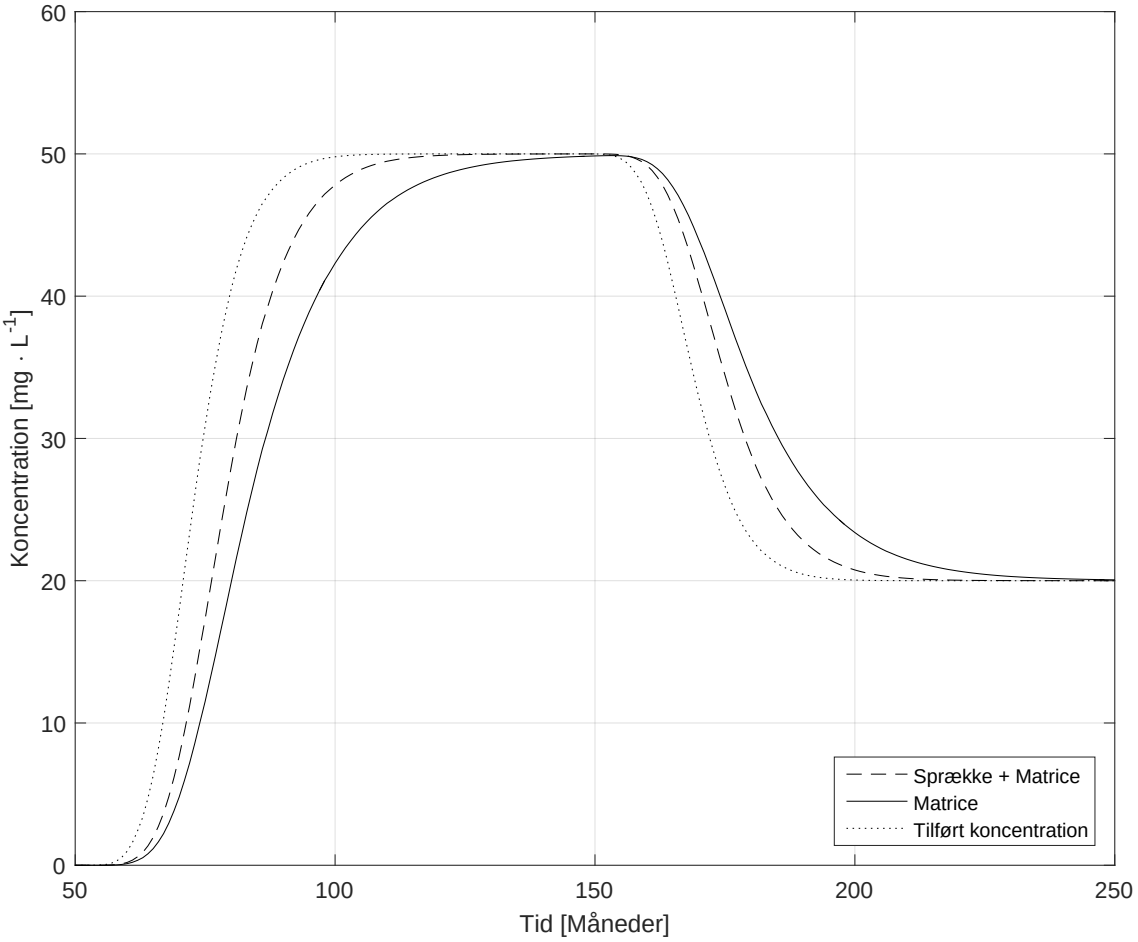
hvor:

C_n	Nitratkoncentration i reservoir n	$[\mathrm{mg \cdot L^{-1}}]$
h_n	Vandstand i reservoir n	[m]
q_n	Vandhastighed fra reservoir n	$[\mathrm{m \cdot d^{-1}}]$
θ_g	Total porøsitet for geologisk lag	$[\mathrm{m^3 \cdot m^{-3}}]$
dt	Tidsskridt	[d]
n	Reservoir	$[-]$
t	Tid	[d]

Som vist i formel (6.4) er stoftransporten afhængig af vandhastigheden, vandstanden og den totale porøsitet. Den totale porøsitet indføres således, der kan tages højde for tilbageholdelse af nitrat som beskrevet i kapitel 5 på side 27. Det vurderes realistisk at stoftilbageholdelsen vil variere fra effektiv til total porøsitet, principielt svarende til ingen til fuld tilbageholdelse. En sådan grov skitsering af tilbageholdelse kræver undersøgelse af parameterusikkerhed.
Det bemærkes ligeledes, hvordan formlen er et udtryk for ændring i massetilførsel, som fuldt opblandes i en ændret vandstand pr. tidsenhed. På den måde beregnes en samlet koncentration i hvert reservoir på baggrund af vand- og stoftilførsel til og fra de enkelte reservoir. Dette vil medføre at stoffet spredes numerisk ved tilførsel, da stoffet ikke kan spores gennem hvert reservoir internt.

For stoftransporten er det essentielt at analysere om massebevarelsen, igennem den umættede zone for UZ-Modellen, er i overensstemmelse med kontinuitetsbetragtningen. Analyserne forefindes i appendiks B.1.2 på side A10.
Det forventes, at der ikke forekommer koncentrationer højere end den tilførte koncentration til den umættede zone. Dette er i analysen bekræftet. Derudover undersøges afstanden til grundvandspejlets betydning for koncentrationsforløbet af nitrat i UZ-Modellen. Ved en relativ lav afstand til grundvandspejlet er tiden før at UZ-Modellen indstilles på den tilførte nitratkoncentration, markant lavere end ved en relativ stor afstand til grundvandspejlet. Det samme er tilfældet ved et stop i tilførslen af nitrat som input til UZ-Modellen. Den relative lave afstand til grundvandspejlet vil respondere hurtigere ved et tilførselsstop af nitrat sammenlignet med større afstand til grundvandsspejlet.

En anden og højest relevant undersøgelse er, hvorledes implementeringen af dobbeltporøsitet påvirker nitratkoncentrationen sammenlignet med et enkeltporøst medium. Følgende figur 6.6 illustrerer, hvorledes dobbeltporøsitet påvirker koncentrationen af nitrat.



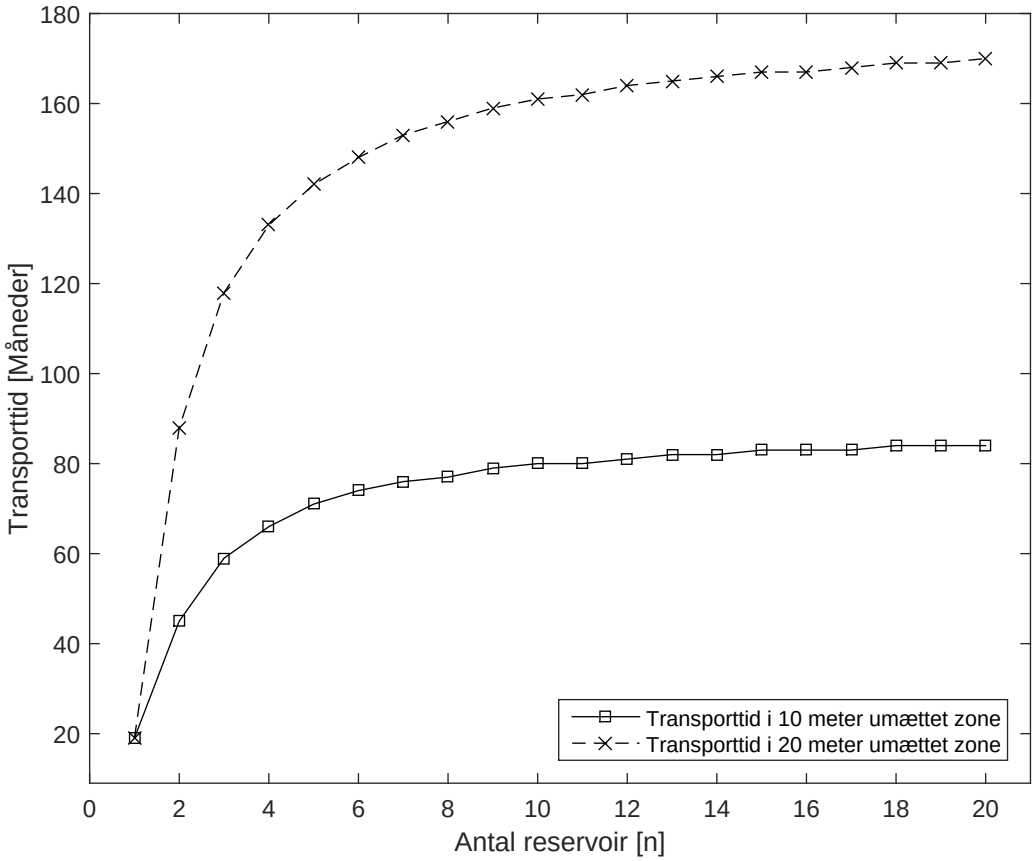
Figur 6.6. Påvirkning af koncentration ved indførsel af dobbeltporøsitet. Illustrationen viser påvirkningen i ét kalkreservoir. Den stiplede linje illustrerer et tilfælde, hvor sprækker og matrice konstant er aktiverede. Den tilførte koncentration er udgjort af et opsat buffer-reservoir beliggende over det dobbeltporøse medium.

Det bemærkes, af figur 6.6, hvordan koncentrationen stiger og aftager med en større rate, når der indføres dobbeltporøsitet i form af tillagt sprækkestrømning. Det skal ligeledes bemærkes at koncentrationen aldrig kan overstige den tilførte koncentration, hvilken i dette tilfælde udgøres af en bufferzone. Forskellen mellem den dobbelt- og enkeltporøse model kan udelukkende tilskrives aktiveringen af sprækkerne ved vandstand over fyldningsgraden. Når fyldningsgraden er overskredet og vandstanden i reservoiret stabiliseres, vil der forekomme en øget gennemskylning, hvilket vil betyde hurtigere tilnærmelse af koncentrationen i det ovenliggende reservoir.
Eksempelvis vil der ved arealomlægning ved terræn medføre en hurtigere respons i kalklaget, grundet en øget gennemskylning ved korrigering af vandhastighed. Ved korrigeringen føres selve nitratkoncentrationen ikke direkte videre til det underliggende lag. korrigeringen er udelukkende en øget gennemskylning som følge af for høj vandstand, hvilket oversættes direkte som et sprækkesystem, der aflaster indtil vandstanden er under det fastsatte kriterie. På baggrund af opsætningen af UZ-Modellen forventes det ikke at kunne simulere abrupte ændringer i udvaskningen, da nitraten først skal opblandes i hvert enkelt reservoir, før udledning til grundvandet. Det vurderes ikke til ulempe i forbindelse med simulering af gennembrudskurver med årsbaseret nitratudvaskning som input.

Opsætningen af UZ-Modellen er således gennemgået. Det er nu klarlagt, hvordan vand- og stoftransporten i UZ-Modellen beregnes, og hvordan vandhastigheden i et dobbeltporøst medium korrigeres. Det er imidlertid ikke klarlagt, hvorledes modellens vertikale diskretisering påvirker vand- og stoftransporten, hvorfor en undersøgelse af dette vil udarbejdes i det følgende afsnit.

6.4.3 Revurdering af den vertikale diskretisering

Den vertikale diskretisering er tidligere i afsnit 6.3 beskrevet, hvor det blev fastlagt at hvert geologisk lag beskrives af ét reservoir, der minimum har en tykkelse på 0,5 m. Derudover varierer antallet af reservoir for hver beregningscelle. Det undersøges i den følgende strukturelle analyse om denne variation, i antallet af reservoirs, har en betydning for transporttiden af nitrat igennem den umættede zone.
Analysen foretages for to forskellige tykkelser af den umættede zone der fastholdes på hhv. 10 og 20 m. Hver beregningscelle inddeles fra 1 til 20 reservoirs til at beskrive transporttiden af nitrat. Som input anvendes en konstant infiltration, og et enhedsinput for nitrat. Transporttiden regnes fra enhedsinput i øverste reservoir til at massemidtpunktet for outputtet registreres ved nederste reservoir. Dette giver herved en transporttid for nitrat. En nærmere beskrivelse af beregningen af transporttid er vist i appendiks B.2 på side A12. Figur 6.7 viser resultaterne for analysen.



Figur 6.7. To scenarier med en fastholdt tykkelse i den umættede zone på hhv. 10 og 20 m. Antallet af reservoirs, for begge scenarier, varieres fra 1 til 20 reservoir for den vertikale diskretisering.

Det bemærkes på figur 6.7, at der ved scenarieret på 10 m tykkelse tilnærmelsesvis forekommer et plateau i transporten ved 10 reservoir som vertikal diskretisering. Sammenlignes der med scenariet ved en tykkelse på 20 m forekommer ikke den samme tendens som ved 10 reservoirs, da transporttiden for nitrat stadig er stigende. Det bemærkes at der for hvert ekstra tilføjet reservoir stadig sker en ændring i transporttiden ved en samlet tykkelse på 20 m. På baggrund af denne analyse kan det tilstrækkelige antal af reservoirs til vertikal diskretisering af den umættede zone ikke fastlægges.

Det kan derfor konkluderes, at det er nødvendigt at anvende det samme antal reservoirs for hver beregningscelle, til at beskrive den umættede zone, for at kompensere for ændringen i transporttiden, da analysen viser at transporttiden for nitrat er afhængig af det anvendte antal reservoir.
Det fastlægges derfor, at anvende 11 reservoirs til at beskrive den geologiske model i Sydvest-området for hver beregningscelle, således der anvendes det samme antal reservoir i den umættede zone i modelområdet. Det bestræbes således også, at holde antallet af reservoirs i UZ-Modellen på et minimum da beregningstiden for en modelsimulering er afhængig af antallet af reservoir, hvilket er essentielt da der anvendes en stokastisk modelleringstilgang. I beregningsceller, hvor der ikke forekommer 11 geologiske lag, indlæggelse ét reservoir, for hvert manglende geologiske lag med en minimumstykkelse på 0,5 m.
Figur 6.7 indikerer yderligere, at der forekommer linearitet mellem tykkelsen af den umættede zone og transporttiden for nitrat igennem den umættede zone. Ved en betragtning af figur 6.7 bemærkes det, at transporttiden fordobles, når tykkelsen af den umættede zone fordobles fra 10 til 20 m. Der foretages en yderligere analyse af linearitet mellem transporten og den umættede zone, som er dokumenteret i appendiks B.2 på side A12. Analysen bekræfter tendensen på figur 6.7, og det vurderes acceptabelt at transporttiden for nitrat i den umættede zone stiger lineært med tykkelsen af den umættede zone. En gennemgående opsætning af UZ-Modellen er foretaget, hvorfor det følgende afsnit vil beskrive modelinput inden anvendelse.

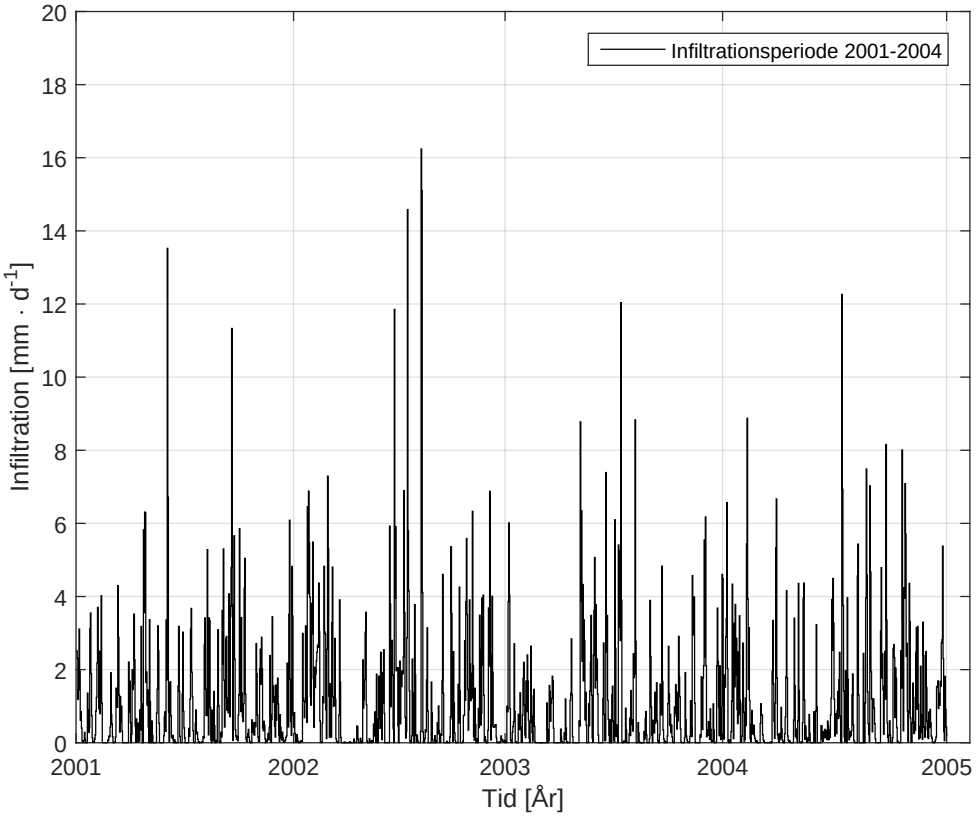
6.5 Modelinput

Modelinputs til UZ-Modellen udgøres udelukkede af infiltrationen fra rodzonen, I, til den umættede zone, samt udvaskningshistorikken af nitrat, C_0 , fra forskellige arealtyper. Fastlæggelsen af, hvordan disse inputs skal anvendes vurderes særdeles betydningsfuld for modellens output. Følgende afsnit omhandler fastlægge af inputs til UZ-Modellen.

6.5.1 Infiltration

Infiltrationen er styrende for transporten af nitrat, da nitraten vil følge det infiltrerende vand gennem den umættede zone til grundvandet. Hvis afstanden, fra terræn til grundvandsspejlet, er relativ stor vil fluktuationer i infiltrationen minimimeres, grundet afstanden fra terræn til grundvandsspejl. Omvendt i områder, hvor afstanden til den mættede zone er relativ lav, vil fluktuationerne i infiltrationen have en større effekt på vandtransporten, fordi der ikke forekommer en udjævning af infiltrationen. Vandstanden i hvert reservoir varierer afhængig af fluktuationerne i infiltrationen for den tilstedeværende geologi.
Ved en konstant infiltration vil vandstanden efter stabilisering være konstant for samtlige reservoirs. Herved umuliggøres modellering af dynamisk korrigering af sprækkestrømninger i det dobbeltporøse medium, da kriteriet for aktiveringen og deaktiveringen af sprækkestrømninger afhænger af den varierende vandstand. Derfor vil sprækkestrømningen ved en konstant infiltration, enten være aktiveret eller deaktiveret for hele simuleringsperioden. Dette danner grundlag for, at anvende fluktuerende infiltration på dagsbasis, således det er muligt at tage højde for strømningsforhold i det dobbeltporøse medium.

Udvælgelsen af en fluktuerende infiltration, der er repræsentativ for Sydvest-området, er foretaget på baggrund af en analyse, som dokumenteret i appendiks B.3.1 på side A14. Indledningsvis betragtes en massebalance, hvor infiltrationen beregnes ved at subtrahere evaporation og transpiration fra bruttonedbøren. Til beregning af infiltrationen foreligger en dataperiode på 22 år med resultater på dagsbasis, hvoraf der af denne periode udvælges en 4 års infiltrationsperiode i samme opløsning. Den udvalgte periode kan gentages et vilkårligt antal gange. Den udvalgte infiltrationsperiode er illustreret på figur 6.8, og anvendes i UZ-Modellen. Infiltrationen illustreret på figuren er en gennemsnitslig daglig infiltration for Sydvest-området. Infiltrationsperioden strækkes fra d. 01-01-2001 til d. 31-12-2004.



Figur 6.8. Den gennemsnitslige daglige infiltration til den umættede zone for Sydvest-området i perioden fra d. 01-01-2001 til d. 31-12-2004.

Figur 6.8 illustrerer fluktuationerne i den daglige infiltration, der som tidligere nævnt, har en betydning for aktiveringen og deaktiveringen af de dobbeltporøse medium for kalklagene i UZ-Modellen. Den gennemsnitslige årlige infiltration til de umættede zone, for den udvalgte perioden, er $400\,\mathrm{mm}\cdot\mathrm{år}^{-1}$. Denne årlige infiltration er større end den forventede infiltration på omkring 250-300 $\mathrm{mm}\cdot\mathrm{år}^{-1}$, svarende til nettonedbøren for den geografiske beliggenhed af Sydvest-området, jf. Scharling og Kern-Hansen [2002]. Dette vil potentielt medføre en forcering af vand gennem den umættede zone, hvorfor der implementeres dræn i hele Sydvest-området.

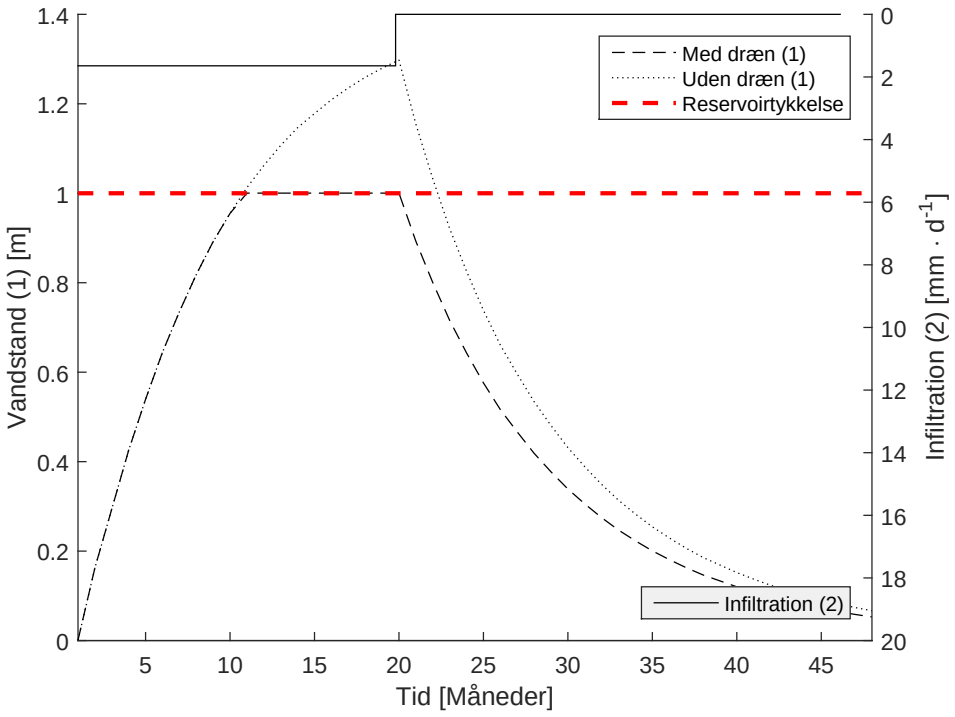
Implementering af dræn

Som implementering af dræn foretages der for UZ-Modellen en dynamisk korrigering af vandstand for at reducere den beregnede infiltration. Formålet med korrigeringen af infiltrationen er at sikre, at der ikke kunstigt tvinges vand gennem den umættede zone. Implementeringen er foretaget i det øverste reservoir, således der tages forbehold for den potentielle forekommende dræning. korrigeringen er baseret på ét kriterie for at træde i kraft, og ét kriterie for at korrigering og drænvirkningen ophører. Understående liste indeholder førnævnte to kriterier som korrigeringen er baseret på, hvor det førstnævnte kriterie slår korrigering til og det andet annullerer korrigeringen.

- **Hvis** vandstanden er større end tykkelsen af det øverste reservoir
- **Hvis** vandhastigheden fra det øverste reservoiret er større end infiltrationen til det samme reservoir

Når det første kriterie er opfyldt, vil infiltrationen til det øverste reservoir blive lig med vandhastigheden fra det underliggende reservoir, hvilket vil medføre en stationær vandstand. korrigeringen af infiltration ophører når infiltrationen til det øverste reservoir er mindre end vandhastigheden fra reservoiret, hvilket medfører at vandstanden i det øverste reservoir vil falde. Drænet virker således at når reservoiret ikke har

kapacitet til at håndtere vandet, så fjernes vandet i dræn. Figur 6.9 viser en principskitse af virkningen af den implementeret dræning af det øverste reservoir, der har en tykkelse på 1 m.



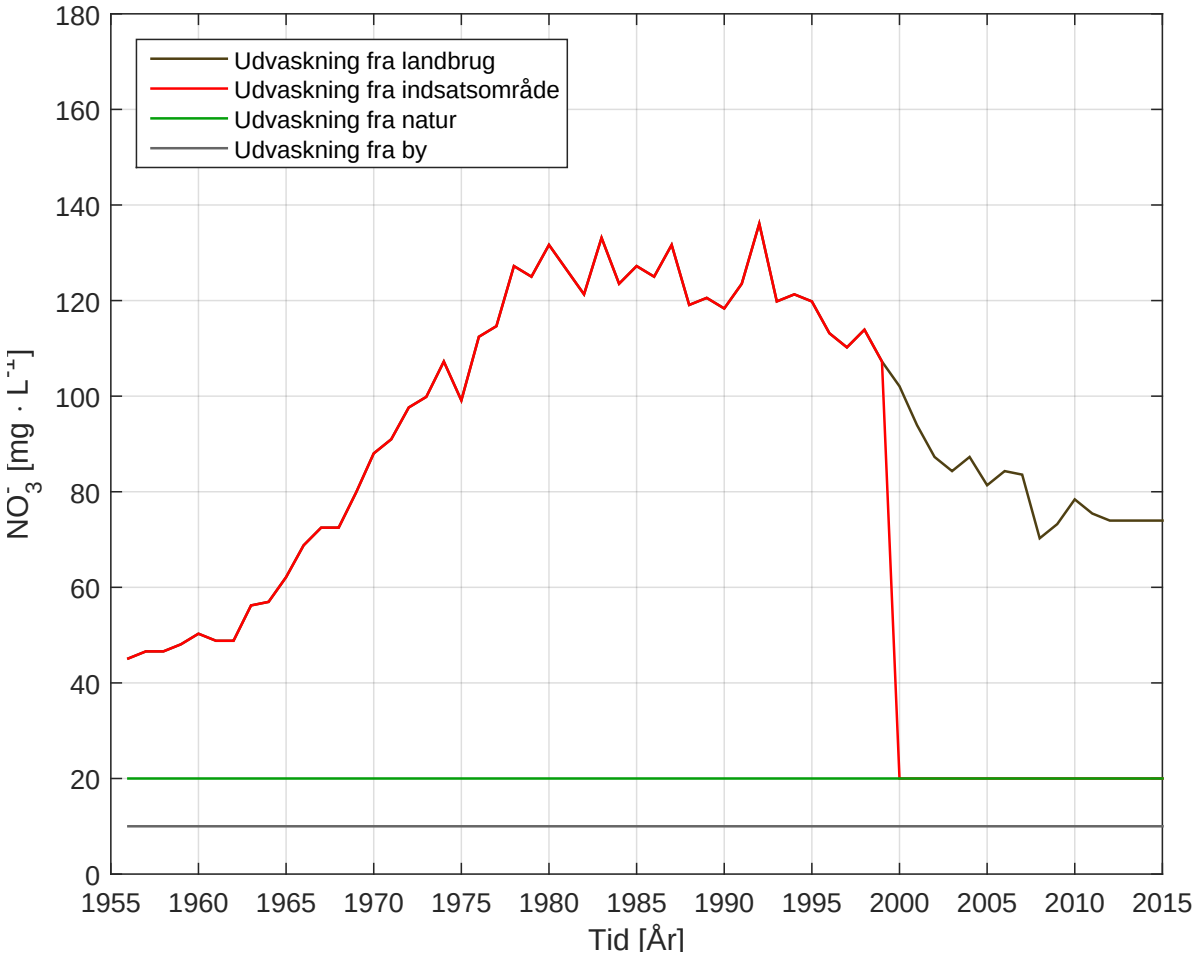
Figur 6.9. Principskitse for korrigering af infiltrationen til den umættede zone. korrigeringen er foretaget i et reservoir med en tykkelse på 1 m, hvortil en konstant infiltration til den umættede zone er anvendt.

Det bemærkes af figur 6.9, hvorledes drænet træder i kraft, når vandstanden overskrider reservoirtykkelsen. Desuden ses det, hvordan korrigeringen ophører når infiltrationen bliver mindre end vandhastigheden fra reservoiret, hvilket er i overensstemmelse med førnævnte kriterier. Den infiltrationsmængde der ikke infiltrere igennem UZ-modellen antages at afspejle, hvad der bliver fjernet ved dræn i rodzonen. Den infiltrationsmængde der bliver drænet fra rodzonen og fjernet fra UZ-Modellen registreres, hvorefter det kontrolleres at der opretholdes en infiltration til den umættede zone på tilnærmelsesvis $300\,\mathrm{mm \cdot år^{-1}}$. Drænkorrigeringen er afhængig af parameteriseringen, hvorfor det i det videre forløb vil blive kontrolleret at de $300\,\mathrm{mm \cdot år^{-1}}$ opretholdes. Infiltrationen til den umættede zone er fastlagt, hvorfor det resterende modelinput i form af nitratudvaskningen beskrives i følgende afsnit.

6.5.2 Nitratudvaskning

Koncentrationen af nitrat er afhængig af størrelsen og mønsteret på udvaskningen af nitrat samt infiltrationen. Nitratudvaskningen estimeres på baggrund af den historiske arealanvendelse for Sydvest-området fra år 1956 til år 2015, hvor der i denne periode differentieres imellem tre typer af arealanvendelse. Til hver arealtype defineres en historisk typekurve for udvaskningen af nitrat. Arealtyperne differentieres til nitratudvaskning for landbrug, by og natur. Natur dækker samlet over skov, eng og mose, og råstofindvinding. Der tages ligeledes højde for eventuelle ændringer i arealanvendelsen for Sydvest-området i form af omlagte områder. Områder, hvor der er foretaget ændringer i arealanvendelsen betegnes som et indsatsområde. Indsatsområder er karakteriseret ved tidligere at have været domineret af dyrket landbrugsarealer, men af nitratbeskyttende årsag er omlagt til natur. Hver beregningscelle i Sydvest-området tildeles således én specifik arealanvendelse med tilhørende typekurve for udvaskning. Typekurven for det landsdækkende kvælstofoverskud oversættes direkte til en nitratkoncentration, således tendensen er ensartet.

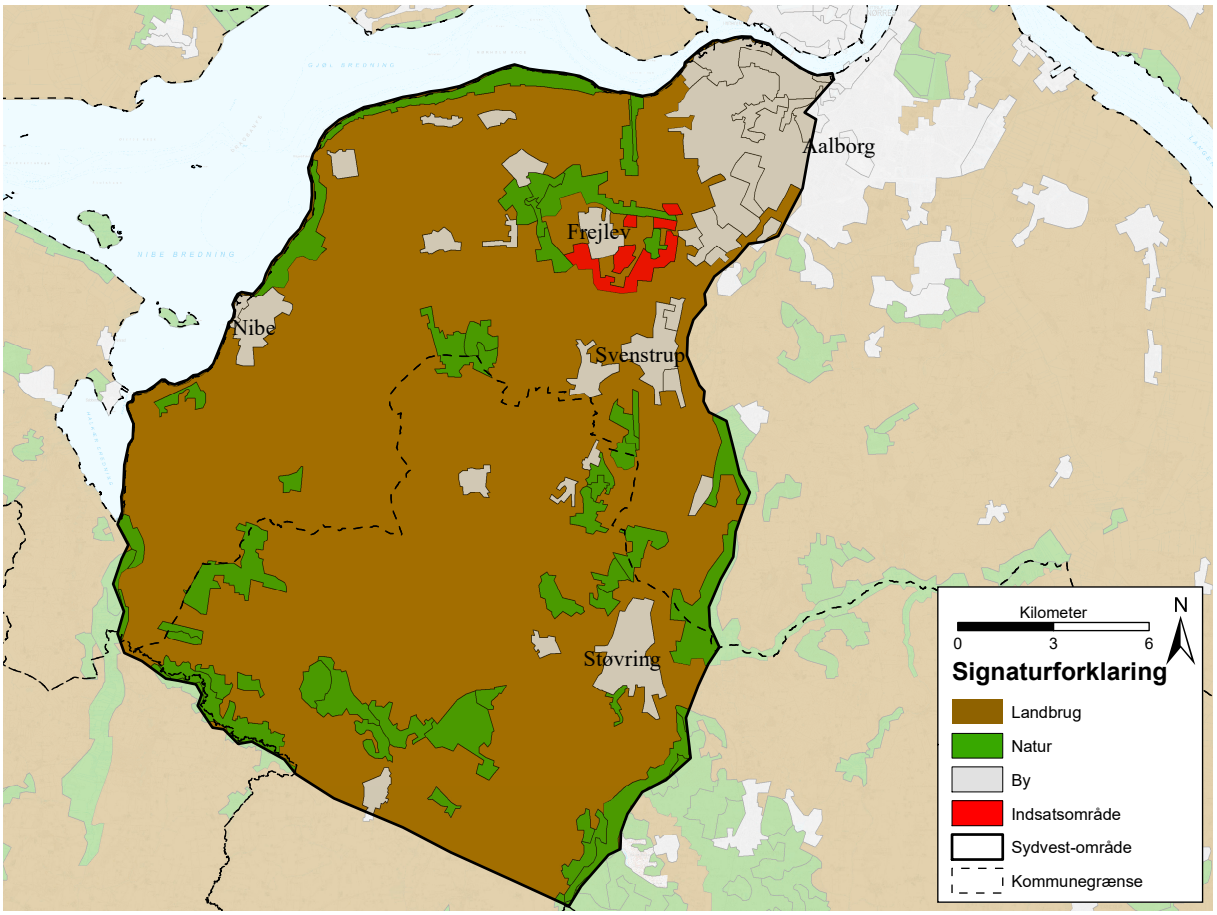
Det vurderes at udviklingen i det landsdækkende kvælstofoverskud er repræsentativt for Sydvest-området. Figur 6.10 viser typekurverne for hver arealanvendelse og angiver størrelsen på nitratudvaskningen for landbrug, by, natur og indsatsområder, der anvendes i Sydvest-området.



Figur 6.10. Nitratudvaskning for landbrug, indsatsområde samt by- og natur fra 1956 til 2015. Nitratudvaskningen for landbrugsarealer fra 1956 til 2005 er baseret på [Kyllingsbæk, 2008], hvor udvaskningen fra 2006 til 2012 er baseret på [Vinther og Olsen, 2014]. Grundet manglede data, antages nitratudvaskningen fra 2012 til 2015 at være konstant.

Det bemærkes af figur 6.10 at nitratudvaskningen fra landbrugsarealer følger tendensen for det landsdækkende kvælstofoverskud, beskrevet i afsnit 3.1 på side 8. For at kunne anvende det landsdækkende kvælstofoverskud beregnes en omregningsfaktor, der gør de tilgængelige data for kvælstofoverskuddet anvendelig for UZ-Modellen. Omregningsfaktoren beregnes ud fra forholdet mellem nitratudvaskningen og kvælstofoverskuddet for år 1986. Jf. Brüsch [1987] blev der for landbrugsarealer i år 1986 maksimalt målt en nitratudvaskning på $125\,\mathrm{mg \cdot L^{-1}}$, og kvælstofoverskuddet, jf. Kyllingsbæk [2008], blev målt til $169\,\mathrm{KgN \cdot ha^{-1}}$, hvilket giver en omregningsfaktor på $0,73$. Omregningsfaktoren anvendes til at skalere det landsdækkende kvælstofoverskud til en nitratkoncentration. Det antages i denne sammenhæng at tendens for nitratkoncentration i udvaskningen vil følge kvælstofoverskuddet. Figur B.12 på side A17 illustrerer omregning fra kvælstofoverskud til nitratudvaskning for landbrugsarealer, hvor omregningsfaktoren på $0,73$ er anvendt. Den anvendte nitratkoncentration fra udvaskning på baggrund af omregningsfaktoren er undersøgt og sammenholdt med en opblanding af kvælstofoverskuddet i infiltrationen. Det er fundet at ca. 60 % af kvælstoffet består af nitrat og at brugen af omregningsfaktor stemmer overens med undersøgelsen af opblandingen på bilags-CD D.4 - *\Beregning af nitratudvaskning\Nitratudvaskning.xlsx*.
Nitratudvaskningen er konstant for by og natur, da det vurderes at historisk årsvariation i udvaskningen er af mindre betydning. Størrelsen på nitratudvaskningen fra natur afhænger af jordtype, vegetation

og geografisk beliggenhed, hvorfor en overslagsværdi på $20\,\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}$ fastlægges [Brüsch, 1987]. Nitratudvaskningen for byområder vurderes at være mindre end naturområder, eftersom at befæstede arealer og begrænsede naturarealer vil reducerer udvaskningen af nitrat. Udvaskningen for by fastlægges derfor til $10\ \mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}$ uden videre undersøgelse. Det er essentielt at tage forbehold for ændringer i arealanvendelse, da forskellen på nitratudvaskningen fra landbrug og natur har en betydning for formen på gennembrudskurven. Indsatsområdet følger nitratudvaskningen for landbrug, men fra og med år 2000 bliver nitratudvaskningen af samme størrelse som natur. På baggrund af en undersøgelse af ortofotos i appendiks B.3.2 på side A15 er startåret for beskyttelsen af grundvandsressourcen i Sydvest-området fastsat til år 2000. Herved ændres nitratudvaskningen fra landbrug til natur, hvis der for området er fortaget ændringer i arealanvendelse i et indsatsområde. Figur 6.11 viser fordelingen af den anvendte arealanvendelse for Sydvest-området, hvor landbrug, by og natur samt et indsatsområdet er illustreret.



Figur 6.11. Arealanvendelsen for Sydvest-området, hvor indsatsområdet er markeret med rødt. Farvekoderne i signaturforklaring er i overensstemmelse med farvekoderne for de præsenterede typekurver på figur 6.10.

Det bemærkes af figur 6.11, hvorledes kun et område omkring Frejlev defineres som indsatsområde. Fastlæggelsen af nitratudvaskning i Sydvest-området er beskrevet. Dette sammen med den horisontale og vertikale diskretisering, fastlæggelsen af infiltrationen og den endelig opsætning af UZ-Modellen, gør det muligt at foretage en stokastisk undersøgelse af nitrattransporten i den umættede zone. Der vil i det følgende afsnit opsættes et parameterinterval på baggrund af forventede transporthastigheder.

6.6 Præliminær parameteranalyse

Da der er opsat et udtryk for transporthastigheden i appendiks 6.4 på side 35 for den umættede zone, er det essentielt, at undersøge om det er muligt, med tilgængelige parametre, at opsætte et forventeligt interval for transporthastigheden af nitrat i UZ-Modellen. Formålet er at fastlægge et konfidensinterval for transporthastigheden i de tre medier, således størrelsesordenen for hastigheden er klarlagt for den umættede zone.
Fastlæggelse af en præcist beskrevet transporthastighed er forbundet med stor usikkerhed, hvilket er nødvendigt at tage forbehold for. Særligt tilbageholdelsen af nitrat i den umættede zone vurderes usikker, hvor relativt store spænd for den totale porøsitet vurderes nødvendigt. Stejlhedsparameteren, som er en ikke-fysisk parameter, anvendes i grey box tilgangen som tilpasning af transporthastighed, således der ikke simuleres urealistiske transporthastigheder i den umættede zone. Indledningsvis redegøres der for, hvilke transporthastigheder i de tre medier sand, ler og kalk, der antages realistiske.

6.6.1 Forventet transporthastighed

Det er forventeligt, hvis der udelukkende medtages advektiv transport, at der med en nettoinfiltration på $300\,\mathrm{mm}\cdot\mathrm{år}^{-1}$, vil opnås en hastighed på mellem 1-2 $\mathrm{m}\cdot\mathrm{år}^{-1}$. Dette bestemmes ved en simpel betragtning af en gennemsnitlig porevandshastighed med Darcy-flux sat til en årlig middelinfiltration, hvis den effektive porøsitet sættes til mellem 0,15-0,30 $\mathrm{m}^3\cdot\mathrm{m}^{-3}$, jf. formel (6.5).

$$u = \frac{v}{\theta_{eff,1}} = \frac{0,300\ m\cdot år^{-1}}{[0,15;0,3]\ m^3\cdot m^{-3}} = [1;2]\ m\cdot år^{-1} \tag{6.5}$$

hvor:

u	Gennemsnitlig porevandshastighed	$[\mathrm{m}\cdot\mathrm{år}^{-1}]$
v	Darcy flux	$[\mathrm{m}\cdot\mathrm{år}^{-1}]$
$\theta_{eff,1}$	Effektiv porøsitet for sand	$[\mathrm{m}^3\cdot\mathrm{m}^{-3}]$

Denne relativt grove forsimpling, kan formegentlig udelukkende antages gældende for en sandet jordart, hvorfor det er forbundet med usikkerhed at fastlægge en forventet transporttid for ler. Det må vurderes at transporthastigheden af nitrat i ler kan være styret af diffusiv tilbageholdelse og en heterogenitet uden for UZ-Modellens strukturelle egenskaber.

Der foreligger imidlertid en række målinger for hastigheden af stoftransport i den umættede zone for kalk. Der tages udgangspunkt i målinger jf. Eldrup og Bonnerup [2014] hvor der måles stoftransporthastigheder i en intakt kalkblok i størrelsesordenen $0,5\,\mathrm{m}\cdot\mathrm{år}^{-1}$. Jf. Mathias et al. [2006] er en gennemsnitlig transporthastighed ca. $0,8\,\mathrm{m}\cdot\mathrm{år}^{-1}$ i kalken. Fastlæggelse af en præcis tilbageholdelse af nitrat i kalk på regional skala er forbundet med relativt stor usikkerhed, sammenlignet med en kalkblok. Da det er forbundet med usikkerhed at fastlægge et forventeligt interval for transporthastighed i sand, ler og kalk på baggrund af en usikker tilbageholdelse opsættes ekstremer i følgende afsnit.

6.6.2 Fastlæggelse af spænd for fysiske parametre

UZ-Modellen er som nævnt baseret på to fysiske parametre effektiv porøsitet, $\theta_{eff,g}$ og total porøsitet, θ_g. Det er muligt at fastsætte realistiske parameterspænd for en forventelig effektiv og total porøsitet i hhv. sand, ler og kalk. Det skal bemærkes, at den totale porøsitet anvendes som tilbageholdelse. Dette gøres, da der beregnes fuld opblanding i hvert reservoir i et vandvolumen bestemt af den totale porøsitet. Da

tilbageholdelsen som nævnt er særligt usikker, sættes spændet for totalporøsitet fra ingen tilbageholdelse, svarende til effektiv porøsitet, til fuld tilbageholdelse ved total porøsitet. Spændet for hhv. effektiv- og total porøsitet er vist i tabel 6.1.

Tabel 6.1. Min- og maksimum værdier for effektiv og total porøsitet.* Total porøsitet anvendes som tilbageholdelse fra ingen tilbageholdelse ved effektiv porøsitet til fuld tilbageholdelse ved maksimal totalporøsitet. [Lorens Hansen, 1976][Spitz og Moreno, 1996]

			(1) Sand [min ; max]	**(2) Ler** [min ; max]	**(3) Kalk** [min ; max]
Effektiv porøsitet	θ_{eff}	$[m^3 \cdot m^{-3}]$	[0,15 ; 0,30]	[0,05 ; 0,15]	[0,04 ; 0,10]
Total porøsitet*	θ	$[m^3 \cdot m^{-3}]$	[0,15 ; 0,45]	[0,05 ; 0,45]	[0,04 ; 0,45]

Da værdierne er baseret på tabelopslag, med variabel beregningsmetode, vælges det at fastsætte relativt grove spænd for den effektive porøsitet, som vist i tabel 6.1. I praksis er det forventeligt at dybde fra terræn vil medføre en påvirkning på den effektive porøsitet som følge af kompakthed. Højintense regnhændelser vil kunne medføre en stigende totalporøsitet for terrænnære kalklag, som følge af erosion. Det vurderes, at de opstillede parameterspænd kan afdække den strukturelle usikkerhed, da UZ-Modellen ikke kan tage højde for en sådan heterogenitet. Da grænseværdier således er fastlagt for den effektive- og totale porøsitet er det muligt, at opsætte en stokastisk analyse af transporthastigheder.

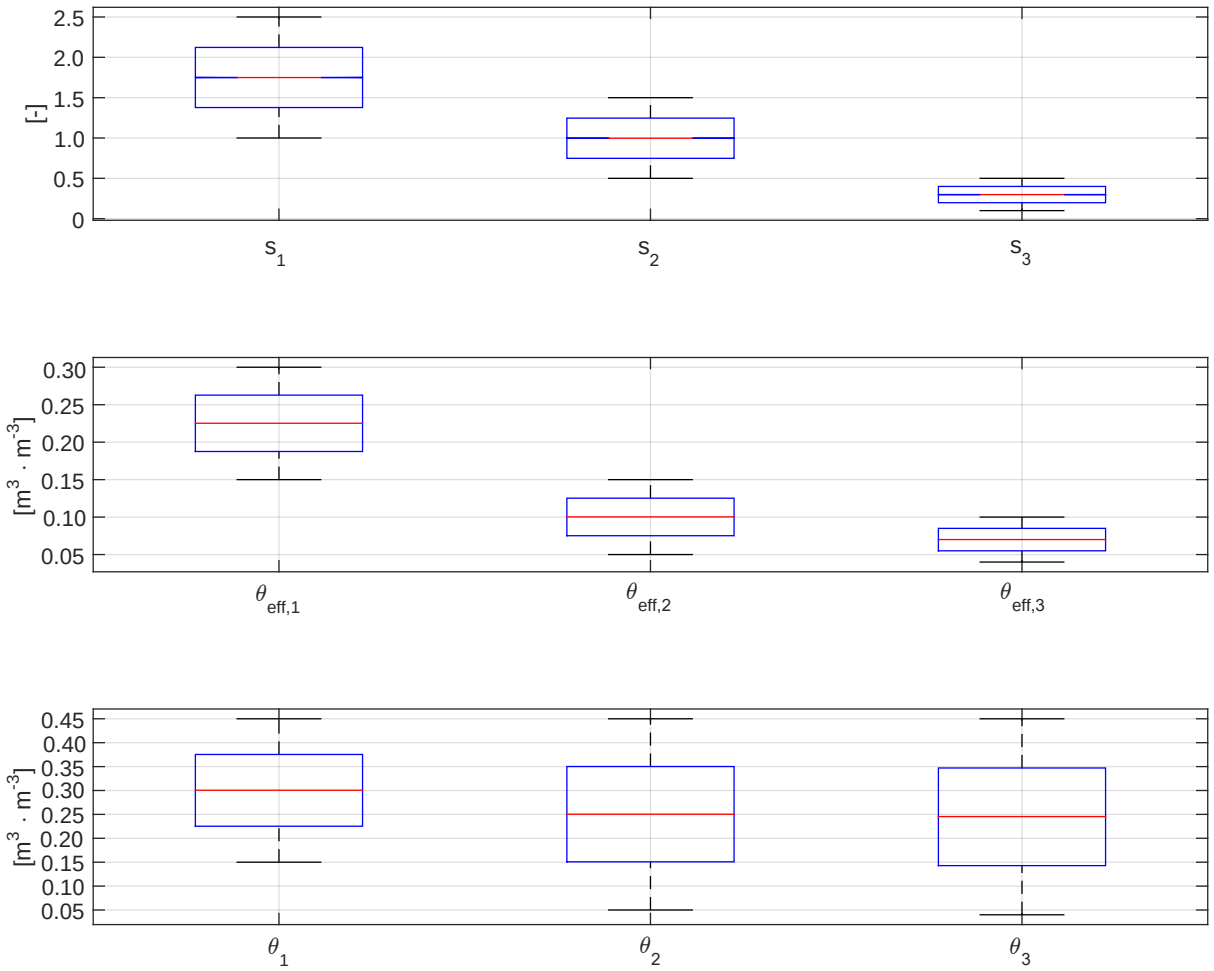
6.6.3 Monte Carlo analyse af transporthastigheder

Der opstilles en række Monte Carlo simuleringer til undersøgelse af vandstand og transporthastighed. Monte Carlo simulering benyttes til bestemmelse af 90%-konfidensinterval af forventelige transporthastigheder ud fra uniformt fordelt sampling af stejlhedsparameter, effektiv og total porøsitet. Monte Carlo analysen baseres på 10.000 simuleringer af UZ-Modellen for hhv. den beskrevne sand, ler og kalkmatrice. Antallet af simuleringer skal sikre afdækkelse af kombinationsmuligheder ved sampling.
Monte Carlo simuleringen opstilles som vist i tabel 6.2 med valgt fordelingsfunktion.

Tabel 6.2. Sandsynlighedsfordeling til parametersampling til Monte Carlo analyse af UZ-Modellen.

	s	θ_{eff}	θ
Fordeling	Uniform	Uniform	Uniform

Som vist i tabel 6.2 anvendes udelukkende uniform sandsynlighedsfordeling, hvilket betyder ligefordelt sandsynlighed for alle udfald indenfor en øvre og nedre grænse i parameterspændet. Hvis der eksempelvis vælges en normalfordeling afsøges området omkring middelværdien ubegrundet bedst, hvorfor der ved anvendelse af uniform fordeling undgås en indledningsvis modelstyring [Beven, 2009]. Boksplots med stokastiske parametre findes i figur 6.12 på baggrund af de valgte fordelinger.

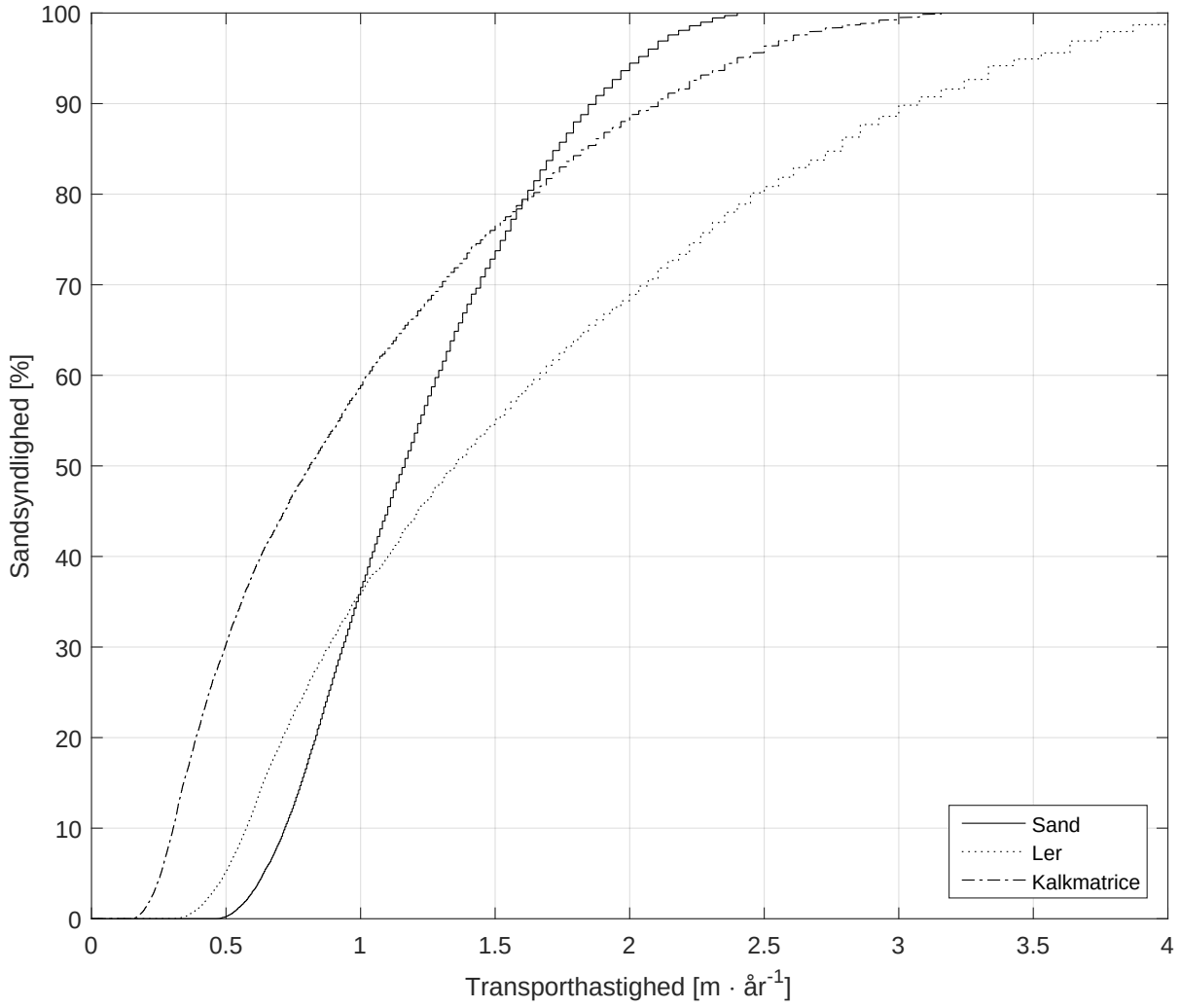


Figur 6.12. Boksplots afdækkende udfaldssandsynlighed for stokatiske paramtre til Monte Carlo simuleringer. Indeks 1, 2 og 3 indikerer hhv. sand, ler og kalk. Det bemærkes at hver parameter er samplede med en uniform fordeling, eftersom medianen markerer midten af det samplede parameterspænd.

Det bemærkes af figur 6.12, hvorledes spændet for hhv. effekt- og total porøsitet, vist i tabel 6.1, er afdækket. Det bemærkes, hvorledes der er fastsat spænd for stejlhedsparameteren. Spændet er som nævnt fastlagt som tilpasning af transporthastigheder, således der ikke opnås urealistiske transporthastigheder.

For gennemskueligheden af parameterrespons benyttes princippet af den forsimplede geologiske model som beskrevet i appendiks B.2 på side A12. Der regnes heraf transportid fra massemidtpunkt af et enhedsinput til gennembrud af massemidtpunkt ved grundvandsspejlet, hvilket anses som et udtryk for nitratpuljens forsinkelse i den umættede zone.
Den forsimplede geologiske model opbygges af n=10 reservoir af tykkelsen, L_n, på 1,0 m. Der opsættes i alt tre geologiske modeller bestående af en kolonne for sand, ler og kalkmatrice. Der simuleres udelukkende enkeltporøst, da modelkonceptet umuliggør beskrivelse af transporthastighed i sprækker separat, hvorfor der bestemmes transporthastighed i selve kalkmatricen. Infiltrationen fastsættes til konstant infiltrationsrate på 300 mm $\cdot$ år^{-1}.

Figur 6.13 viser empirisk akkumuleret sandsynlighedsfordeling for beregnede transporthastigheder for alle tre medier.



Figur 6.13. Output-sandsynlighed for transporthastighed i hhv. sand, ler og kalkmatrice.

Det bemærkes af figur 6.13 hvorledes der forekommer et relativt groft spænd for transporthastighed i ler og kalk, som følge markante ekstremer i tilbageholdelsen. Desuden bemærkes det, hvorledes transporthastigheden i sand har en stejlere hældning, hvorfor intervallet for sand vil være mere præcist defineret. Dette vurderes fordelagtigt, da tilbageholdelsen i sand forventes mindre end ler og kalk. Hastigheden stemmer desuden overens med en forventet transporthastighed i sand. Grundet indvirkningen af stejlhedsparameter, s, forekommer der en Log-normal tendens i output for sandsynlighed af transporthastighed. Dette skyldes at stejlhedsparameteren har en eksponentielt aftagende indvirkning på transporttiden, når stejlhedsparameteren er stigende. Der sker en haledannelse for særligt ler og kalkmatricen mod maksimal transporthastighed, hvilket teoretisk er karakteristisk for en Log-normalfordeling. I tabel 6.3 forefindes opsummerende 90 %-konfidensinterval og middel transporthastighed for både sand, ler og kalkmatricen.

Tabel 6.3. 90%-konfidensinterval og middelværdi for transporthastigheder i sand, ler og kalkmatrice.

	Sand $[\mathrm{m}\cdot\mathrm{år}^{-1}]$	**Ler** $[\mathrm{m}\cdot\mathrm{år}^{-1}]$	**Kalk** $[\mathrm{m}\cdot\mathrm{år}^{-1}]$
90%-konfidensinterval	[0,61; 1,88]	[0,41 ; 2,27]	[0,21 ; 1,74]
Middelhastighed	1,08	1,10	0,62

Af tabel 6.3 konkluderes, at der med 90% sandsynlighed vil opnås transporthastigheder i de præsenterede intervaller ved en middelinfiltration på $300\,\mathrm{mm}\cdot\mathrm{år}^{-1}$. Der er således kontrol med de simulerede transporthastigheder gennem den umættede zone, hvilket medfører, at der ikke forekommer urealistiske scenarier.
Grundet en grey box modeltilgang i UZ-Modellen, er det forbundet med usikkerhed, at fastlægge et realistisk spænd for geologisk afhængig transporthastighed. Der er således, for UZ-Modellen, foretaget en analyse af struktur, input og parametre, hvilket resulterer i en øget modelforståelse. I følgende afsnit udfærdiges en sammenfatning på baggrund af erfaringer opnået i nærværende rapport.

6.7 Sammenfatning

Der er således fortaget en dokumentation for opsætningen af UZ-Modellen samt en redegørelse for anvendelse af modelinputs.
Grey box beregningstilgangen medfører en relativ simple opbygning af UZ-Modellen, hvilket giver kort CPU-beregningstid og en simpel parametrisering. Herved tillades en stokastisk analyse af usikkerhederne forbundet med opbygningen og nitratprædiktionen. UZ-Modellen er opbygget på et princip om bevarelse af masse i beregningen af både vand og stof for den umættede zone. Der er foretaget supplerende undersøgelser, der bekræfter at kontinuitetsprincippet er overholdt, hvilket gør UZ-Modellen anvendelig til beregning af gennembrudskurver til den mættede zone.
Den lineær reservoir tilgang er modificeret ved at vandtransporten eksponentielt tager højde for en stigende ledningsevne i den umættede zone når vandstanden i et reservoir er stigende. Dette afspejler i større grad de reelle fysiske forhold end en lineær stigende vandtransport med vandindholdet. Vandhastigheden ud af et reservoir korrigeres for at tage højde for sprækketransporten i det komplekse dobbeltporøse kalk, hvilket medfører en gennemskylningseffekt. Der er erfaret at korrigeringen af vandhastigheden, ved det dobbeltporøse medie, ikke kan tage højde for abrupte ændringer i nitratkoncentration. Implementeringen vurderes derfor udelukkende anvendelig til at beskrive en samlet transport i matrice- og sprækkedomæne af nitrat på årsbasis. Ved implementering af dræn sikres en årlig middelinfiltration på ca. $300\,\mathrm{mm}\cdot\mathrm{år}^{-1}$. For nitratudvaskningen tilknyttes typekurver der beskriver nitratkoncentrationen i udvaskningen fra arealerne landbrug, by og natur.
Afslutningsvis er der foretaget en analyse af transporthastighederne for nitraten i hhv. sand ler og kalk til sikring af, at der ikke forekommer urealistiske transporthastigheder igennem den umættede zone. Eftersom at UZ-Modellen kan beregne gennembrudskurver til den mættede zone, vil det endelige Modelkompleks, i det følgende kapitel, udfærdiges ved en sammenkobling af UZ-Modellen med partikeltrackingen i den mættede zone.

Kapitel 7

Modellering af nitrattransport i et samlet Modelkompleks

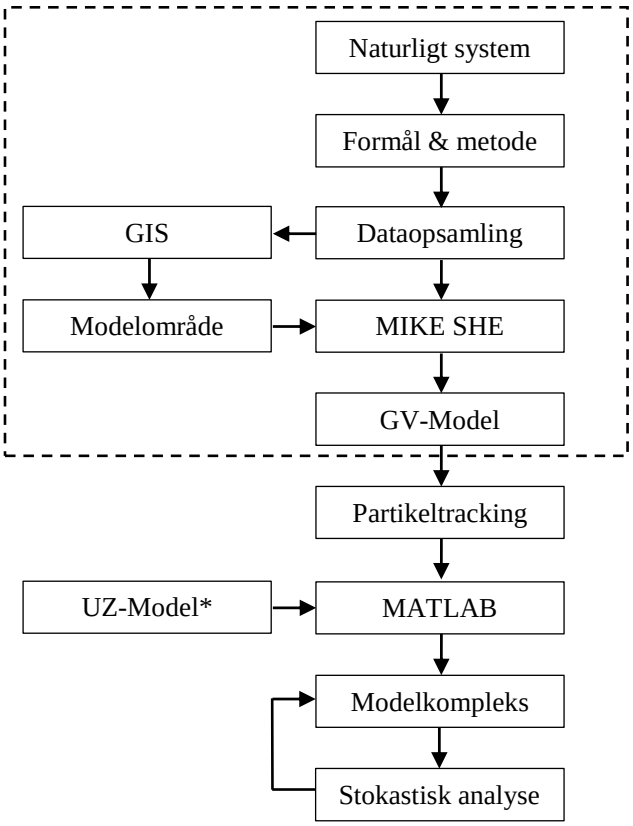
Da der er opsat en model for den umættede zone til beskrivelse af vand- og stoftransport til grundvandsspejlet, udarbejdes en tracking af partikler, som skal udgøre den videre stoftransport i den mættede zone. I følgende kapitel vil formål, forudsætninger og opsætning for partikeltrackingen dokumenteres og forklares. Ikke mindst vil en beskrivelse af den anvendte metode, til konstruering af et samlet Modelkompleks af den umættede og mættede zone i kombination, indgå. Supplerende analyser tilhørende nærværende kapitel forefindes i appendiks C på side A19. Selvkodede modeller tilhørende kapitlet vil være at finde på bilags-CD D.5-\Partikeltracking.

7.1 Formål

Formålet med partikeltrackingen er, ved kombination med UZ-Modellen i et samlet modelkompleks, at kunne fremskrive nitratkoncentrationer i vandforsyningsboringer. Modelkomplekset giver mulighed for forskydning af gennembrudskurver til grundvandsspejlet med partiklens transporttid fra grundvandsspejlet til vandforsyningsboringen. Dette vil medføre, at der kan opstilles en risikovurdering for, hvornår grænseværdien for nitrat er overskredet i vandforsyningsboringer i OSD 1432. Her monitoreres stigende nitratkoncentrationer nær og ved grænseværdien på nogle af de centrale kildepladser, bl.a. AKV-Drastrup 1. Desuden vil et relativt simpelt Modelkompleks muliggøre stokastisk modellering, hvor der kan tages højde for de parameterusikkerheder.

7.2 Metode

Partikeltrackingen opstilles i programmet MIKE SHE som fremadrettet sporing, hvor fiktive partikler indsættes ved grundvandspejlet og spores 3-dimensionalt [DHI, 2000]. Partiklen spores fra indsættelse ved grundvandspejlet til oppumpning i vandforsyningsboring.
Den primære forudsætning for at partikeltrackingen kan opstilles er at en grundvandsmodel for den mættede zone er tilgængelig. GV-Modellen bibringer den nødvendige information vedrørende grundvandspejlets placering og grundvandets dynamik, hvorpå partikeltrackingen baseres. Grundvandsmodellen er udarbejdet af NIRAS [2015], Aalborg. Metoden for opsætningen af grundvandsmodellen belyses ikke yderligere i rapporten.
Det forudsættes desuden at have kendskab til partiklernes placering og transporttid i hvert enkelt geologisk lag, da der herved muliggøres en lineær skalering med total porøsitet. Ligeledes vil kendskabet til placering og transporttid medføre, at der kan skelnes direkte mellem transporttid over og under en eventuel grænse for reduktion ved denitrifikation i grundvandet.
Hver partikel har således oprindelse i én specifikt beregningscelle med gennembrudskurve i den umættede zone, som har oprindelse i én specifik arealanvendelse. Som beskrevet i afsnit 6.5.2 på side 46 kan historisk udvaskning af nitrat beskrives enten konstant eller variere tidsligt afhængigt af typekurve. Partiklernes transporttid og bane i den mættede zone omsættes direkte til forskydning af gennembrudskurve i den umættede zone med partiklens transporttid. Figur 7.1 viser fremgangsmåden for opstillingen af Modelkomplekset.



Figur 7.1. Metode for opstilling af modelkompleks ved kombination af UZ-Model og Partikeltracking. * Opsætning og dokumentation forefindes i kapitel 6 på side 33. Den stiplede rektangel omgrænser elementer, som ikke dokumenteres i nærværende rapport.

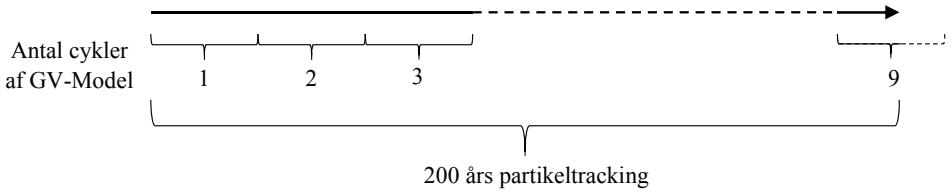
Af figur 7.1 bemærkes, at der skal foreligge en veldefineret grundvandsmodel, forinden partikeltrackingen kan udføres. GV-Modellen producerer de 3-dimensionselle strømninger, på hvilke partikeltrackningen baseres.
Til konstruktion af det samlede Modelkompleks kombineres UZ-Modellen beskrevet i kapitel 6 på side 33 med den føromtalte partikeltracking. Der udfærdigeres for partikeltrackingen en inputanalyse. Analysen skal medføre, at resultater for modelleringen ikke er påvirket af utilstrækkelige input til partikeltrackingen. Afslutningsvis forventes det, at der ved forskydning af gennembrudskurver til grundvandet fra UZ-Modellen med partiklers transporttid kan foldningsintegreres for hvert grundvandsdannende opland, således der kan modelleres en endelig koncentration ved vandforsyningsboringen. Parameterusikkerheden håndteres efterfølgende ved en stokastisk analyse.

7.3 Partikeltracking

Den samlede modelopsætning for partikeltrackingen vil i følgende afsnit dokumenteres indeholdende placering, registrering og transport for partikler i grundvandet. Der indsættes et fast antal på 10 partikler pr. beregningscelle ved grundvandsspejlet. Partikeltrackingen simuleres over en periode på 200 år, hvor den effektive porøsitet fastsættes til $0{,}1\,\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{m}^{-3}$ for alle geologiske lag. Efterfølgende skaleres der med varierende porøsitet i de enkelte geologiske klassificeringer. Partikler med en transporttid $>$200 år til en vandforsyningsboring medtages ikke i den samlede partikeltracking. Dette skyldes, at partikler med en længere transporttid vil have minimal påvirkning på den endelige koncentration i en vandforsyningsboring. Partikler med anden endestation end vandforsyningsboring negligeres ligeledes, da disse med sikkerhed ikke vil have indvirkning på resultatet, men udelukkende vil være til ulempe for beregningstiden. Den udvalgte simuleringstid for partikeltrackingen med den relativt lave fastsatte porøsitet vurderes acceptabel

til formålet.

Da partikeltrackingen baseres på hydrodynamikken fra GV-Modellen, kræves det, forinden partikelmodulet i MIKE SHE kan simuleres, at strømningsresultaterne modelleres i den mættede zone. Den 3-dimensionelle GV-Model er relativ beregningstung og der foreligger udelukkende modelanvendelige input for en afgrænset periode fra år 1990 til år 2012. Derfor er gentagende cyklus af GV-Modellens strømningsresultater og pumpehistorik nødvendig, når partikelmodulet simuleres efterfølgende. Illustration af hvorledes strømningsresultaterne og pumpehistorikken anvendes til partikeltrackingen er vist på figur 7.2.

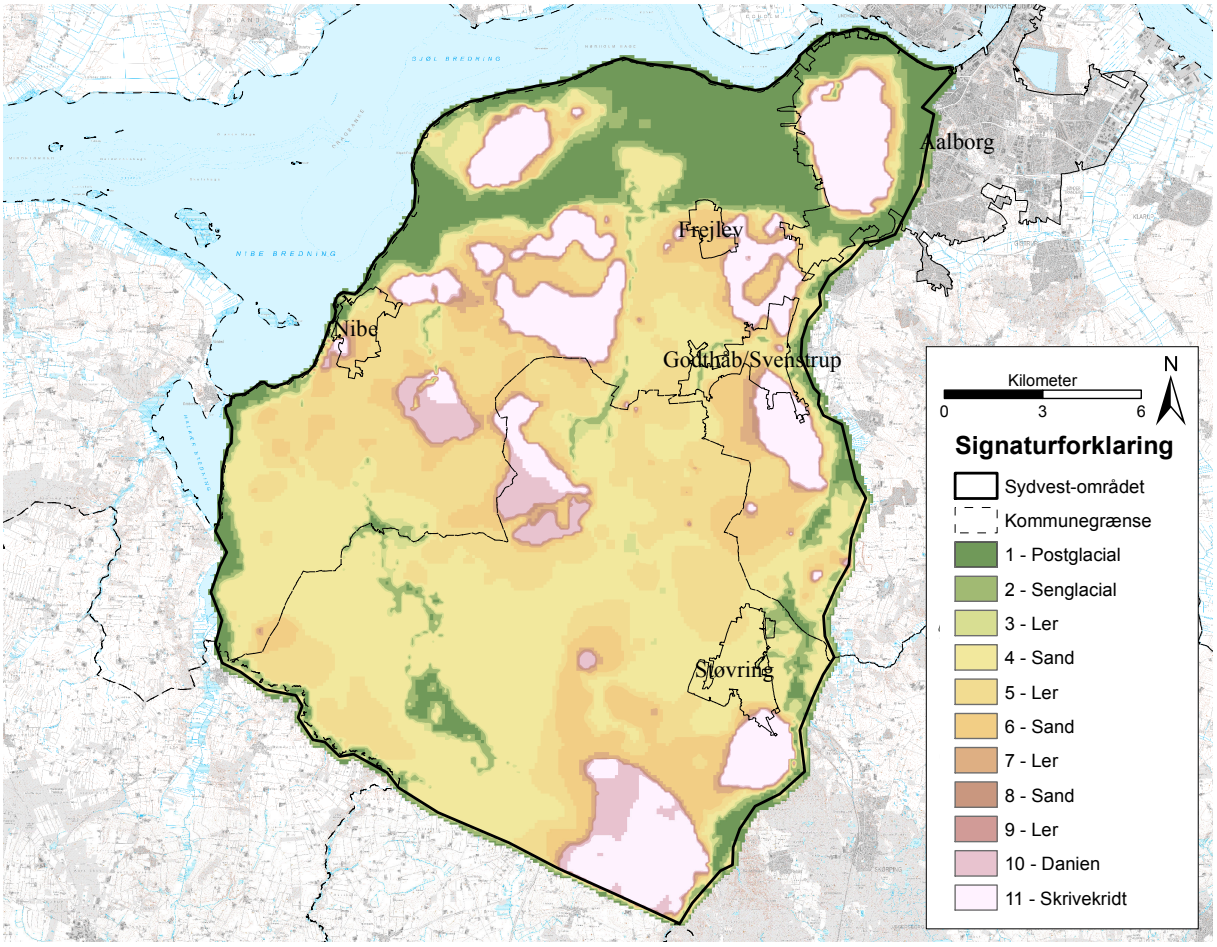


Figur 7.2. Principskitse for gentagende cyklus af strømningsresultater og pumpehistorik fra GV-Model til partikeltracking.

Det bemærkes af figur 7.2 at partikeltrackingen baseres på 9 cykler af strømningsresultaterne fra GV-Modellen. Det er muligt at anvende stationære resultater, men det vælges at anvende transiente strømninger, da en variabel dynamik vurderes at kunne påvirke partikelbanerne og afbillede det naturlige system med en relativt større korrekthed i grundvandsdynamikken. Strømningsmønstrene vil utvivlsomt ændres over en periode på 200 år, hvorfor den gentagende anvendelse vurderes at bringe en vis usikkerhed til det endelige resultat. Det vurderes dog, at denne ændring vil have minimal påvirkning sammenlignet med de totale modelusikkerheder. Da retmæssig placeringen af partikler er essentiel for partikeltrackingen, udarbejdes en dokumentation heraf.

7.3.1 Placering af partikler ved grundvandspejl

Da stoftransporten er beregnet for den umættede zone, skal partiklerne placeres umiddelbart ved grundvandsspejlet, for at sikre at transporttiden ikke unødvendigt fejlestimeres. Da UZ-Modellen udelukkende modellerer vand- og stoftransport af nitrat 1-dimensionalt, vil partikler indsættes ved samme beregningscelle horisontalt, hvor gennembrudskurven fra UZ-Modellen beregnes til.
Indledningsvis undersøges der for, hvilket geologisk lag der er i skæring med grundvandsspejlet for hver beregningscelle. De lag, som er i skæring med grundvandsspejlet tildeles partikler, som vist på figur 5.2 på side 30. Figur 7.3 indikerer, hvilke geologisk lag, som er i skæring med grundvandsspejlet.



Figur 7.3. Grundvandspejlets skæring med geologisk lag. Indikerer vertikalt lag for partikelindsætning i horisontale beregningsceller. Beskrivelse af den geologiske model forefindes i afsnit 3.3 på side 16.

Det bemærkes, af figur 7.3, at der forekommer relativt store variationer i hvilke geologiske lag, som skæres af grundvandsspejlet. I programmet MIKE SHE muliggøres en sikring af, at partikler placeres jævnt fordelt ved grundvandsspejlet. Herved sikres det, at partikler ikke placeres i den umættede zone og samtidigt undgås en fejlbehæftet transporttid. Metoden for placering af partikelindsættelse i grundvandsmodellen forefindes på bilags-CD D.5- $\backslash Partikeltracking \backslash Placering$.

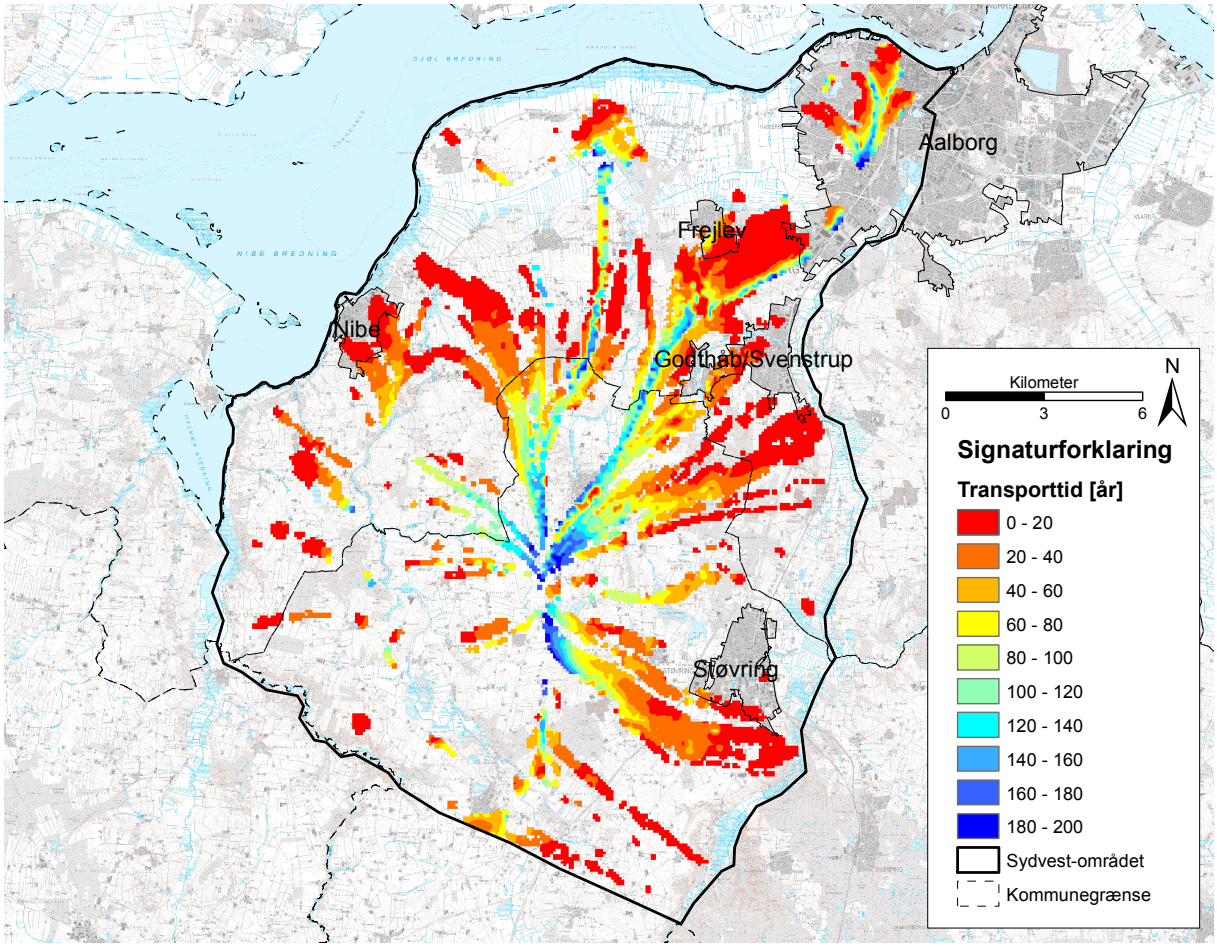
7.3.2 Registrering af partikler ved registreringszoner

Et andet og essentielt element i opsætningen af partikeltracking er definering af registreringszoner. Registreringszoner opdeles, således der registreres hver gang en partikel transporteres ind og ud af et geologisk lag. Herved sikres det, at der er kendskab til den specifikke partikels opholdstid i de enkelte geologiske lag, hvilket er nødvendigt for at kunne beskrive opholdstid over og under redoxgrænsen. Metode for registreringen af partikler og håndtering af resultater fra MIKE SHE forefindes på bilags-CD D.5- $\backslash Partikeltracking \backslash Registrering$.

Der defineres ligeledes, at der skal ske en registrering, hver kan en partikel fjernes fra grundvandsmodellen. Registreringen for endepunkter defineres, således der kan skelnes mellem partikler der fjernes til specifikke vandforsyningsboringer. På den måde kan det grundvandsdannende opland for den enkelte vandforsyningsboring kortlægges. I det følgende afsnit vil de indsatte partiklers transport fra indsættelse ved grundvandspejlet til oppumpning i vandforsyningsboringe blive analyseret.

7.3.3 Transporttid og opholdsandel under redoxgrænsen

Resultaterne for partikeltrackingen kan opdeles i to elementer. Det første er den totale tid, hvormed en partikel transporteres fra indsættelse ved grundvandspejlet til den oppumpes i en vandforsyningsboring. Det andet element er opholdsandelen, hvor partikler befinder sig i den zone af grundvandet der tillader nitratreduktion ved nedbrydning, altså under redoxgrænsen.
Det skal bemærkes at partikeltrackingen er baseret på én fastsat porøsitet, hvorfor resultaterne udelukkende benyttes til kortlægning af partiklernes transportbaner. Kortlægningen af de grundvandsdannende oplande er beregnet på baggrund af samtlige aktive vandforsyningsboringer i GV-Modellen. Der kortlægges ikke til hvilken vandforsyningsboringen den tilstrømmende partikel oppumpes, men udelukkende de grundvandsdannende oplande. Der kan dog udarbejdes relative vurderinger af nitratsårbarheden på baggrund af opholdstiden under redoxgrænsen forinden den effektive porøsitet skaleres. Figur 7.4 illustrerer den totale transportid for de indsatte partikler.

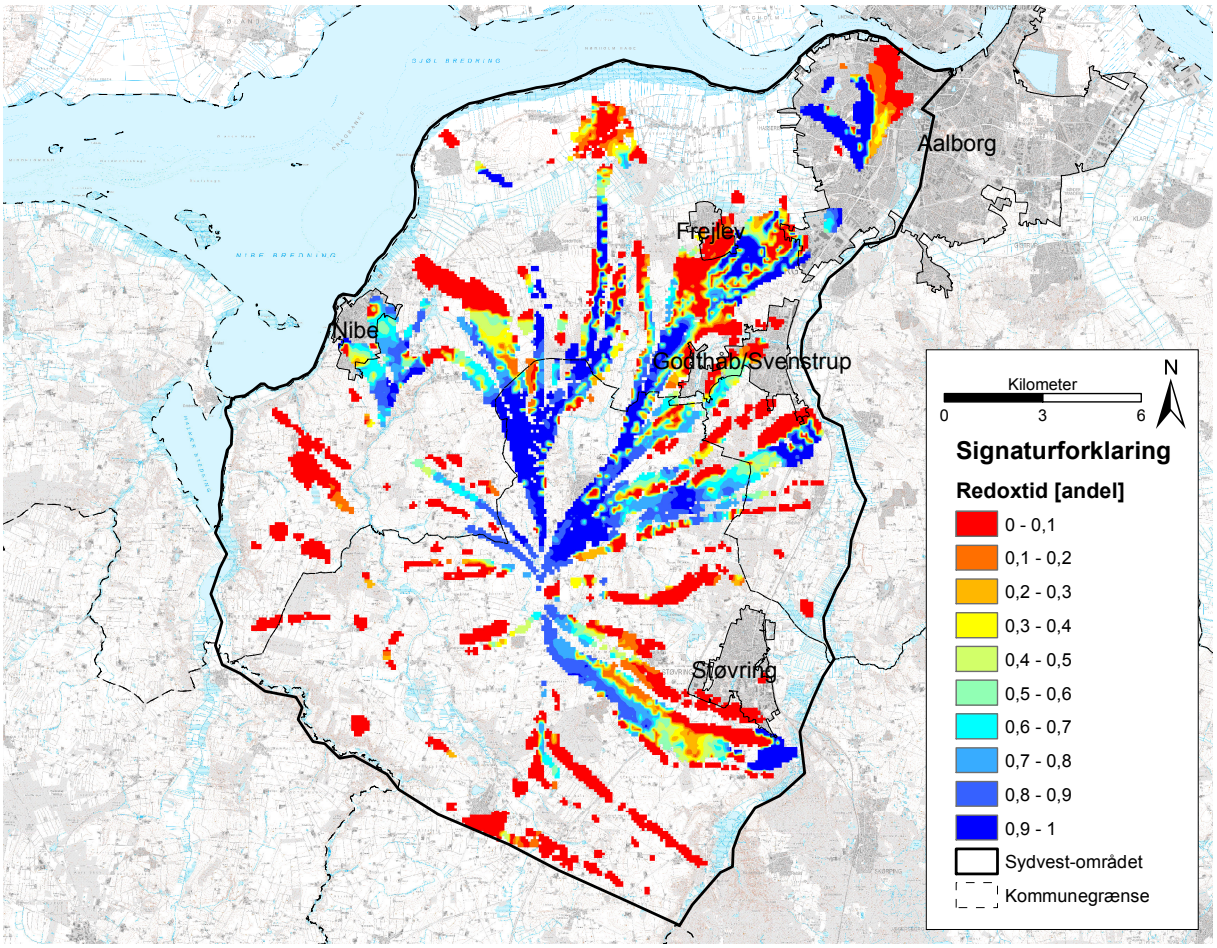


Figur 7.4. Total transportid for partikler indsat ved grundvandspejlet til oppumpning i vandforsyningsboringer. Alle illustrerede partikler oppumpes indenfor en periode på <200 år med en effektiv porøsitet på $0{,}1\ \mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{m}^{-3}$.

Det bemærkes af figur 7.4, hvorledes indvindsoplande for Sydvest-området illustreres tydeligt. Transporttiden er generelt tydeligt aftagende fra den centrale del af Sydvest-området mod modelrandene. Ved at have kendskab til en partikels transporttid i de forskellige geologiske lag der passeres i den mættede zone, er det muligt at forskyde gennembrudskurverne leveret af UZ-Modellen.

Der fastsættes en redoxgrænse for hvornår der forventes at ske nitratreduktion. Det er forbundet med usikkerhed at fastlægge en veldefineret redoxgrænse for, hvor der forventes at ske reduktion, hvorfor en relativt grov metode anvendes til bestemmelse af redoxgrænsen. Det vurderes erfaringsmæssigt at betragte grundvandsmagasinet over mergelhorisonten for at være iltet, hvorfor nitratreduktion her er usandsynligt.

Derfor vurderes det, at en fastlæggelse af redoxgrænsen ved mergelhorisonten er sandsynlig, grundet et relativt lavt iltindhold [GEUS, 2015]. Det må dog vurderes at tilgængeligheden af pyrit og organisk materiale vil være begrænset, hvorfor reduktionspotentialet ikke vil være optimalt. Mergelhorisonten udgør det 12. geologiske lag fra terræn som vist i tabel 3.4 på side 18.
Opholdstiden under redoxgrænsen ved partikelplacering under mergelhorisonten kan beregnes. Dette muliggøres ved at have kendskab til partiklens passage lagvis. Det er imidlertid interessant at undersøge forholdet mellem opholdstiden under redoxgrænsen og den totale transporttid for partiklen. Dette giver et udtryk for, hvor stor en andel af partiklens transporttid der foregår under mergelhorisonten. Figur 7.5 illustrerer andelen af opholdstid i redoxzonen. En værdi på 1 indikerer, at partiklen udelukkende transporteres under redoxgrænsen, hvor en værdi på 0 indikerer, at partiklen udelukkende transporteres i det iltede grundvand over redoxgrænsen.



Figur 7.5. Andel af transporttid under redoxgrænsen fastsat til mergelhorisonten svarende til det 12. geologiske lag. Andelen er beregnet som forholdet mellem transporttiden under redoxgrænsen og den totale transporttid.

Af figur 7.5 bemærkes, at der særligt forekommer nitratreduktion i den centrale del af Sydvest-området. Partikler i den sydligste del af området, syd for Støvring, passerer ikke mergelhorisonten, hvorfor nitratsårbarheden her vil vurderes høj. Der bemærkes ved at sammenholde med figur 7.4, at områder med relativt lang transporttid ofte vil have en tilsvarende høj andel af nitratreduktion i partikelforløbet. En sådan kombination vil være fordelagtig for minimering af nitratsårbarheden i det grundvandsdannende opland. Således vurderes robustheden i forhold til nitratudvaskning i disse områder til at være relativ høj. Områder uden reduktion af nitrat, vil utvivlsomt vurderes mere nitratsårbare end områder med en markant andel af reduktion over en længere transportid. Sammenholdes resultaterne for partikeltrackingen med figur 3.4 på side 11 bemærkes det, at der forekommer overensstemmelse mellem vurdering af at de robuste områder vil have lavere nitratsårbarhed og lave målte nitratkoncentrationer i vandforsyningsboringerne.

Da partikeltrackingen således er udført, hvor hver partikels bane fra indsættelse ved grundvandspejl til oppumpning i vandforsyningsboring er veldefineret, er opstilling af det samlede Modelkompleks muliggjort.

7.4 Opsætning

Modelkomplekset består af en sammenkobling af den umættede zone udgjort af UZ-Modellen og den mættede zone repræsenteret af partikeltrackingen. I det følgende afsnit vil opsætning og undersøgelse af modellens egenskaber blive dokumenteret. Indledningsvis vil der på baggrund af nævnte forudsætninger opstilles en række antagelse. Desuden vil hver antagelse tildeles en uddybende forklaring. Det skal bemærkes, at de opstillede antagelser for UZ-Modellen i kapitel 6 på side 33 påvirker det samlede Modelkompleks, hvorfor disse også skal tages i betragtning. Det antages at:

- transporttiden i grundvandet, for de enkelte partikler, kan skaleres lineært med porøsiteten, således gennembrudskurven fra UZ-Modellen kan forskydes i tid.
- den numeriske spredning, som er repræsenteret i den umættede zone model, er tilstrækkelig til beskrivelse af den samlede spredning fra udvaskning ved terræn til vandforsyningsboring.
- der ikke direkte modelleres diffusiv nitrattransport, men at denne proces udelukkende medtages i kalken som tilbageholdelse ved opskalering af porøsiteten.
- Antallet af indsatte partikler kan beskrive stoftransporten i den mættede zone i hvert specifikt grundvandsdannende opland til en bestemt vandforsyningsboring.
- der ved vægtning med den infiltrerende mængde pr. år i oplandet kan sikres et retvisende bidrag for hver partikel til en vandforsyningsboring.
- der muliggøres at indføre denitrifikation under en estimeret redoxgrænse.

Ved at antage at transporttiden for partiklerne kan skaleres lineært med porøsiteten muliggøres det, at udarbejde stokastisk analyse af partikeltrackingen uden, at det er kræves gentagende simuleringer i MIKE SHE, hvilket er beregningsmæssigt tidskrævende og relativt omstændigt. Metoden medfører en forsimpling, hvor der i stedet tages højde for parameterusikkerhed ved en nedjustering af CPU-beregningstiden. Dette er essentielt for at kunne sammenkoble UZ-Modellen med Partikeltrackingen i ét samlet Modelkompleks. Der er forbundet med usikkerhed at fastlægge den reelle spredning. Dette betyder at modelusikkerheden vil være stigende ved negligering af yderligere mekanisk spredning, mens det vil afhjælpe parameterusikkerheden. Hvis antagelsen om lineær skalering af transporttid i den mættede zone er gældende vil det også være muligt at modellere stoftilbageholdelse i kalk.

7.4.1 Opsætning af Modelkompleks

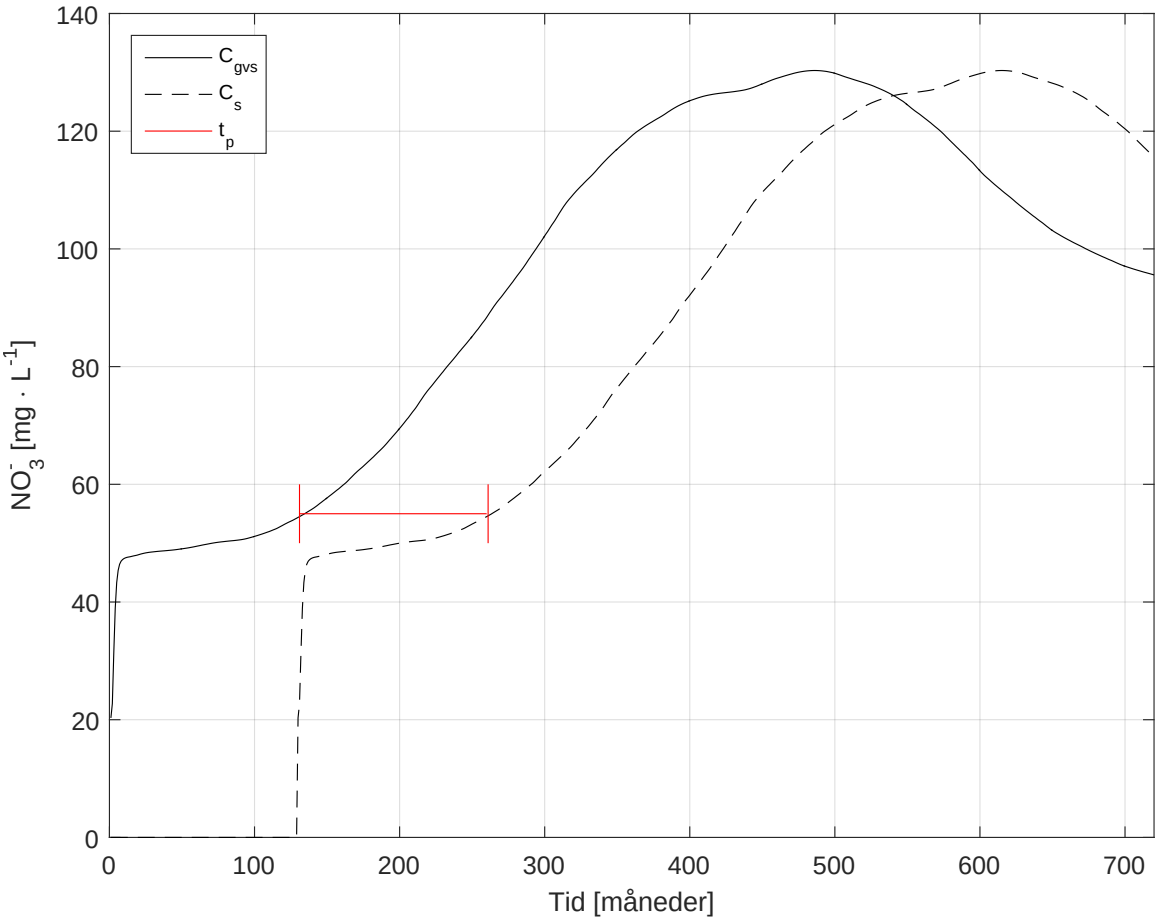
Ved opfyldning af de opstillede antagelser og forudsætninger er det muligt at sammenkoble den umættede zone (UZ-Modellen) med den mættede zone (Partikeltrackingen). Der beregnes en samlet koncentration for hver vandforsyningsboring pr. grundvandsdannende opland. Herved kan én samlet koncentration for hver vandforsyningsboring beregnes. Metoden sker ved summering af de enkelte gennembrudskurver forskudt med respektiv transporttid for partiklen vægtet med bidraget i form af en årlig vandhastighed til grundvandet. Sammenkoblingen og beskrivelsen af den endelige koncentration i én specifik vandforsyningsboring kan beskrives som formel (7.1).

$$C_s(t) = \frac{1}{a_p} \sum_{k=1}^{a_p} \frac{C_{gvs,(k)}(t_0 + t_{p,(k)}) \cdot q_{gvs,(k)}}{\overline{q}_{gvs,(a_p)}} \tag{7.1}$$

hvor:

a_p	Antal partikler med endepunkt i samme vandforsyningsboring	$[-]$
C_s	Simuleret koncentration i vandforsyningsboring	$[\mathrm{mg} \cdot \mathrm{L}^{-1}]$
$C_{gvs,(k)}$	Gennembrudskurve fra UZ-Model til partikelbane k	$[\mathrm{mg} \cdot \mathrm{L}^{-1}]$
k	Partikelbane	$[-]$
$q_{gvs,(k)}$	Vandhastighed fra UZ-Model til partikelbane k	$[\mathrm{m} \cdot \mathrm{år}^{-1}]$
$\overline{q}_{gvs,(a_p)}$	Gennemsnitlig vandhastighed for alle partikler a_p	$[\mathrm{m} \cdot \mathrm{år}^{-1}]$
t_0	Begyndelsestid for simulering	[d]
$t_{p,(k)}$	Transporttid for partikel k	[d]
t	Tid	[d]

Af formel (7.1) bemærkes, at der således for hver vandforsyningsboring af interesse, kan simuleres en koncentration, C_s. Den oprindelige gennembrudskurve ved nederste reservoir, $C_{gvs,(k)}$, fra UZ-Model forskydes med den respektive transporttid, $t_{p,(k)}$, for partiklen k. Et eksempel på hvorledes en forskydning foretages, er illustreret på figur 7.6.



Figur 7.6. Eksempel på forskydning af gennembrudskurve ved grundvandsspejlet med den indsatte partikels transporttid.

Af figur 7.6 bemærkes, hvordan gennembrudskurven for den umættede zone parallelforskydes med partiklens transporttid. Der tages ligeledes forbehold for, at det må forventes at der kan optræde variation i perkolationen, til den mættede zone, hvorfor koncentrationen multipliceres med en normaliseret, vægtet vandhastighed til grundvandet. Den normaliserede vægtede vandhastighed baseres på afvigelser fra en gennemsnitlig års-vandhastighed for det pågældende opland. Derved tages der højde for, at bidraget fra beregningsceller kan variere. Dette vil særligt gøre sig gældende i områder med relativ stor variation i

perkolationen mellem beregningsceller i et opland grundet en varierende infiltration. Da der som tidligere vist er indlagt en redoxgrænse i den mættede zone der indikerer, hvor potentialet for nitratreduktion ved denitrifikation starter, vil processen i det følgende dokumenteres.

Nitratreduktion

Der tilægges modellen den mulighed, at der i visse tilfælde kan ske nitratreduktion ved denitrifikation. Jf. kapitel 5 på side 27, vil der, hvis forholdene tillader det, ske nitratreduktion i den mættede zone. Som nævnt medfører lagvis registrering af partikler, muligheden for at undersøge, hvor lang tid en partikel befindes under grænsen for nitratreduktion.
Reduktionen af nitrat forventes at ske som en 1. ordens nedbrydningsproces. Dette vælges på baggrund af, at mængden af organisk materiale vil være aftagende des dybere. Desuden er det beregningsmæssigt fordelagtigt at anvende 1. ordens nedbrydning kontra et nulte ordens udtryk, da negative koncentrationer vil være uopnåelige. Nitratreduktionen bestemmes ved formel (7.2).

$$C_{s,r}(t) = C_s(t) \cdot e^{-K \cdot t_r} \tag{7.2}$$

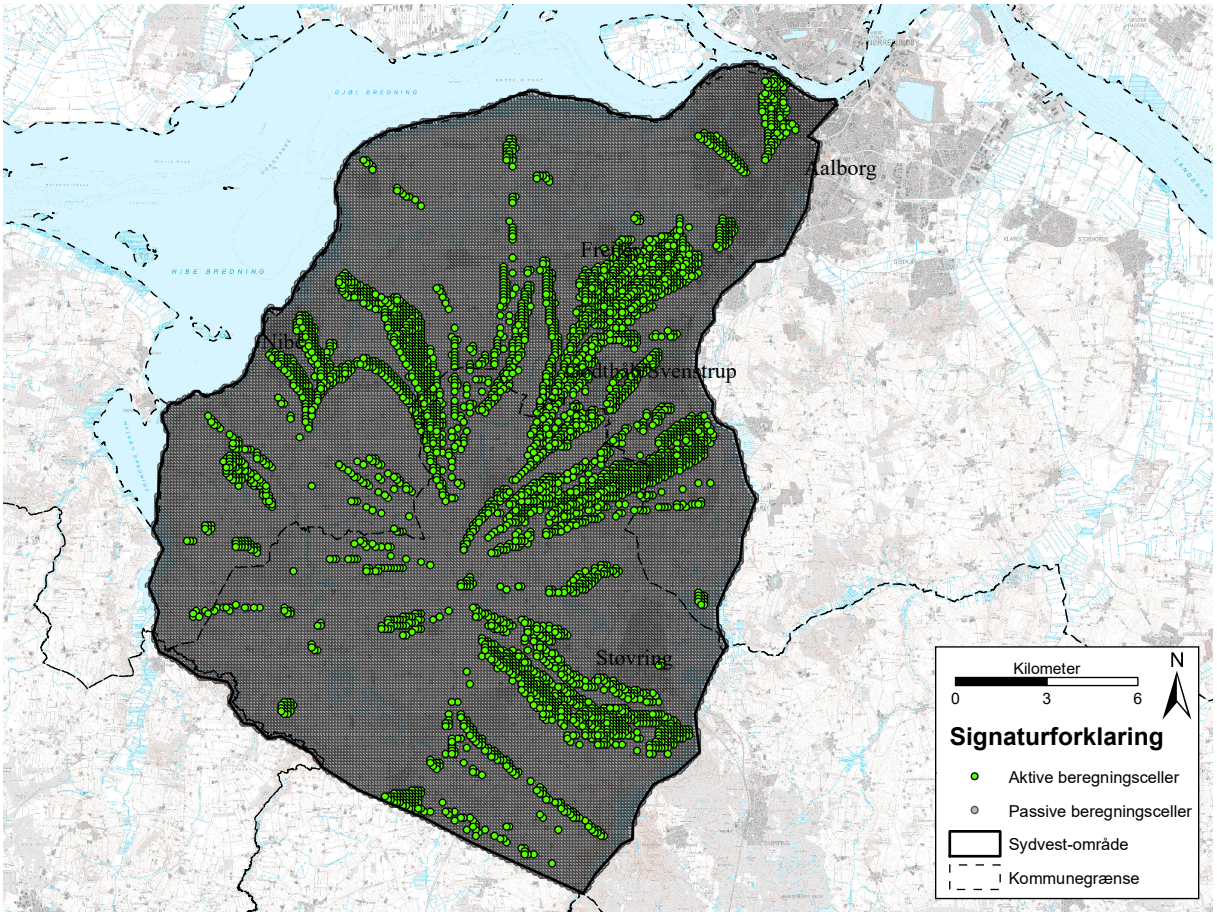
hvor:

$C_{s,r}$	Reduceret nitratkoncentration ved vandforsyningsboring	$[\mathrm{mg} \cdot \mathrm{L}^{-1}]$
t_r	Opholdstid for partikel under redoxgrænsen	[måned]
K	1. ordens nedbrydningsrate	$[\text{måned}^{-1}]$

I realiteten er det tvivlsom, hvorvidt nitratreduktionen vil følge en 1. ordens denitrifikation, hvor reduktionen er afhængig af selve koncentrationen af nitrat. Det vurderes dog, at usikkerheder, som placering af redoxgrænse, tilgængelighed af ilt og organisk materiale vil have markant større indvirkning på reduktionen, hvorfor et beregningsmæssigt fordelagtigt udtryk vil være at foretrække og derfor anvendes 1. ordens reduktion ved denitrifikation.
Da det ved kombinationen af UZ-Modellen og Partikeltrackingen ikke er nødvendigt at beregne alle beregningsceller, undersøges andelen af beregningsceller, der kan passiveres udenfor de kortlagte grundvandsdannende oplande.

7.4.2 Kortlægning af aktive beregningsceller

Eftersom det kun er nødvendigt at modellere gennembrudskurver for de grundvandsdannende oplande, er der grundlag for at udvælge de beregningsceller, som er relevante for formålet om modellering af nitrat i vandforsyningsboringer. Udvælgelsens validitet baseres på at der udelukkende simuleres 1D-strømning i UZ-Modellen, hvorfor beregningsceller placeret udenfor grundvandsdannende oplande ikke vil have betydning for simuleringen af nitratkoncentrationer i vandforsyningsboringer.
Beregningsceller, hvor partiklerne har endepunkt ved oppumpning i en vandforsyningsboring, benævnes *aktiv*. Øvrige beregningsceller benævnes *passiv*. Hertil er det muligt, at aktivere celler af interesse eller foretage ny kortlægning dynamisk, hvilket medfører at tilgangen er omsættelig til andre lokationer end oplande i Sydvest-området. Aktive og passive beregningsceller i Sydvest-området er illustreret på figur 7.7.



Figur 7.7. Aktive og passive beregningsceller i Sydvest-området. Aktive beregningsceller illustrerer de grundvandsdannende oplande for Sydvest-området.

Det bemærkes, af figur 7.7, at antallet af aktive beregningsceller reduceres markant ved kortlægning af grundvandsdannende opland forinden Modelkomplekset anvendes. Ved at differentiere mellem aktive og passive beregningsceller optimeres Modelkomplekset således, at der beregnes på et absolut minimum antal beregningsceller. Dette har betydning i forhold beregningstiden for hver simulering, hvilket er en fordel ved stokastisk modellering.
Antallet af aktive beregningsceller er ved kortlægningen af aktive og passive beregningsceller reduceret fra 72.000 til 5.808 aktive beregningsceller, hvilket udgør en faktor 12 reduktion for nærværende modelområde. Dette medfører en tidsmæssig besparelse som vist i tabel 7.1, for en 60 års simuleringsperiode.

Tabel 7.1. Besparelse før og efter kortlægning ved en 60 års simuleringsperiode af den umættede zone ved Modelkomplekset. Den tidsmæssige besparelse er bestemt ved beregning med processoren Intel® Core™ i7-3610QM CPU @ 2,30 GHz.

		Før kortlægning	Efter kortlægning	Besparelse
Aktive beregningsceller	[–]	72.000	5.808	∼92 %
Tid pr. simulering	[s]	600	20	∼96 %

Det bemærkes af tabel 7.1, at der ikke forekommer linearitet mellem tidsbesparelsen og besparelsen af antallet af aktive beregningsceller. Dette skyldes, en minimeret intern hukommelsesbelastning, hvilket medfører en yderligere tidsbesparende effekt ved simulering. En klar beregningsmæssig fordel, med en tidsbesparelse på ∼96 % som er opnået ved indledende kortlægning af oplande, er ønskværdig med et stokastisk modelleringstilgang for øje, da antallet af simuleringer af det samlede Modelkompleks til

samme realtid vil forøges med en faktor 30. Det er i appendiks C.2 på side A20 ligeledes forsøgt at minimere beregningstiden ved indførsel af såkaldte *singles*-variabler i beregningsmodellen. Dette giver en tidsbesparende effekt på 26 %.
Således er Modelkomplekset opsat og anvendeligt for stokastisk modellering. Det er imidlertid relevant at undersøge, hvorvidt opsætningen af partikeltrackingen som input, påvirker Modelkompleksets evne til at simulere nitratkoncentrationer i vandforsyningsboringer.

7.5 Inputanalyse

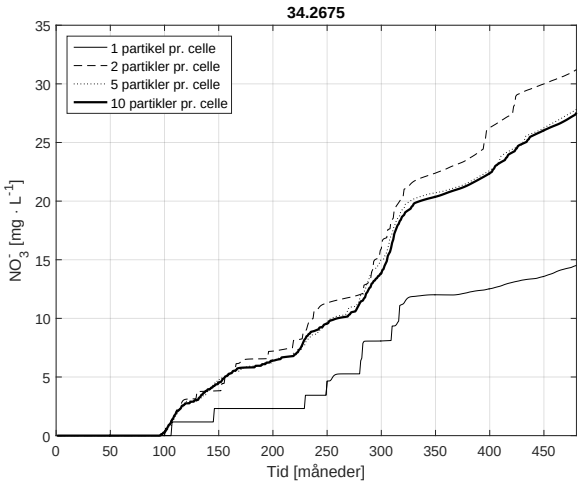
Der udføres en strukturel analyse for det samlede Modelkompleks af både antallet af indsatte partikler samt simuleringstiden for partikeltrackingen. Formålet ved den strukturelle analyse er at disse elementer ikke påvirker den endelige koncentrationen i vandforsyningsboringerne.
Der udvælges 20 vilkårlige vandforsyningsboringer, hvilke danner grundlag for analysen. En anden forudsætning for udvælgelsen er, at der som minimum skal være én tilstrømmende partikel. Liste med udvalgte vandforsyningsboringer til analysen forefindes i appendikstabel C.1 på side A19.
Indledningsvis undersøges det, hvorvidt der forekommer et plateau i nitratkoncentrationen med et stigende antal partikler pr. beregningscelle.

7.5.1 Antal indsatte partikler pr. beregningscelle

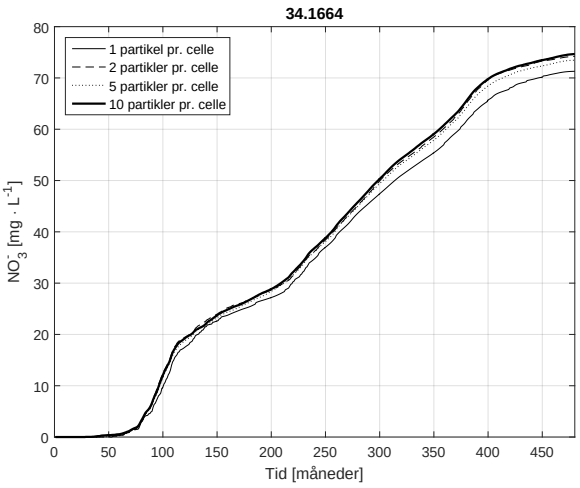
Partiklerne placeres jævnt fordelt ved grundvandsspejlet, hvorfor det forventes at det horisontale koordinat påvirker partikeldestinationen og derfor også den endelige koncentration.

Det skyldes, at beregningscellen ikke bliver udpeget som en del af det grundvandsdannende opland når der kun er 1 partikel. Der er sandsynligt at en partikel forbipasserer en vandforsyningsboring, særligt ved relativt små indvindinger uden markant sænkningstragt. Sådanne afvigelser kan blive afgørende, hvorfor et tilstrækkeligt antal partikler pr. berergningscelle vurderes at give en mere robust udpegning af grundvandsdannende oplande. Heraf undersøges det, hvor mange partikler der skal indsættes pr. beregningscelle ved 100 x100m beregningsceller i grundvandsspejlet.

Partikeltrackingen simuleres i 100 år med ensartet porøsitet $0{,}1\,\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{m}^{-3}$ for alle beregningslag i grundvandsmodellen, hvor eneste variabel er antallet af indsatte partikler pr. beregningscelle. Heraf dannes et sammenligningsgrundlag, hvortil en vurdering af antallet kan foretages. Det vælges at indsætte hhv. 1, 2, 5 og 10 partikler pr. beregningscelle.
Figurerne 7.8 og 7.9 illustrerer, hvorledes antallet af partikler pr. beregningscelle påvirker den endelige modellerede koncentration i vandforsyningsboringen. Der vælges ikke at grafisk illustrere resultater for samtlige 20 vandforsyningsboringer. Metoden for inputanalysen forefindes på bilags-CD D.5 - *\Partikeltracking\Input_analyse*.



Figur 7.8. Nitratkoncentration med hhv. 1, 2 ,5 og 10 partikler pr. beregningscelle. Illustration viser vandforsyningsboring 34.2675 ved Guldbæk Vandværk.



Figur 7.9. Nitratkoncentration med hhv. 1, 2 ,5 og 10 partikler pr. beregningscelle. Illustration viser vandforsyningsboring 34.1664 ved AKV-Drastrup 2 kildeplads.

Af figur 7.8 bemærkes det, er der forekommer variationer efter antallet af partikler, hvilket vurderes forventeligt. Det bemærkes særligt, hvorledes én partikel pr. beregningscelle ikke kan beskrive den endelige koncentration. Dette grundes i, at der forekommer en unaturlig og ujævn tilstrømning af partikler til denne vandforsyningsboring. Ligeledes bemærkes det, at der ikke forekommer signifikante variationer mellem 5 og 10 indsatte partikler pr. beregningscelle, hvorfor 5 partikler, med tilstrækkelig sikkerhed, kan beskrive koncentrationen i vandforsyningsboring 34.2675 i netop dette opland.
På figur 7.9 bemærkes et resultat af en anden karakter, hvor der ikke forekommer signifikante variationer, uanset partikelantallet. Dette kan skyldes at der foreligger et relativt velbeskrevet grundvandsdannende opland for netop denne vandforsyningsboring uanset partikelantallet.
I tilfælde af, at oplandet ikke afdækkes tilstrækkeligt af de indsatte partikler, vil koncentrationsforløbet ske med en mindre grad af differentiabilitet baseret på en fejlbehæftet fordeling af transporttid for de tilstrømmende partikler. Det bemærkes at én partikel pr. beregningscelle udgør den største afvigelse, hvorfor én partikel pr. beregningscelle ud fra en samlet grafisk betragtning vurderes utilstrækkelig.
Som supplement til den grafiske betragtning og til eftervisning af den gennemsnitlige afvigelse fra reference ved 10 indsatte partikler pr. beregningscelle beregnes en gennemsnitlig *RMSE* for alle udvalgte vandforsyningsboringer. Resultater for de enkelte vandforsyningsboringer forefindes i appendiks C på side A19. Den gennemsnitlige *RMSE* for alle udvalgte vandforsyningsboringer er vist i tabel 7.2.

Tabel 7.2. Gennemsnitlig *RMSE* for de 20 udvalgte vandforsyningsboringer i Sydvest-området. *RMSE* beregnes med reference til 10 indsatte partikler pr. beregningscelle.

Antal partikler pr. beregningscelle		1	2	5
$\overline{RMSE}$	$[\mathrm{mg \cdot L^{-1}}]$	2,89	1,77	0,92

Tabel 7.2 viser, at 5 partikler pr. beregningscelle gennemsnitligt afviger med $\sim$1 $\mathrm{mg \cdot L^{-1}}$ nitrat i forhold til 10 partikler pr. beregningscelle, hvilket accepteres. Heraf vurderes det, at det plateau, som fremkommer mellem 5 og 10 indsatte partikler pr. celle, medfører at 10 partikler pr. celle med acceptabel sikkerhed kan beskrive nitratkoncentration i vandforsyningsboringer. Den marginale afvigelse der forekommer, vurderes acceptabel relativt til de samlede model- og parameterusikkerheder.
På den baggrund kan der med 10 partikler pr. celle ved 100x100 m beregningsceller undgås at partikelantallet påvirker og styrer den endelige koncentrationsbeskrivelse, hvorfor formålet med analysedelen er opnået.

7.6 Sammenfatning

Der er således dokumenteret, at der ved en sammenkobling af den umættede og mættede zone, i form af hhv. UZ-Modellen og partikeltracking, kan modelleres nitratkoncentrationer i vandforsyningsboringer. Ved parallelforskydning af gennembrudskurver leveret af UZ-Modellen i samme koordinat for beregningscellen og herefter vægtning med en normaliseret infiltration til grundvandet, er Modelkomplekset opstillet. Det er muliggjort at skelne mellem tid over og under redoxgrænsen, hvorfor det er muligt at medtage nedbrydning i form af denitrifikation som et 1. ordens udtryk.
Resultatet af partikeltrackingen viser, at der flere steder i Sydvest-området ikke forekommer nitratreduktion af det indvundne drikkevand, hvilket er et udtryk for umiddelbar nitratsårbarhed. Det er påvist, at antallet af indsatte partikler ikke har indvirkning på resultatet når antallet af partikler pr. beregningscelle overstiger fem. Antallet af beregningsceller kan reduceres kraftigt ved kortlægning af aktive beregningceller. En tidsbesparende effekt på $\sim$96 %, vurderes til gunst for Modelkompleksets anvendelighed til en stokastisk analyse. Det vurderes, at Modelkomplekset potentielt kan fremskrive nitratkoncentrationer i vandforsyningsboringer og derfor opfylde formålet om at foretage en risikovurdering for vandforsyningen i OSD 1432. På baggrund af det opstillede Modelkompleks udfærdiges en stokastisk analyse, da det konkluderes at den relativt høje parameterusikkerhed kræver håndtering.

Del III

Evaluering af Modelkomplekset

Kapitel 8

Stokastisk analyse

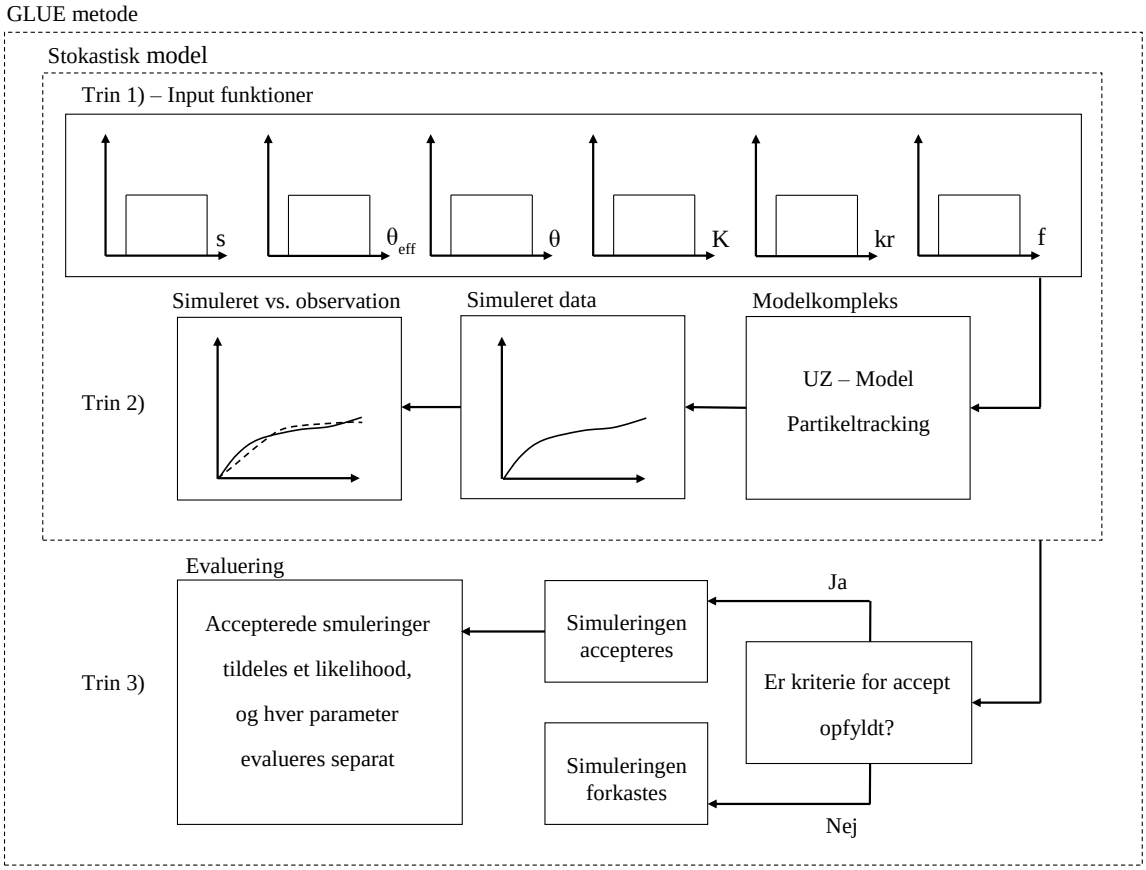
Med baggrund i den omfattende forsimpling af virkelighedens processer for nitrattransport i både den umættede- og mættede zone anvendes Modelkomplekset stokastisk, hvorfor følgende kapitel vil indeholde en stokastisk analyse af Modelkomplekset. Tillagt en relativt stor usikkerhed ved parameterbestemmelse og hertil ikke-unikke løsninger, afskrives muligheden for deterministisk modellering. Det undersøges hvorvidt der med en stokatisk modelleringstilgang, ved benyttelse af Modelkomplekset, kan beskrives målte koncentrationer i vandforsyningsboringer og samtidigt undersøges parameterusikkerhed.

8.1 Formål

Det er formålet med den stokastiske analyse, at evaluere Modelkompleksets evne til simulering af nitratkoncentrationer i udvalgte vandforsyningsboringer. Da Modelkomplekset, som beskrevet, er baseret på en grey box forsimpling af det relativt komplekset naturlige system, vurderes det på forhånd at Modelkomplekset er udfordret på samtlige kategoriserede usikkerheder. Det er tidligere fundet at modellen er anvendelig til stokastisk modellering grundet en begrænset CPU-beregningstid pr. simulering.
Denne uforudsigelighed i det naturlige system kan håndteres ved at simulere Modelkomplekset med flest mulige tilfældigt generede parametersæt, hvor formålet efterfølgende er at belyse usikkerheden ved parameteriseringen. Til dette formål, hvor der ikke indledningsvis kendes en sandsynlighed for hver parameter i Modelkomplekset antages GLUE (*Generalized Likelihood Uncertainty Estimations*) metodologien for særdeles anvendelig.

8.2 Metode

GLUE metodologien anvendes til stokastisk analyse af Modelkomplekset. Metodologien afviger fra princippet om, at der forefindes én unik løsning ved ét parameteroptimum, men i stedet baseres metodologien på, at et givent resultat kan opnås på adskillelige måder. GLUE metodologien anvendes, da det erfaringsmæssigt vides, at forskellige parameterkombinationer kan medføre ensartede resultater, hvorfor forkastelse af tanken om ét parameteroptimum er passende for Modelkompleksets forsimpling af det naturlige system. Det endelig antal simuleringer vides ikke på forhånd men afgøres efter en erfaringsmæssig begrundet vurdering af resultater, hvor princippet om desto flere desto bedre er gældende. De afvigelser, der forekommer mellem de reelle fysiske forhold og modelresultater afhænger af modellens konceptuelle egenskaber, samt de parametre der anvendes. [Jensen, 2009]
Fremgangsproceduren for den anvendte GLUE metodologi er illustreret på figur 8.1 og opbygges af tre trin, jf. Jensen [2009]. Metoden beskrives kort efterfølgende.



Figur 8.1. Oversigt over den anvendte GLUE metodologi. Jensen [2009] #

1. Generering af statistiske parametre til Modelkomplekset. Der genereres et parametersæt, på baggrund af et parameterspænd, udgjort af stejlhedsparameter s, effektiv porøsitet, θ_{eff}, total porøsitet, θ, nedbrydningsrate, K, udvaskningskorrigering, kr og fyldningsgrad, f. Til samplingen af hver parameter er der valgt en uniform fordeling. Uniform fordeling vælges da modelresponsen således ikke vil være påvirket af fordelingen for parametersamplingen og at specifikke områder afdækkes med større densitet. Hvis anden fordeling anvendes forventes det at den bedste model findes hvor fordeling af samplede parametre har størst sandsynlighed, eksempelvis omkring middelværdien for en normalfordeling.
2. Stokastisk simulering af Modelkomplekset ved anvendelse af Monte Carlo sampling af generede parametersæt i trin 1. Dette giver et kriterieløs illustration af resultatstatistik ud fra ethvert givent parametersæt.
3. Evalueringsprocedure af hver enkelt simulering fra trin 2, der efterfølgende rangeres i forhold til overensstemmelsen mellem observeret data og simuleringen. Der opsættes kriterier for, hvornår en simulering er tilstrækkelig nær observeret data til enten at kunne accepteres eller forkastes. Accepterede simuleringer tildeles et likelihood, $\ell(M(\Theta|C_s))$, efter en likelihoodfunktion, hvor hvert parametersæt, Θ til Modelkomplekset, M, antages uafhængigt.

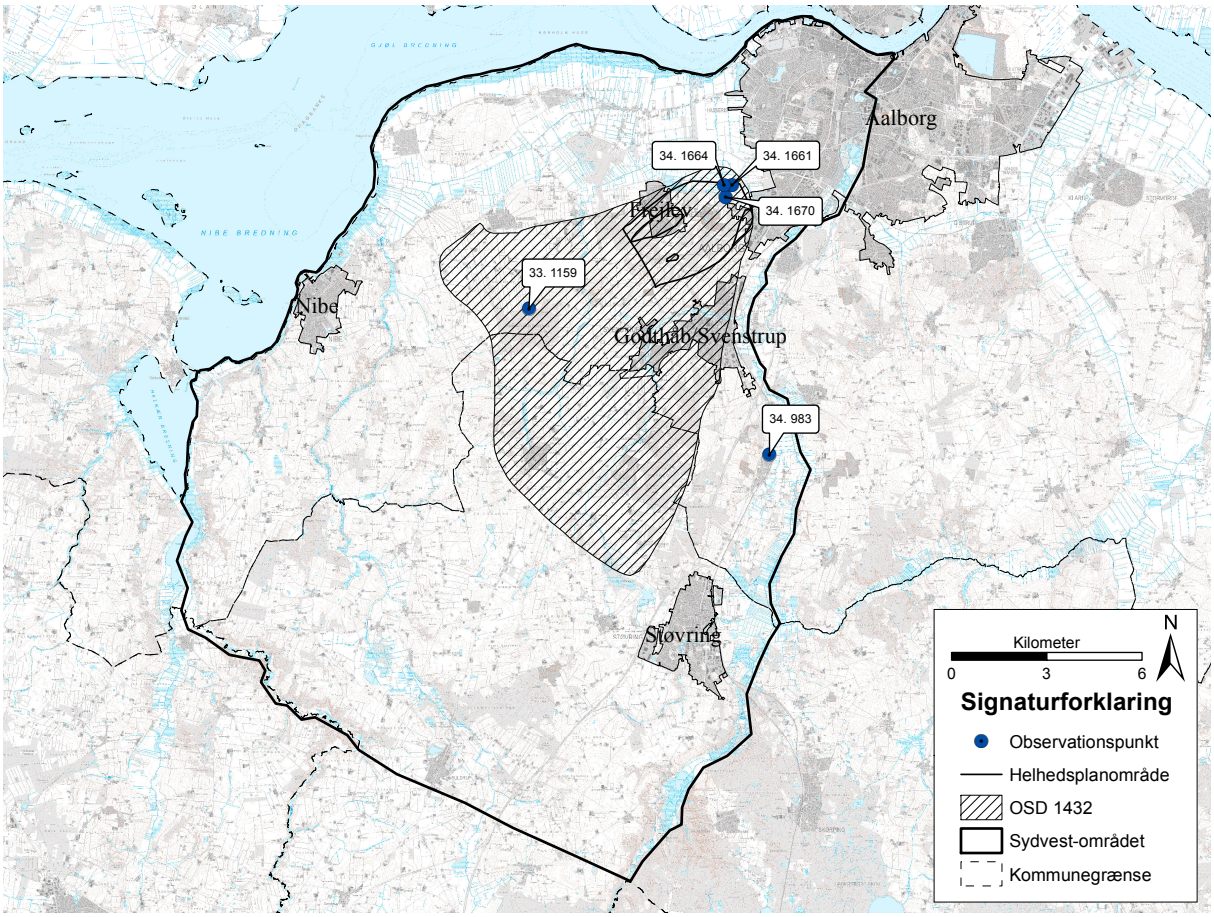
Ved afvigelse mellem modelresultater og målte data, kan der til målingerne tillægges en usikkerhed eftersom de tilgængelige data kan være tvetydige eller problematiske tolkningsmæssigt. Efter fastlæggelsen af, hvordan GLUE-metodologien skal anvendes, vil der i det følgende afsnit præsenteres, hvilke observationspunkter, i form af vandforsyningsboringer, der anvendes til kalibrering af Modelkomplekset.

8.3 Valg af observationspunkter

For Sydvest-området er der udvalgt fem vandforsyningsboringer, hvor alle boringer leverer drikkevand til den almene vandforsyning [GEUS, 2015]. Vandforsyningsboringerne vil fungere som observationspunkter, der anvendes i GLUE analysen til kalibrering af Modelkomplekset. I udvælgelsen af de fem observationspunkter er der lagt vægt på forskelligheden i forhold til;

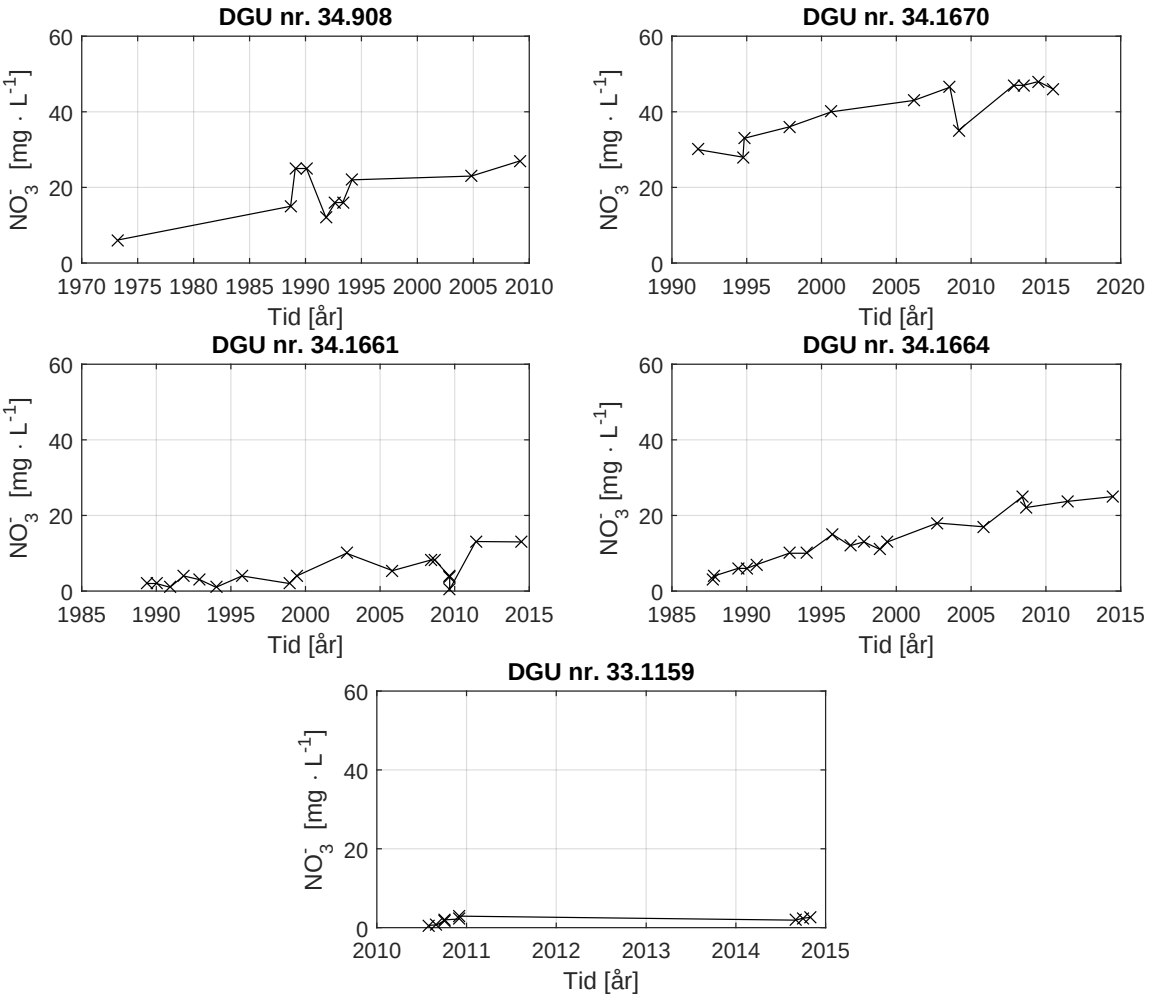
- geografisk beliggenhed
- størrelsen på nitratkoncentrationen
- den tilgængelige nitrathistorik

Den geografiske beliggenhed i Sydvest-området for de udvalgte observationspunkter er illustreret på figur 8.2. Som figuren viser er tre observationspunkter hhv. 34.1670, 34.1661 og 34.1664 beliggende i helhedsplanområdet fordelt på hhv. AKV-Drastrup 1 og 2. Helhedsplanområdet er beskrevet i afsnit 3.2.1 på side 13. Observationspunkt 33.1159 er beliggende ved Sønderholm Plantage leverende til AKV-Nibe og observationspunkt 34.908 til Ellidshøj Vandværk. Alle udvalgte observationspunkter på nær 34.908 er beliggende i OSD 1432.



Figur 8.2. Illustration af beliggenheden for de fem udvalgte observationspunkter.

Den geografiske spredning, som vist på figur 8.2, giver beliggenheden mulighed for verificering af Modelkomplekset anvendelighed på større skala. Dette til trods for at arealanvendelsen, den geologiske lagdeling og infiltrationsmønsteret varierer på regional skala. Observationspunkterne omkring Drastrup er desuden valgt på baggrund af AKV-Drastrup 1 og 2 leverance af forholdsvis betydelige mængder drikkevand til Aalborg Kommune, hvorfor Drastrupområdet er et særligt relevant område at kunne beskrive. Nitratkoncentrationen samt nitrathistorikken for hver observationspunkt er illustreret på figur 8.3.



Figur 8.3. Illustration af tidsserie for nitratudviklingen i fem observationspunkter i Sydvest-området. Vandforsyningsboring med DGU nr. 34.1661 og 34.1664, 34.1670, 34.908 og 33.1159. Se figur 8.2 for placering.

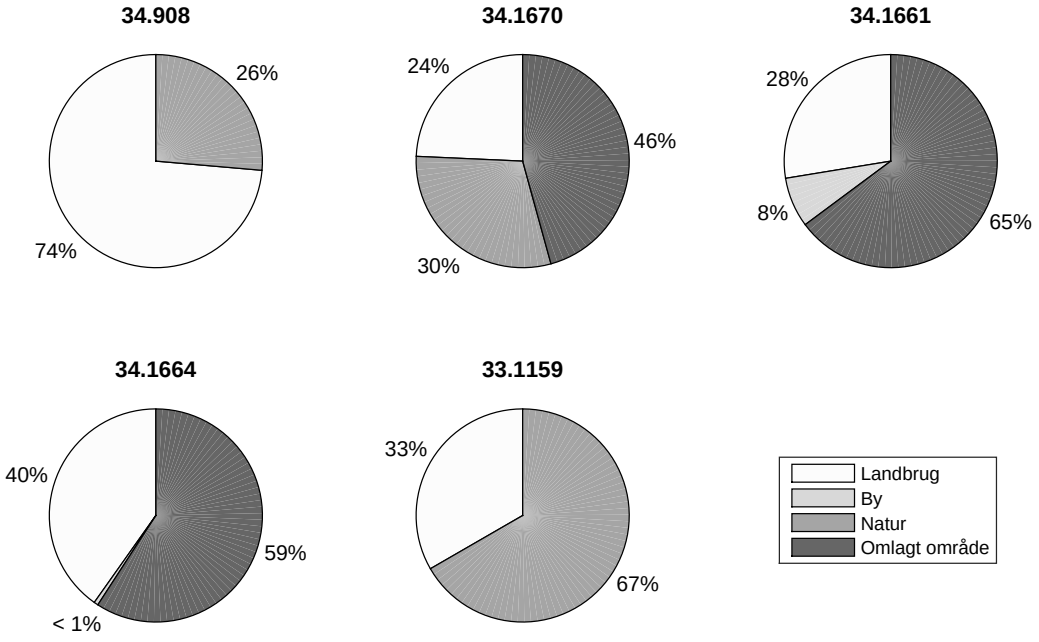
Det bemærkes af figur 8.3, hvorledes der forekommer relativt markante forskelle i den tilgængelige nitrathistorik. Gældende for de fem observationspunkter er at både den målte nitratkoncentration, antal nitratmålinger, interval mellem nitratmålinger, og perioden for tilgængelig nitratmålinger er forskellige. Tabel 8.1 viser en opsummerende beskrivelse af observationspunkterne og dertilhørende nitratdata. Alle data er udtrukket af Jupiter XL-databasen fra GEUS [2015].

Tabel 8.1. Filtersætningsinterval, den maksimale og minimale målte nitratkoncentration, antal målinger, måleperiode og tendens for nitratkoncentrationen for observationspunkterne. [GEUS, 2015].

DGU nr.		**34.908**	**34.1670**	**34.1661**	**34.1664**	**33.1159**
Filtersætning	[m.u.t.]	25,0 - 66,0	Ej opgivet	56,5 - 74,5	49,0 - 64,0	74,4 - 86,4
N_{obs}	[–]	10	12	18	18	9
Måleperiode	[år]	1973 - 2009	1991 - 2015	1989 - 2014	1987 - 2014	2010 - 2014
Min. NO_3^-	$[mg \cdot L^{-1}]$	6,10	28,00	0,46	3,00	0,57
Maks. NO_3^-	$[mg \cdot L^{-1}]$	27,00	48,00	13,10	24,90	2,92
Tendens	[–]	Stigende	Stigende	Stigende	Stigende	Ingen

Følgende beskrivelse baseres på en grafisk betragtning af nitrathistorikken ved figur 8.3 og værdier præsenteret i tabel 8.1. Det bemærkes af tabel 8.1 at der for observationspunkt 34.1661 er målt en maksimal og minimum nitratkoncentration på hhv. 13,10-0,46 $mg \cdot L^{-1}$ på baggrund af 18 målepunkter.

Den generelle tendens for hele måleperioden vurderes til at være stigende selvom nitratkoncentrationen i 2010 falder relativt meget. Dette fald kan skyldes en variation i indvindingsmængden fra netop denne vandforsyningsboring, hvilket kan give fluktuationer i nitratkoncentrationen. Der er ved de to efterfølgende målinger målt omkring 13,00 $\mathrm{mg} \cdot \mathrm{L}^{-1}$.
Observationspunkt 34.1664 er som førnævnte ligeledes stigende baseret på 18 målepunkter. Der måles nitratkoncentrationer i intervallet fra 3,00-24,90 $\mathrm{mg} \cdot \mathrm{L}^{-1}$.
I observationspunkt 34.1670 måles nitratkoncentrationer af stigende karakter og generelt måles et høj indhold af nitrat og af de fem observationspunkter den, hvor der er målt den højeste nitratkoncentration. Ligeledes foreligger der ikke uforklarlige nitratmålinger eller fluktuationer, hvilket kan skyldes at vandforsyningsboringen har en betragtelig og jævn indvindingshistorik.
Ved observationspunkt 34.908 er der ligeledes som for de tre førnævnte en stigende tendens i nitratkoncentrationen og hele måleperioden, med en minimum koncentration på 6,10 $\mathrm{mg} \cdot \mathrm{L}^{-1}$ og en maksimal koncentration på 27,00 $\mathrm{mg} \cdot \mathrm{L}^{-1}$. Omkring år 1990 er der foretaget relativ mange nitratmålinger sammenlignet med resten af måleperioden, hvilket sandsynligvis skyldes ændringer i pumpehistorikken. Dette har sandsynligvis givet et fald i koncentrationen og efterfølgende er koncentrationen steget igen ved normal oppumpning. Dette bekræftes af relativt store fluktuationer i indvindingen i netop denne periode fra 40 000-80 000 $\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{år}^{-1}$ jf. GEUS [2015]. Der foreligger generelt ingen tilknyttede bemærkninger til nitratmålingerne for observationspunkterne med hensyn til pumpehistorikkens påvirkning på målingerne.
Det sidste observationspunkt er 33.1159, hvor der påvises en relativt lav eller ingen nitratkoncentration over hele måleperioden. Det vurderes ved en visuel betragtning, at der ikke forekommer en tendens i udviklingen af nitratkoncentration.
For de valgte observationspunkter forekommer der, jf. tabel 8.1, relativt stor variation i maksimal koncentration for 33.1159 og 34.1670. For observationspunkt 33.1159 påvises ingen stigende tendens i nitratkoncentrationen, samtidigt med der ikke måles koncentrationer i nærheden af grænseværdien. Observationspunkt 34.1670 tangerer grænseværdien for nitrat i drikkevand på 50 $\mathrm{mg} \cdot \mathrm{L}^{-1}$. Der forekommer desuden en stigende tendens for de tre øvrige observationspunkter, hvorfor det ud fra en umiddelbar betragtning vurderes at grænseværdien for fire af observationspunkterne på nær 33.1159 potentielt kan overskrides i fremtiden. Desuden forekommer der forskelle i, hvorledes arealet anvendes i de grundvandsdannende oplande for de respektive observationspunkter. Arealfordelingen findes på figur 8.4.



Figur 8.4. Fordeling af arealanvendelse for udvalgte observationspunkter.

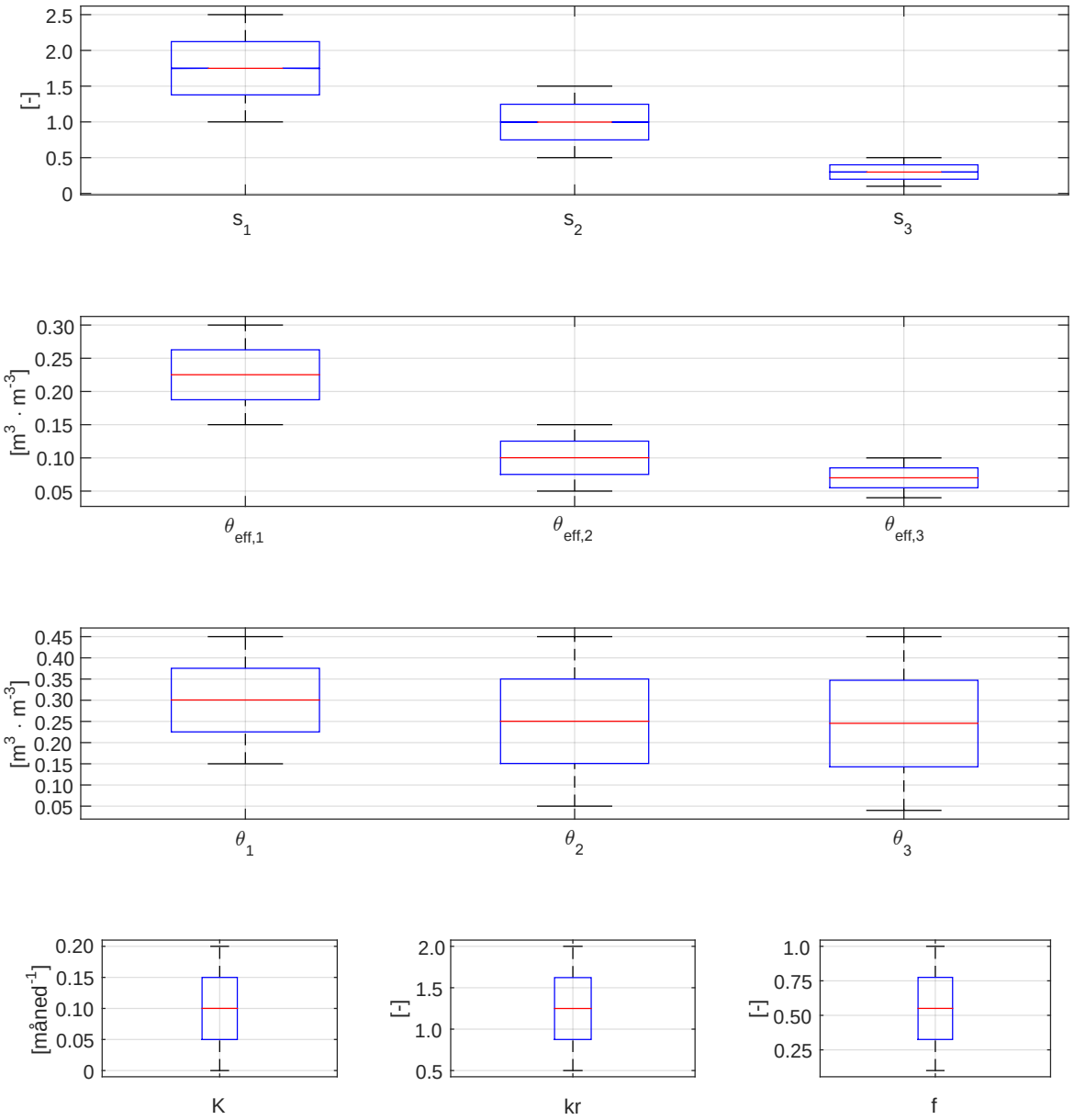
Det bemærkes af figur 8.4 at oplandene hovedsageligt består af natur og landbrug. Vandforsyningsboringerne beliggende ved Drastrup indvinder fra år 2000 i overvejende grad fra naturområder. Desuden bemærkes det, at de grundvandsdannende oplande var udprægede landbrugsområder inden omlægningen, hvilket bekræfter de relativt høje målte koncentrationer ved AKV-Drastrup. Observationspunkt 34.908 er indbefattet af et opland udgjort af landbrug, hvilket kan være til potentiel risiko for overskridelse af grænseværdien for nitrat i drikkevand. Omvendt ved observationspunkt 33.1159 tilknyttet AKV-Nibe, hvor størstedelen af det grundvandsdannende opland er udgjort af natur.

Det vurderes at differencen i observationspunkternes difference i nitrathistorik, placering og arealanvendelse tester Modelkompleksets egenskaber i simulering af både relative lave og høje nitratkoncentrationer for forskellige måleperioder og over forskellige tidsperioder. Ved anvendelse af disse observationspunkter forventes et nuanceret resultat, der afspejler i hvilken grad Modelkomplekset kaperer simulation af nitratkoncentrationer i grundvandet for Sydvest-området på regional skala. Observationspunkterne til kalibreringen af Modelkomplekset er således beskrevet og fastlagt, hvilket tillader at igangsætte første trin i GLUE-analysen, som udfærdiges i følgende afsnit.

8.4 Sampling af parametersæt

Inden igangsættelsen af simuleringer i Modelkomplekset er det nødvendigt at fastlægge et antal tilfældigt genererede parametersæt for hver simulering. For den stokastiske analyse opsættes et antal N_{sim}=100.000 Monte Carlo simuleringer. For hver simulering tilknyttes ét specifikt parametersæt, hvorfor der er samplet 100.000 tilfældige parametersæt til afdækning af kombinationsmuligheder. I parametersamplingen er der anvendt en uniform fordeling, for at sikre at hver værdi for hver parameter i parameterspændet forekommer med samme sandsynlighed. Der anvendes uniform fordeling på baggrund af manglende konkret viden til anvendelse af mere statistisk specifik fordeling.
Figur 8.5 illustrerer samtlige samplede parametersæt der anvendes i Modelkomplekset, hvor parameterspændet og sandsynligheden til hver værdi er illustreret.

Parameterspændet for stejlhedsparameteren, effektiv porøsitet og totalporøsiteten tager udgangspunkt i figur 6.12 på side 51 da dette spænd, giver et erfaringsmæssigt estimat for en realistisk forekommende transporthastighed i den umættede zone. Det skal bemærkes at der anvendes samme totalporøsitet i den hhv. mættede og umættede zone. Totalporøsiteten anvendes som nævnt i den mættede zone i det beskrevne spænd til at tage højde for tilbageholdelse.
Det forventes at kombinationen af opholdstiden under redoxgrænsen og nedbrydningsraten har relativt stor betydning for slutkoncentrationen af nitrat ved observationspunkterne. Eftersom at nedbrydningsraten er afhængig af iltforholdene under redoxgrænsen og tilgængeligheden af organisk stof, er spændet for nedbrydningsraten fastlagt til et relativt stort spænd med en maksimal halveringstid på 100 døgn.



Figur 8.5. Parametersampling, vist ved boksplots, for alle parameter, der anvendes i Modelkomplekset med tilhørende parameterspænd. Den horisontale akse viser parameteren, hvor den vertikal akse viser parameterspænde.

Det bemærkes af figur 8.5, hvorledes der indføres en parameter kr. Parameteren fungerer som korrigering for koncentrationen for nitratudvaskningen for alle typekurver vist i figur 6.10 på side 47. Udvaskningskorrigeringen indfæres, da det vurderes at fastlæggelse af én typekurve for hhv. landbrug, by og natur er særligt usikker, da det må forventes at udvaskningskoncentration i det naturlige system vil varierer i større grad. Udvaskningskorrigeringen anvendes som en faktor der multipliceres med hver typekurve for nitratkoncentrationen i udvaskningen, således det er muligt at forøge eller reducere hele tidsserien for Sydvest-området. Parametersamplingen for udvaskningskorrigeringen, kr, spænder, grundet den relativt store usikkerhed for nitratkoncentrationen i udvaskningen i intervallet fra 0,5 til 2,0. Dette vil medføre at nitrathistorikken for typekurverne maksimalt reduceres med 50 % og forøges med 100 %. Det relativt grove parameterspændet anvendes for at kunne afdække den usikkerhed, der ligger i anvendelse af en landsdækkende nitrathistorik på regional skala.

Som beskrevet i afsnit 6.4.1 på side 40 anvendes fyldningsgraden, f, til kontrol af aktivering og deaktivering af sprækker i det dobbelt porøse medium. Fordi usikkerheden og manglende kendskab vedrørende aktiviteten i kalksprækkerne er relativt stort, fastlægges et markant parameterspænd for

fyldningsgraden på 0,1 til 1,0.
Det første trin i GLUE-analysen er således beskrevet, hvorfor trin 2 kan igangsættes. Eftersom at trin 2 indbefatter at Modelkomplekset skal igangsættes med at simulere gennembrudskurver, på baggrund af præsenterede parameter i figur 8.5, beskrives denne proces ikke nærmere da dette udelukkede er en beregningsproces. Der genereres startbetingelser for Modelkomplekset ved simulering af én simuleringsperiode på 60 år fra 1955-2015 med et gennemsnitligt parametersæt, således vandstanden og nitratkoncentrationen i hvert reservoir i den umættede zone er stabiliseret. For at kunne evaluere overensstemmelsen mellem simuleret og observeret data er det nødvendigt at opsætte kriterier for, hvornår en simulering bliver accepteret eller forkastet. Det følgende afsnit vil omhandle fastlæggelsen af kriterier for denne sortering samt sandsynlighedsfunktioner der anvendes til evaluering af hver accepteret simulering.

8.5 Evaluering af Monte Carlo simuleringer

Likelihood anvendes som et mål for, hvor acceptabelt Modelkomplekset, med et givent parametersæt, fitter observationssæt ved udvalgte vandforsyningsboringer. De udvalgte vandforsyningsboringers placering samt målte nitratkoncentrationer er vist på hhv. figur 8.2 og 8.3 på side 74. Da der ikke forekommer kontinuerte tidsserier for nitrat i vandforsyningsboringer, vil likelihood vægte højest, i perioder hvor der foreligger et relativt højt antal målinger i en vandforsyningsboring. Der sorteres ikke i målte nitratkoncentrationer for observationspunkterne, for at bevare et objektivt udgangspunkt.
Der forefindes i midlertid en række forskellige metoder til beregning af likelihood, hvor valget ofte vil være subjektivt betonet, hvorfor flere metoder undersøges. Det udvælges i nærværende rapport at evaluere resultater for Modelkomplekset efter følgende metoder:

- Metode 1: Limits of Acceptability [Lui et al., 2009]
- Metode 2: Trapezodial Fuzzy Likelihood [Jensen, 2009]
- Metode 3: Nash-Sutcliffe Efficiency [Krause et al., 2005]

Forinden der kan opstilles likelihoodfunktioner opstilles acceptkriterier for modellens evne til at beskrive nitratkoncentrationer. Fastlæggelsen af et acceptkriterie er afgørende for med hvilken usikkerhed modellen simulerer målte nitratkoncentrationer, for at en simulering benævnes som accepteret. Acceptkriterierne kan tilpasses, således en ønsket procentsats af de samlede simuleringer accepteres for alle tre metoder. Det er derfor essentielt at undersøge med hvor stor sikkerhed modellen kan simulere nitratkoncentrationer. Det er ønskværdigt, at modellen skal opfylde strengest mulige krav, samtidigt med der kan spores tendenser i parametersættene. I det følgende vil metoder for forskellige anvendte acceptkriterier beskrives.

8.5.1 Acceptkriterier

For koncentrationsmålinger af nitrat i vandforsyningsboringer foreligger en række usikkerheder og målefejl. Derfor tillægges en margin for, hvor stor usikkerhed der vurderes at ligge i hver enkelt måling. Dette gøres for at sikre, at et udmærket model-fit ikke afvises på baggrund af datausikkerhed og fejl. Grænserne for acceptabilitet kan tilpasses og justeres således modellen viser acceptabel adfærd i output, hvilket så kan give en indikator på om usikkerheden kan tilskrives i måledata eller strukturel usikkerhed i modellen. Det må antages, at Modelkomplekset, vil have vanskeligheder i beskrivelse af store fluktuationer i nitratkoncentrationen, hvorfor det er forventeligt, at modellen vil have strukturelle udfordringer, som kræver undersøgelse. Det vurderes at boringer med en forholdsvis lav indvindingsmængde vil have større grad af påvirkning fra modellens afvigelser fra reel pumpehistorik sammenlignet med områdets mere centrale vandforsyningsboringer. I det følgende vil acceptkriterier for metode 1, 2 og 3 opsættes.

Metode 1 og 2

Der anvendes for metode 1 og 2 samme acceptkriterier før en simulering kan klassificeres som accepteret, hvilket vil medføre direkte, at samme simuleringer vil blive accepteret for begge metoder. Dette gøres med henblik på at undersøge, hvorledes der forekommer differens på anden vis i resultatevalueringen på baggrund af samme accepterede simuleringer. Der defineres en standartafvigelse, σ , hvilket tilskrives måleusikkerhed i vandforsyningsboringen. Standartafvigelsen, σ fastsættes til en maksimalværdi på $5\,\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}$. Acceptkriteriet fastsættes dog til den dobbelte standartafvigelse svarende til $10\,\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}$. Dette skyldes, at der kan forekomme strukturelle elementer som Modelkomplekset ikke evner at beskrive. Det vurderes acceptabelt, at der for hver tidsserie potentielt forekomme maksimalt én afvigelse fra en måling større en acceptkriteriet. Kriteriet er gældende for alle fem udvalgte observationspunkter, hvilket akkumuleret set vil medføre maksimalt fem målinger, med større afvigelse end den dobbelte standartafvigelse. Er en simulering accepteret tildeles denne et likelihood afhængigt af tilhørsgraden til målingen.

Metode 3

Metoden adskiller sig fra de to tidligere metoder ved at der ikke defineres en såkaldt standartafvigelse som acceptkriteriet. I stedet fastsættes krav for den beregnede likelihood. Således forekommer frasorteringen efter, at der er beregnet et likelihood for alle simuleringer, hvilket er omvendt i forhold til metode 1 og 2. Det tildelte likelihood kan variere mellem $-\infty$ til 1, alt efter, hvor godt simuleringen fitter tidsserien for observationerne. Et fit på 1 betyder at simuleringen er lig med observations, og at der er en perfekt overensstemmelse med tidsserien for simuleringen og observationen. Hvis det tildelte likelihood er lig med 0 vil tidsserien være lig middelværdien af observationen og vil derfor, alt efter om simuleringen er over eller under nul være bedre eller ringere end middelværdien af observationerne. Det bestræbes at simuleringerne skal være mere nøjagtig i forhold til middelværdien af observationerne, hvorfor et acceptkriteriet fastlægges til 0,20.

8.5.2 Evalueringsmetoder

I de følgende afsnit vil hver metode for tildeling af likelihood blive beskrevet. Desuden vil interferensen, hvilken definerer hvorledes de fem udvalgte observationspunkter påvirkes indbyrdes, blive introduceret.

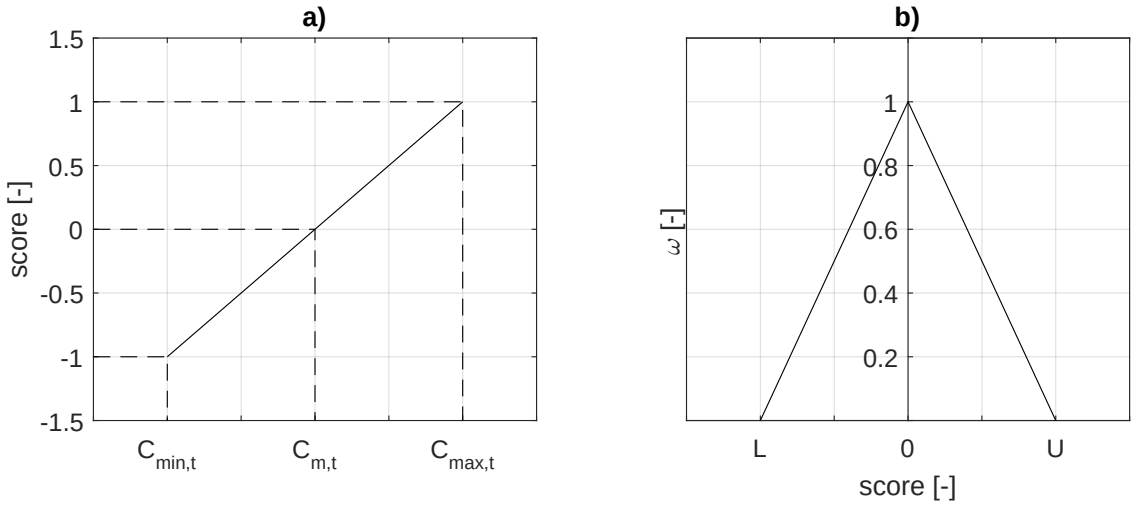
Metode 1

Som et mål for likelihood anvendes tilgangen *Limits of acceptability* af Lui et al. [2009] og efter Johansen [2011], hvilken bl.a. baseres på en Fuzzy Logik metode med triangulær beregning af likelihood. Der beregnes et likelihood for hver måling i hvert observationspunkt, hvilket omregnes til en gennemsnitlig global likelihood for alle udvalgte observationspunkter.
Metode 1 basers på at normalisere en *score* som et udtryk for, hvor tæt en simulation er på en måling i . Den normaliserede *score* vil være 0, hvor målingen og simulation opnår optimalt fit, -1 ved den nedre grænse for acceptabilitet og 1 ved den øvre grænse for acceptabilitet. Scoren beregnes lineært, på hver side af 0 ved bedste fit, som vist ved formel (8.1a) og (8.1b).

$$score(i) = \begin{cases} (C_{s,i} - C_{m,i})/(C_{m,i} - C_{m,min,i}) & C_{s,i} < C_{m,i} \quad (8.1a) \\ (C_{s,i} - C_{m,i})/(C_{m,max,i} - C_{m,i}) & C_{s,i} \geq C_{m,i} \quad (8.1b) \end{cases}$$

hvor:

score	Score	$[-]$
i	Måling	$[-]$
C_s	Simuleret nitratkoncentration ved vandforsyningsboring	$[\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}]$
C_m	Observeret nitratkoncentration ved vandforsyningsboring	$[\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}]$
$C_{m,min}$	Nedre niveau for nitratkoncentration	$[\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}]$
$C_{m,max}$	Øvre niveau for nitratkoncentration	$[\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}]$



Figur 8.6. Principskitse for beregning af hhv. score a) og vægtet score b) for Metode 1.

Ved anvendelse af formel (8.1a) fås en score $= -1$ ved nedre grænse for acceptabilitet og af (8.1b) en score $= 1$ ved øvre grænse, som vist på figur 8.6. Simuleringer med ringere modelfit end acceptabelt, vil have en score < -1 ved underestimering og en score > 1 ved overestimering. Der indføres en fraktil ved øvre og nedre grænse for acceptabilitet. Heraf accepteres simuleringer med en score for nedre fraktil, $\mathrm{L} \geq -1$ og øvre fraktil $\mathrm{U} \leq 1$. For en accepteret simulering med et givent parameterset indføres en vægtning, ω. Vægtningen beregnes som vist ved formel (8.2a)-(8.2c).

$$\omega_i(\Theta|C_{s,i}) = \begin{cases} (score(i) - L)/abs(L) & L \leq score(i) < 0 \quad (8.2a) \\ (U - score(i))/abs(U) & 0 \leq score(i) < U \quad (8.2b) \\ 0 & score(i) \notin (L,U) \quad (8.2c) \end{cases}$$

hvor:

ω	Vægtet score	$[-]$
Θ	Parametersæt	$[-]$
L	Nedre grænse for acceptabilitet	$[-]$
U	Øvre grænse for acceptabilitet	$[-]$

Jf. formel (8.2a)-(8.2c) vil der opnås en vægtet score $\omega = 1$ hvis og kun hvis der er fuldkommen overensstemmelse mellem måling og simulering. $\omega = 0$ vil forekomme, hvis scoren ikke er indeholdt i eller ved grænsen for acceptabilitet. Metoden er grafisk illustreret på figur 8.6.

Hernæst kan et gennemsnitligt likelihood for hele tidsserien beregnes som en middelværdi af de vægtede sandsynligheder for de accepterede simuleringer, jf. formel (8.3).

$$\ell_p(\Theta|C_{s,p}) = \frac{1}{T}\sum_{i=1}^{T}\omega_i(\Theta|C_{s,i}) \tag{8.3}$$

ℓ_p	Likelihood for observationspunkt p	$[-]$
p	Observationspunkt	$[-]$
T	Antal målinger for p	$[-]$

Formel (8.3) er et mål for, med hvor stor likelihood simuleringen med et givent parametersæt, Θ, fitter alle observerede nitratkoncentrationer i én specifik vandforsyningsboring.
Der opsættes et mål for, hvor godt Modelkomplekset, M, fitter de observerede målinger til enhver vandforsyningsboring globalt. Det globale likelihood beregnes således ud fra et midlet likelihood for hver vandforsyningsboring. Udtrykket er et mål for, med hvilket likelihood ved et givent accepteret parametersæt, Θ, simuleringen fitter samtlige vandforsyningsboringer. Det globale likelihood beregnes ved formel (8.4).

$$\ell_{global}(M(\Theta|C_s)) = \frac{1}{N}\sum_{p=1}^{N}\ell_p(\Theta|C_{s,i}) \tag{8.4}$$

hvor:

ℓ_{global}	Globalt likelihood	$[-]$
N	Antal observationspunkter	$[-]$

Af formel (8.4) bemærkes, hvorledes der ud fra det vægtede likelihood beregnes et midlet global likelihood på baggrund af alle vandforsyningsboringer. Eftersom det globale likelihood for en simulering er beregnet ved et gennemsnitlig likelihood for hvert observationspunkt, vil alle observationspunkter vægte ens globalt uanset antallet af målinger. Dette antages fordelagtig, når der ikke er lige mange målinger for alle vandforsyningsboringer.

Metode 2

Følgende metode baseres på en traditionel statistisk *Fuzzy Logic* tilgang, hvor der anvendes en relativt simpel beregningsmetode til bestemmelse af likelihood, hvor hver simulering tildeles en tilhørsgrad i form af et punktbaseret likelihood til målingen. Metoden baseres som nævnt på samme standartafvigelse som metode 1. Der anvendes i metode 2 en trapezformet likelihoodfunktion, hvilken anvendes på målingsniveau for hver udvalgt vandforsyningsboring. Beregningsmetoden er opstillet i formel (8.5).

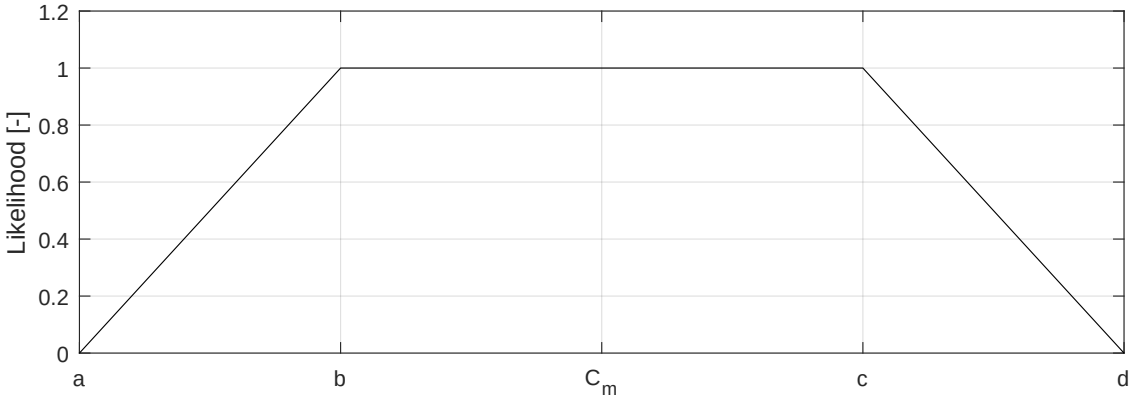
$$\ell_i(\Theta|C_{s,i}) = \frac{(C_{s,i}(\Theta)-a)}{b-a}\cdot I_{a,b}(C_{s,i}(\Theta)) + I_{b,c}(C_{s,i}(\Theta)) + \frac{(d-C_{s,i}(\Theta))}{d-c}\cdot I_{c,d}(C_{s,i}(\Theta)) \tag{8.5}$$

Formel (8.5) anvender tre separate beskrivelser af hældningen for likelihoodfunktionen, da der anvendes en trapezform, som vist på figur 8.7, hvor:

$$I_{a,b} = \begin{cases} 1 & a \leq (C_{s,i}(\Theta)) \leq b \\ 0 & \text{ellers} \end{cases}$$

$$I_{b,c} = \begin{cases} 1 & b \leq (C_{s,i}(\Theta)) \leq c \\ 0 & \text{ellers} \end{cases}$$

$$I_{c,d} = \begin{cases} 1 & c \leq (C_{s,i}(\Theta)) \leq d \\ 0 & \text{ellers} \end{cases}$$



Figur 8.7. Principskitse for beregning af likelihood for Metode 2.

Det skal tilknyttet at værdien a og d svarer til hhv. det negative og positive acceptkriterie, mens c og d svarer til den negative og positive standartafvigelse. Det bemærkes af formel (8.5), at der ved afvigelser mindre end standartafvigelsen vil beregnes et likelihood på 1. Ved en simulering med afvigelse større end standartafvigelsen vil der forekomme et lineært aftagende likelihood mod 0 til acceptkriteriet. Ud fra hver observering til én specifik vandforsyningsboring beregnes et gennemsnitligt likelihood jf. formel (8.6).

$$\ell_p(\Theta|C_{s,i}) = \frac{1}{T}\sum_{i=1}^{T} \ell_i(\Theta|C_{s,i}) \tag{8.6}$$

Formel (8.6) anvendes for alle de udvalgte vandforsyningsboringer, hvorfor der afslutningsvis er tildelt ét likelihood pr. vandforsyningsboring for hver simulering.
Der anvendes i metode 2 en produktbaseret metode til bestemmelse af globalt likelihood. Det globale likelihood beregnes i metode 2 efter følgende formel (8.7).

$$\ell_{global}(M(\Theta|C_s)) = \prod_{p=1}^{N} \ell_p(\Theta|C_{s,i}) \tag{8.7}$$

Jf. formel (8.7) vil responsfladen for globalt likelihood blive relativt stejlere, des flere observationspunkter der udvælges. Sammenlignet med metode 1 vurderes det fordelagtigt at anvende en restriktiv interferens, da der potentielt kan spores tendenser, som ikke spores ved en gennemsnitlig interferens.

Metode 3

Den tredje og sidst anvendte metode til evaluering af Monte Carlo simuleringerne er NSE, *Nash-Sutcliffe Efficiency*. Traditionelt bestemmes Nash-Sutcliffe Efficiency index, E_f, som statistisk værktøj til beregning af hvor godt modellen fitter målinger. I nærværende rapport anvendes likelihood som direkte oversættelse for NSE index med forbehold for, at der ikke direkte kan sammenlignes værdier for likelihood mellem metode 3 og de øvrige evalueringsmetode. Metoden til beregning af likelihood for hver vandforsyningsboring ved NSE er opstillet i formel (8.8).

$$\ell_p(\Theta|C_s) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{T}(C_{m,i} - C_{s,i}(\Theta))}{\sum_{i=1}^{T}(C_{m,i}) - \overline{C_m}} \tag{8.8}$$

Det bemærkes af formel (8.8), hvordan en simulering der tildeles et likelihood på 0, vil udgøre samme præcision som en middelværdi af den samlede tidsserie for den specifikke vandforsyningsboring. Det bemærkes ligeledes, hvordan udtrykket går mod minus uendeligt, når alle målinger er lig middelværdien for samme tidsserie. Dette betyder, udtrykket ikke er i stand til at give en retmæssig evaluering af et vandforsyningsboring med en konstant nitratkoncentration. Derfor kan der ikke indrages vandforsyningsboringer uden påvisning af nitrat, hvis metode 3 skal anvendes til evaluering af Monte Carlo simuleringerne. Dette er som vist i figur 8.3 på side 74 ikke tilfældet for nogle af de 5 udvalgte vandforsyningsboringer, hvorfor scenariet ikke optræder i nærværende rapport ved anvendelse af NSE som et evalueringsværktøj.
På samme vis som for metode 1 og 2 skal der for metode 3 fastsættes en interferens mellem hver af de valgte vandforsyningsboringer. Der vælges at anvende et gennemsnit af alle sandsynligheder, hvorfor formel (8.9) er gældende.

$$\ell_{global}(M(\Theta|C_s)) = \frac{1}{N}\sum_{p=1}^{N}\ell_p(\Theta|C_s) \tag{8.9}$$

Det bemærkes at beregningsmetoden for det globale likelihood i formel (8.9) er sammenfaldene med metode 1 beskrevet ved formel (8.4). Det vurderes at metode 3 er restriktiv i en sådan grad, at der ikke videre overvejes at anvende andre metoder til bestemmelse af det globale likelihood.
Det vurderes at de tre præsenterede evalueringsmetoder er i stand til at belyse usikkerhederne i Modelkomplekset. I det følgende afsnit vil alle de præsenterede evalueringsmetoder blive anvendt og analyseret på baggrund af de udførte Monte Carlo simuleringer, hvilket er tredje og sidste trin i GLUE analysen.

8.6 Kalibrering og parameterusikkerhed

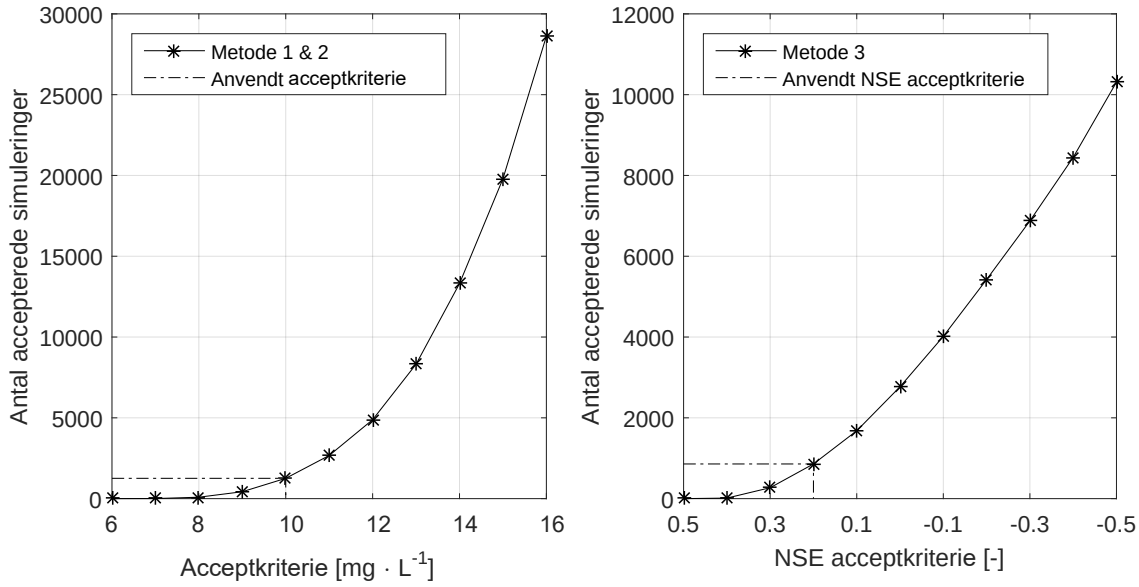
I det følgende afsnit vil resultaterne for GLUE analysen indeholdende de tre opstillede evalueringsmetoder præsenteres. Resultaterne er baseret på de opstillede parametersæt, hvor hver tilknyttes en Monte Carlo simulering. Boksplottene for parametrene forefindes i figur 8.5 på side 77.
Indledningsvis undersøges, hvorvidt de opstillede acceptkriterier for de tre metoder, giver et godkendt antal accepterede simuleringer. Hernæst opstilles en grafisk visualisering af det modellerede koncentrationsforløb i de fem udvalgte observationspunkter til kalibrering. På baggrund af de accepterede

simuleringer udarbejdes *Dotty plots* for alle samplede parametre således sporing af tendenser muliggøres. Hertil undersøges parametersensitivitet. Afslutningsvis undersøges det, hvorvidt der forekommer korrelation mellem parametrene i Modelkomplekset. For de tre metoder til evaluering fås følgende antal accepterede simuleringer præsenteret i tabel 8.2.

Tabel 8.2. Antal accepterede simuleringer til de udvalgte observationspunkter ved 100.000 Monte Carlo simuleringer for beskrevne evalueringsmetoder.

Metode	**1** Limits of Acceptability	**2** Fuzzy Logic	**3** Nash-Sutcliffe Efficiency
Interferens	Middel	Produkt	Middel
Acceptkriterie	$\lvert C_{m,i} - C_{s,i} \rvert \leq 10\,\mathrm{mg \cdot L^{-1}}$	$\lvert C_{m,i} - C_{s,i} \rvert \leq 10\,\mathrm{mg \cdot L^{-1}}$	$0{,}2 < \ell_{\mathrm{global}}$
N_{obs}	67	67	67
N_{acc}	1256	1256	858

Det bemærkes af tabel 8.2, hvorledes der forekommer samme antal accepterede simuleringer for både metode 1 og 2. Dette grundes som nævnt i at der opsættes samme acceptkriterie for begge metoder, hvorfor resultatet er forventeligt. Det er ligeledes bemærkelsesværdigt, at metode 3 accepterer færre simuleringer end metode 1 og 2. Andelen af accepterede simuleringer for alle metoder i forhold til det totale antal simuleringer er dog af samme størrelsesorden, hvor omtrent én procentdel af de samlede simuleringerne accepteres. Illustration af, hvorledes antallet af accepterede simuleringer er afhængig af acceptkriteriet er illustreret på figur 8.8.

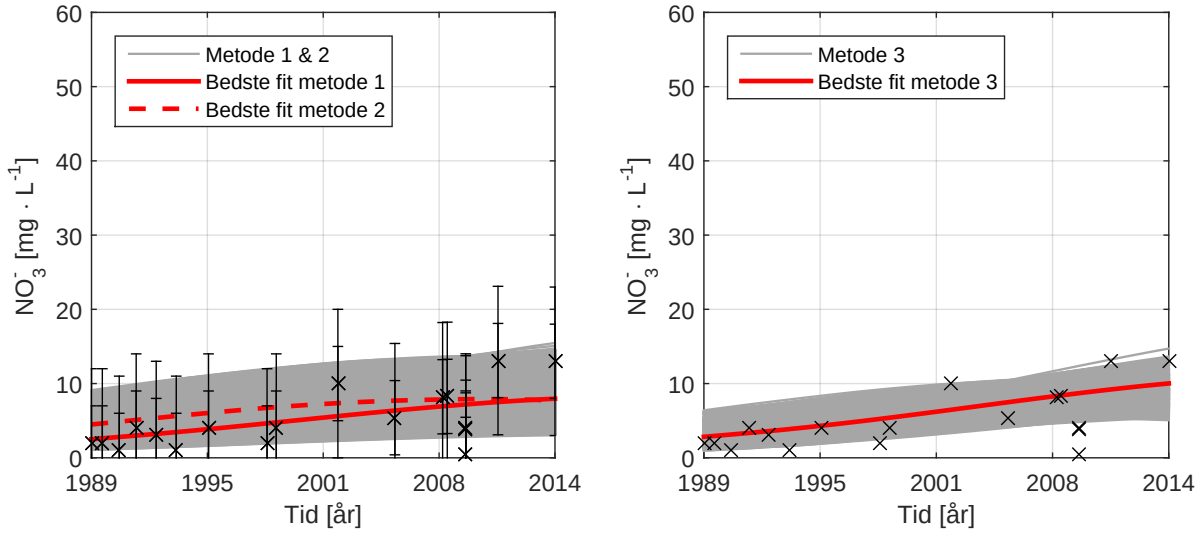


Figur 8.8. Antal accepterede simuleringer som funktion af acceptkriterie. Metode 1 og 2 (venstre). Metode 3 (højre).

Af figur 8.8 bemærkes at der ved anvendelse et acceptkriterie for målepunktet mindre end $6\,\mathrm{mg \cdot L^{-1}}$ ikke forekommer accepterede simuleringer for metode 1 og 2. Modelkomplekset kan altså ikke prædiktere med en sådan sikkerhed, hvorfor et acceptkriterie på målingen på $10\,\mathrm{mg \cdot L^{-1}}$ potentielt kan give en afbildning af parameterusikkerheden, men også den strukturelle usikkerhed. Det bemærkes ligeledes, for alle metoder, hvorledes antallet af accepterede simuleringer stiger eksponentielt ved lempelse af de respektive acceptkriterier. Resultaterne for metode 3 viser på samme måde som for metode 1 og 2, at der forekommer et acceptkriterie for metode 3, hvor omtrent én procentdel af simuleringerne accepteres. De valgte acceptkriterier for metode 1, 2 og 3 bevares i det videre forløb.

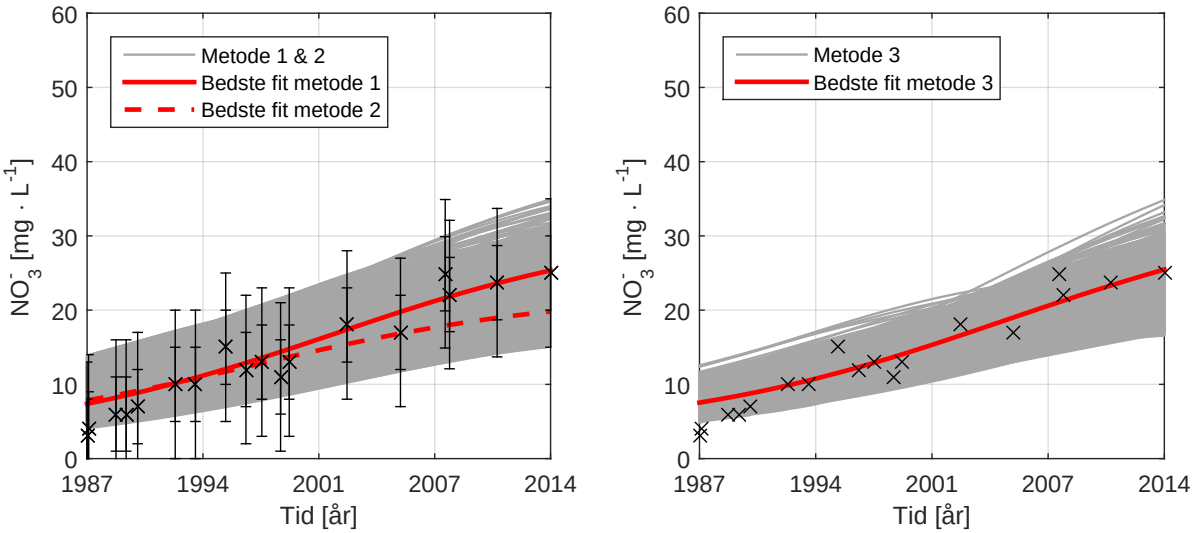
Indledningsvis undersøges det, hvorvidt drænvirkningen beskrevet i afsnit 6.5.1 på side 44, medvirker til en forventelig infiltration ved anvendelse af de samplede parametersæt. Da drænet medvirker, at der fjernes vand fra Modelkomplekset, er det essentielt at undersøge om der bevares en infiltration af en forventelig størrelse. På baggrund af undersøgelsen beregnes den gennemsnitlige års-infiltration i de grundvandsdannende oplande for de udvalgte fem observationspunkter. Den gennemsnitlige årlige infiltration i de grundvandsdannende oplande beregnes til 213 $mm \cdot år^{-1}$, hvorfor det vurderes at drænet ikke fjerner for meget vand i Modelkomplekset. Dette grundes i at der opretholdes en infiltration marginalt under det forventelige i oplandene, jf. 6.5.1 på side 44.

I det følgende udfærdiges en grafisk analyse af de accepterede simuleringer for de valgte observationspunkter. En beskrivelse af observationspunkterne samt deres respektive placeringer i Sydvest-området forefindes i afsnit 8.3 på side 73. Figur 8.9-8.13 illustrerer de accepterede simuleringer for hver metode samt det dertilhørende bedste fit givet ved højest beregnede globale likelihood. Det bedste fit er udelukkende vist for at indikere at spændet indeholder flere simuleringer. Figur 8.9 illustrerer de accepterede Monte Carlo simuleringer for hhv. metode 1, 2 og 3 for vandforsyningsboring 34.1661. Det bemærkes, hvorledes den dobbelte standartafvigelse er illustreret for metode 1 og 2. Bedste fit er markeret med rød for hver metode, mens de grå linjer viser de accepterede simuleringer.



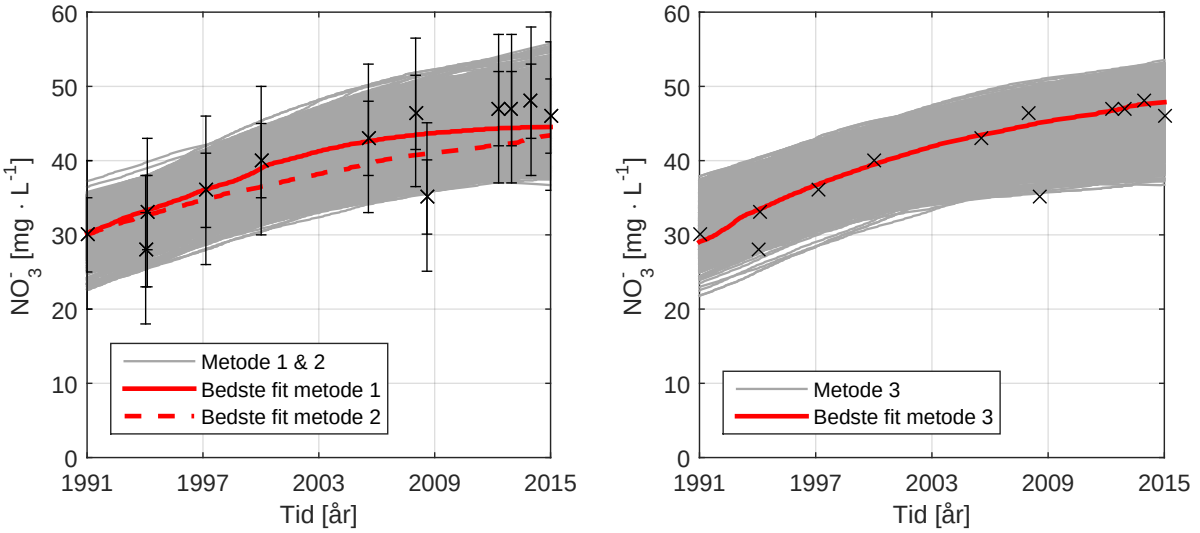
Figur 8.9. Vandforsyningsboring **34.1661**: Accepterede simuleringer for metode 1 og 2 samt maksimalt tilladelig afvigelse (venstre). Accepterede simuleringer for metode 3 (højre). Bedste fit er illustreret med rød.

Af figur 8.9 bemærkes hvorledes simuleringer er beliggende indenfor den dobbelte standartafvigelse for hver måling for metode 1 og 2. Det bemærkes ligeledes, hvordan bedste fit resulterer i en underestimering af de to kronologisk seneste målinger. For metode 3 forekommer der et smallere spænd for simuleringerne, hvor der generelt accepteres simuleringer med en lineært stigende tendens i simuleret nitratkoncentration. Figur 8.10 illustrerer de accepterede Monte Carlo simuleringer for hhv. metode 1, 2 og 3 for vandforsyningsboring 34.1664.



Figur 8.10. Vandforsyningsboring **34.1664**: Accepterede simuleringer for metode 1 og 2 samt maksimalt tilladelig afvigelse (venstre). Accepterede simuleringer for metode 3 (højre). Bedste fit er illustreret med rød.

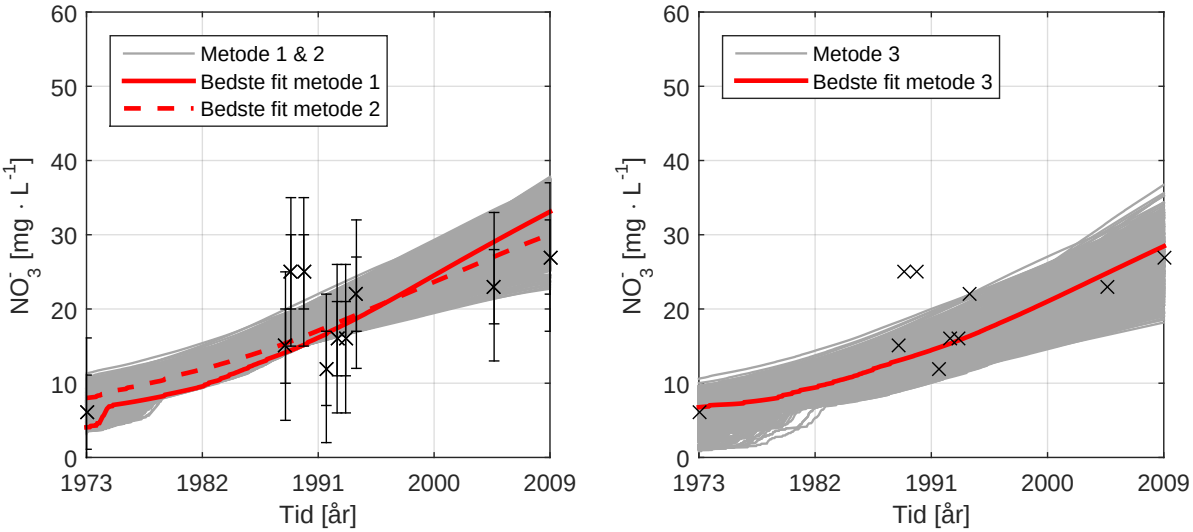
Særligt for vandforsyningsboring 34.1664 ved AKV-Drastrup 2 er, at den er beliggende 250 m fra 34.1661, jf. figur 8.2 på side 73, men at der måles relativt højere nitratkoncentrationer. Det er derfor essentielt, at kunne modellere denne difference indenfor den beskrevne korte geografiske afstand. Det bemærkes af figur 8.10, hvorledes alle metoder omkranser målingerne og generelt simuleres den påviste stigende tendens. Det bemærkes, hvordan særligt det bedste fit for metode 1 og 3 giver en relativ præcis simulering af nitratkoncentrationen i vandforsyningsboring 34.1664.
Figur 8.11 illustrerer de accepterede Monte Carlo simuleringer for hhv. metode 1, 2 og 3 for vandforsyningsboring 34.1670.



Figur 8.11. Vandforsyningsboring **34.1670**: Accepterede simuleringer for metode 1 og 2 samt maksimalt tilladelig afvigelse (venstre). Accepterede simuleringer for metode 3 (højre). Bedste fit er illustreret med rød.

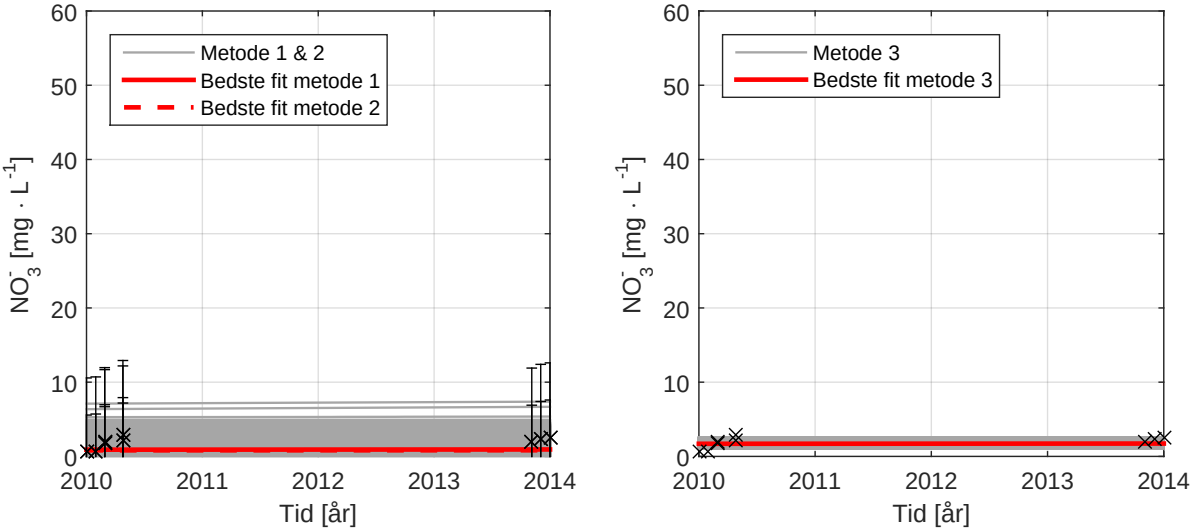
Figur 8.11 illustrerer et eksempel på et observationspunkt, hvor der måles kritiske nitratkoncentrationer nær grænseværdien på 50 $mg \cdot L^{-1}$. Spændene for simuleringerne er relativt ens for alle metoder, men det bemærkes, hvorledes metode 1 og 3 overordnet har et bedre fit på den generelle tendens for særligt de seneste 4 målinger. Dette kan skyldes at metode 2 er baseret på en produktberegnet global likelihood, hvilket vil medføre at et afvigende målepunkt eller et afvigende observationspunkt vil vægtes relativt højt. Det vurderes fordelagtigt og af interesse i henhold til problemformuleringen, at kunne simulere en vandforsyningsboring med en sådan målt kritisk nitrathistorik.

Figur 8.12 illustrerer de accepterede Monte Carlo simuleringer for hhv metode 1, 2 og 3 for vandforsyningsboring 34.908.



Figur 8.12. Vandforsyningsboring **34.908**: Accepterede simuleringer for metode 1 og 2 samt maksimalt tilladelig afvigelse (venstre). Accepterede simuleringer for metode 3 (højre). Bedste fit er illustreret med rød.

Som vist på figur 8.12 for en vandforsyningsboring ved Ellidshøj Vandværk, måles der relativt markante variationer i nitratkoncentration i perioden år 1987-93. Dette vil betyde at særligt metode 1 og 2 vil udfordres i opfyldelse af acceptkriteriet, da det ikke forventes af Modelkomplekset, at simuleringer af sådanne fluktuationer er muligt. Den generelt stigende tendens er opfyldt for alle accepterede simuleringer, men det bemærkes at bedste fit for metode 3 fitter særligt godt på det første og de to seneste målinger for observationspunktet.
Figur 8.13 illustrerer de accepterede Monte Carlo simuleringer for hhv. metode 1, 2 og 3 for vandforsyningsboring 33.1159.



Figur 8.13. Vandforsyningsboring **33.1159**: Accepterede simuleringer for metode 1 og 2 samt maksimalt tilladelig afvigelse (venstre). Accepterede simuleringer for metode 3 (højre). Bedste fit er illustreret med rød.

Af figur 8.13 bemærkes, at Modelkomplekset også er anvendelig til simulering af relativt lave nitratkoncentrationer markant under grænseværdien uden målbare tegn på stigende tendens. Til trods for, at det ikke er forventeligt at nitratkoncentration i vandforsyningsboring 33.1159 ved AKV-Nibe overskrider grænseværdien, anses det fordelagtig, at Modelkomplekset evner simulering af forskellig nitrathistorik.

Da der accepteres op til den dobbelte standartafvigelse for metode 1 og 2 accepteres simuleringer i et relativt bredere spænd end metode 3, der er relativt sensitiv ved et vandret koncentrationsforløb.
Der udfærdiges resultatstatistik for hvert observationspunkt. Der beregnes en gennemsnitlig afvigelse fra hvert målepunkt gennemsnitligt for hvert observationspunkt. Desuden beregnes et 90 %-konfidensinterval, hvorved afvigelsen med 90 % sandsynlig vil være indenfor det præsenterede interval til et vilkårligt målepunkt. Tabel 8.3 illustrerer gennemsnitlig afvigelse og 90 %-konfidensinterval for hvert observationspunkt.

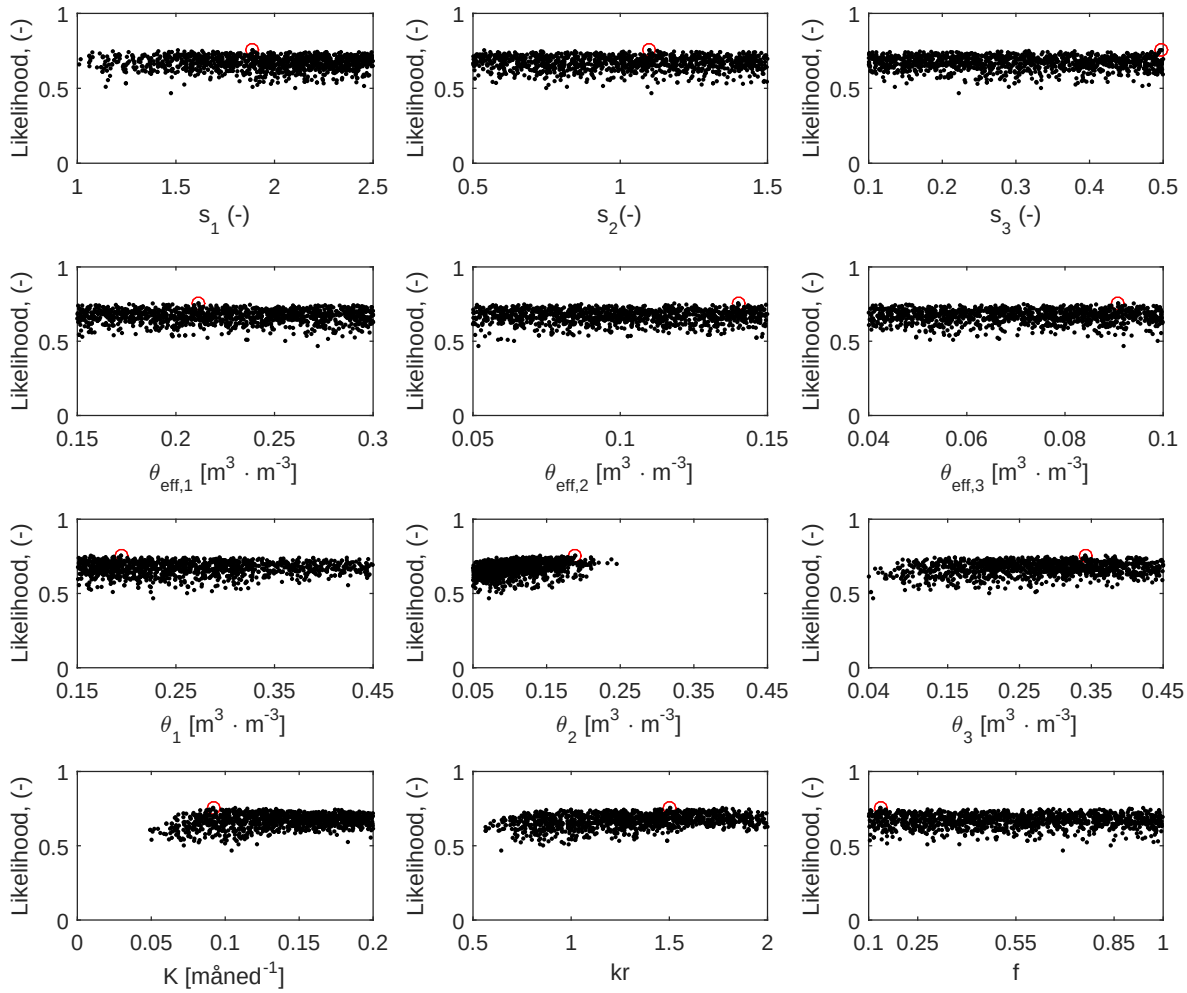
Tabel 8.3. Resultatstatistik for evalueringsmetoderne baseret på de accepterede simuleringer. Gennemsnitlig og 90 %-konfidensinterval for afvigelse fra målepunkt.

DGU nr.	**Metode 1 & 2** Afvigelse $[\mathrm{mg \cdot L^{-1}}]$		**Metode 3** Afvigelse $[\mathrm{mg \cdot L^{-1}}]$	
	gns.	90 %-konfidensinterval	gns.	90 %-konfidensinterval
34.908	0,4	[-1,5 ; 2,6]	-3,4	[-6,1 ; -0,1]
34.1670	-0,3	[-5,5 ; 4,9]	0,3	[-4,6 ; 5,1]
34.1664	0,9	[-3,3 ; 5,7]	0,3	[-2,4 ; 3,4]
34.1661	2,1	[-1,8 ; 5,7]	0,9	[-0,9 ; 3,0]
33.1159	-0,6	[-1,7 ; 1,5]	-0,1	[-0,6 ; 0,4]
Gennemsnit	0,48		-0,42	

Af tabel 8.3 bemærkes, at den samlede gennemsnitlige afvigelse er tilnærmelsesvis ens for begge metoder med modsat fortegn. Metode 3 har en generelt tendens til underestimering, mens Metode 1 og 2 har en tendens til overestimering. Det bemærkes ligeledes hvordan Metode 3 på nær for observationspunkt 34.908 har en relativt lav gennemsnitlig afvigelse mindre end 1 $\mathrm{mg \cdot L^{-1}}$. På baggrund af det beregnede 90 %-konfidensinterval vurderes det at alle tre metoder med en præcision i størrelsesordenen $\pm 5\,\mathrm{mg \cdot L^{-1}}$ gennemsnitligt fitter målepunkterne for alle observationspunkter. Ved en sammenholdning af resultatstatistikken i tabel 8.3 og den samlede grafiske betragtning vurderes Metode 3 særdeles anvendelig som evalueringsmetode til Modelkomplekset.
Da det således er grafisk og statistisk dokumenteret, hvordan de accepterede simuleringer forløber i de udvalgte observationspunkter for kalibrering, udfærdiges dotty plots til undersøgelse af parameterusikkerhed.

8.6.1 Dotty plots

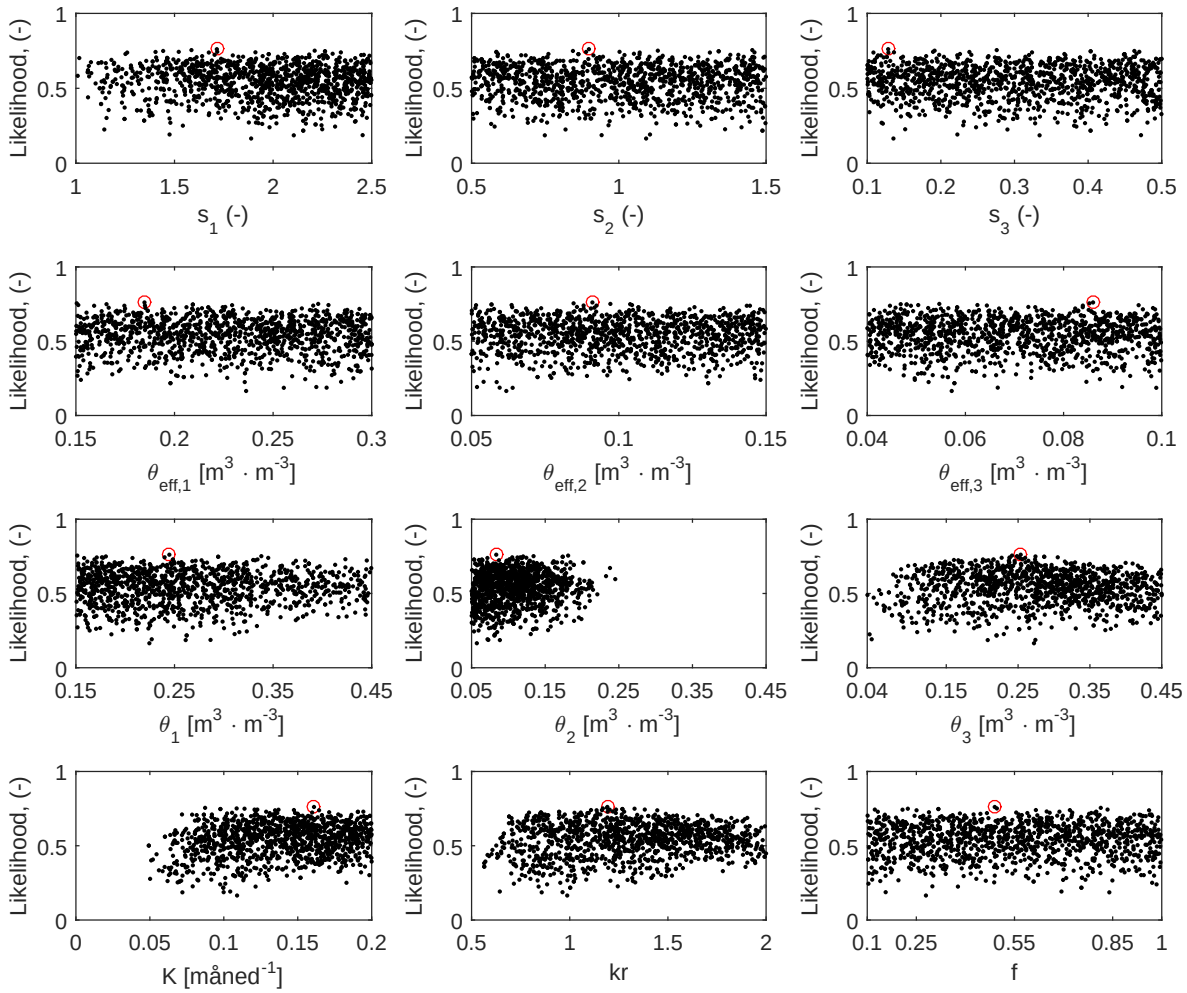
I nærværende afsnit opstilles en analyse af parameterusikkerhed ved opstilling af dotty plots. Sådanne opstilles ved at projekterer den globale likelihood til hver parameter. Således kan responses for de accepterede parametre undersøges. Da der anvendes forskellige evalueringsmetoder til bestemmelse af global likelihood for hver simulering, opdeles analysen metodevis. Dette skal medvirker, at der eventuelt kan spore differens i respons afhængig af evalueringen. Et fladt dotty plot uden sporing af tendens kan være et udtryk for, at der ikke forefindes et optimum, at parameteren er ikke-sensitiv, korrelerede parametre eller en bekræftelse af equifinalitet jf. Lui et al. [2009]. Figur 8.14-8.16 viser de opstillede dotty plots for hver parameter for metode 1, 2 og 3 hhv.



Figur 8.14. Metode 1: Dotty plots af parametre for hver accepteret simulering. Simuleringen med højeste globale likelihood er markeret med rød cirkel for hver parameter.

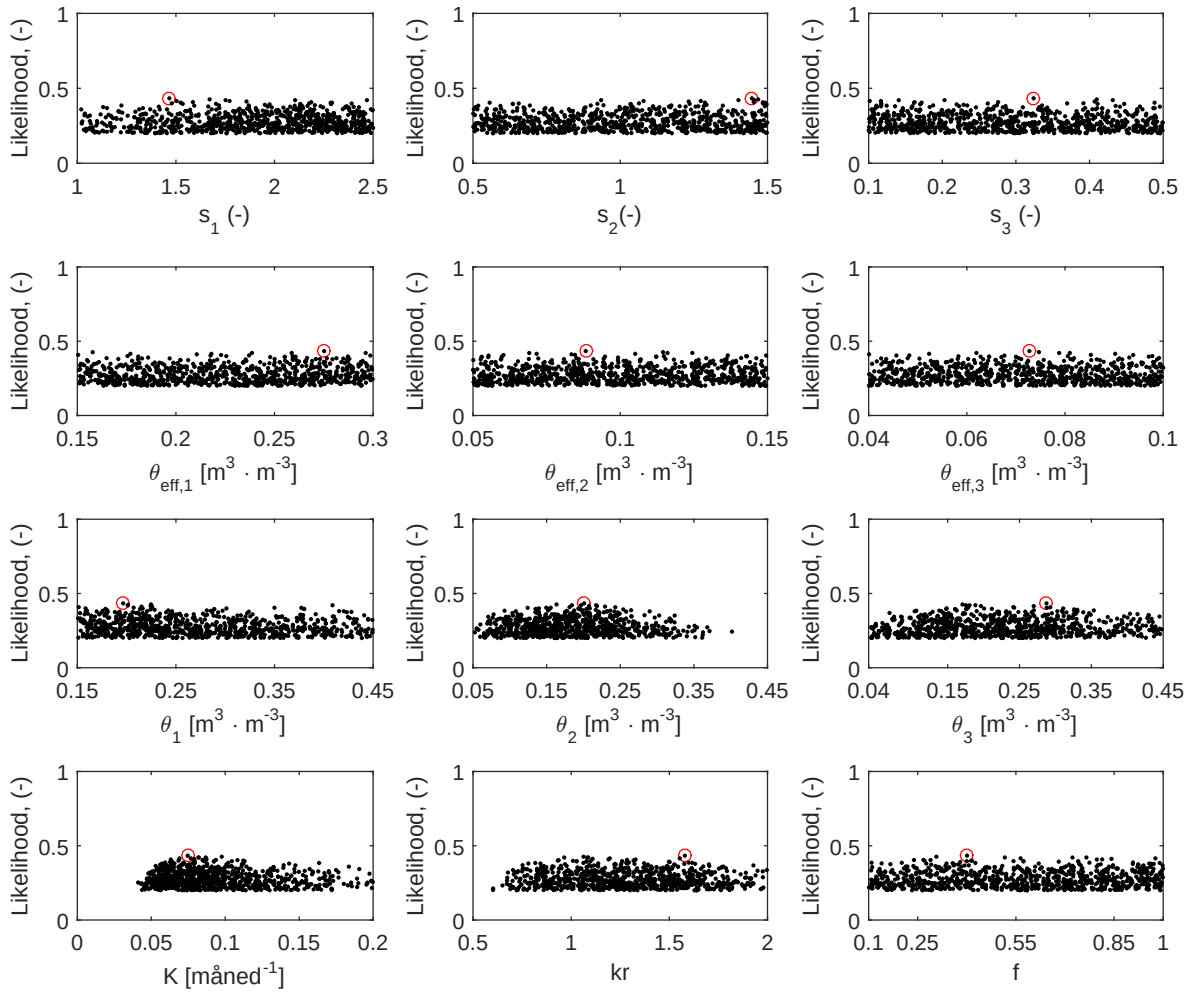
Figur 8.14 illustrerer dotty plots ved anvendelse af metode 1 til evaluering af accepterede Monte Carlo resultater. En relativ stor del af parametrene har en uniform fordelt global likelihood for store dele af spændet, hvilket kommer til udtryk som relativt flade dotty plots.

Særligt parametrene anvendt i den umættede zone i UZ-Modellen i form af stejlhedsparameteren, den effektive porøsitet og fyldningsgraden giver ikke nogen synlig tendens i respons, hvilket resulterer i et uniformt fordelt dotty plot uden nogen form for markant optimum. Det bemærkes, at der forekommer en relativt markant respons for den totale porøsitet i ler, hvor der præsteres bedst i den laveste halvdel af intervallet med en forholdsvis svag tendens til aftagende likelihood mod minimumværdien. Desuden forekommer en mindre tendens i den totale porøsitet for kalk, hvilket tyder på, at der skal være en vis tilbageholdelse i dette medium. Dette grundes i at der ikke accepteres simuleringer ved minimumværdien for totalporøsitet i kalk. Ligeledes forekommer en klar tendens for nedbrydningsraten, hvor der er en tendens til en værdi større end $K = 0{,}05$ måned^{-1}, svarende til en halveringstid mindre end 400 døgn. Da der for metode 1 er valgt en midlet global sandsynlighed, forefindes ikke markante tendenser for flere parametre, hvorfor dotty plots for metode 2 eksamineres.



Figur 8.15. Metode 2: Dotty plots af parametre for hver accepteret simulering. Simuleringen med højeste globale likelihood er markeret med rød cirkel for hver parameter.

Figur 8.15 illustrerer dotty plots ved anvendelse af metode 2 til evaluering af accepterede Monte Carlo resultater. Det illustreres, at der forekommer større variationer i global likelihood sammenlignet med metode 1. Dette grundes i den produktbaserede evalueringsmetode af global likelihood, hvilket resulterer i en relativt stejlere responsflade. Ligeledes er der en tendens til at der som minimum skal anvendes en nedbrydningsrate større end $K = 0{,}05$ måned^{-1}, svarende til en halveringstid på 200 døgn. For den totale porøsitet i sand forekommer, der en tendens til, at der skal anvendes en værdi nær minimumsværdien for samplingen. Den totale porøsitet for ler afgrænses relativt klart af minimumsværdien og en værdi på omtrent $\theta_2 = 0{,}25\,\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{m}^{-3}$, hvor der forekommer et svagt optimum ved $\theta_2 = 0{,}10\,\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{m}^{-3}$. For den totale porøsitet i kalk forekommer der en svag tendens til stigende likelihood omkring midten af det samplede interval ved $\theta_3 = 0{,}25\,\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{m}^{-3}$. For usikkerhedskorrigeringen *kr* til at tage forbehold for usikkerheden vedrørende input for nitratudvaskning, forekommer der et svagt optimum omkring 1,25 svarende til en forøgelse på 25 % i forhold til udgangspunktet for udvaskningen. Der er en generel tendens til at udvaskningskorrigeringen afgrænses omkring minimumsværdien for parameteren. På samme måde som metode 1 muliggøres ikke yderligere afgrænsning af parameterusikkerheden for de umættet zone specifikke parametre som effektiv porøsitet, stejlhedsparameter og fyldningsgrad, hvorfor disse ikke kommenteres yderligere for metode 2.

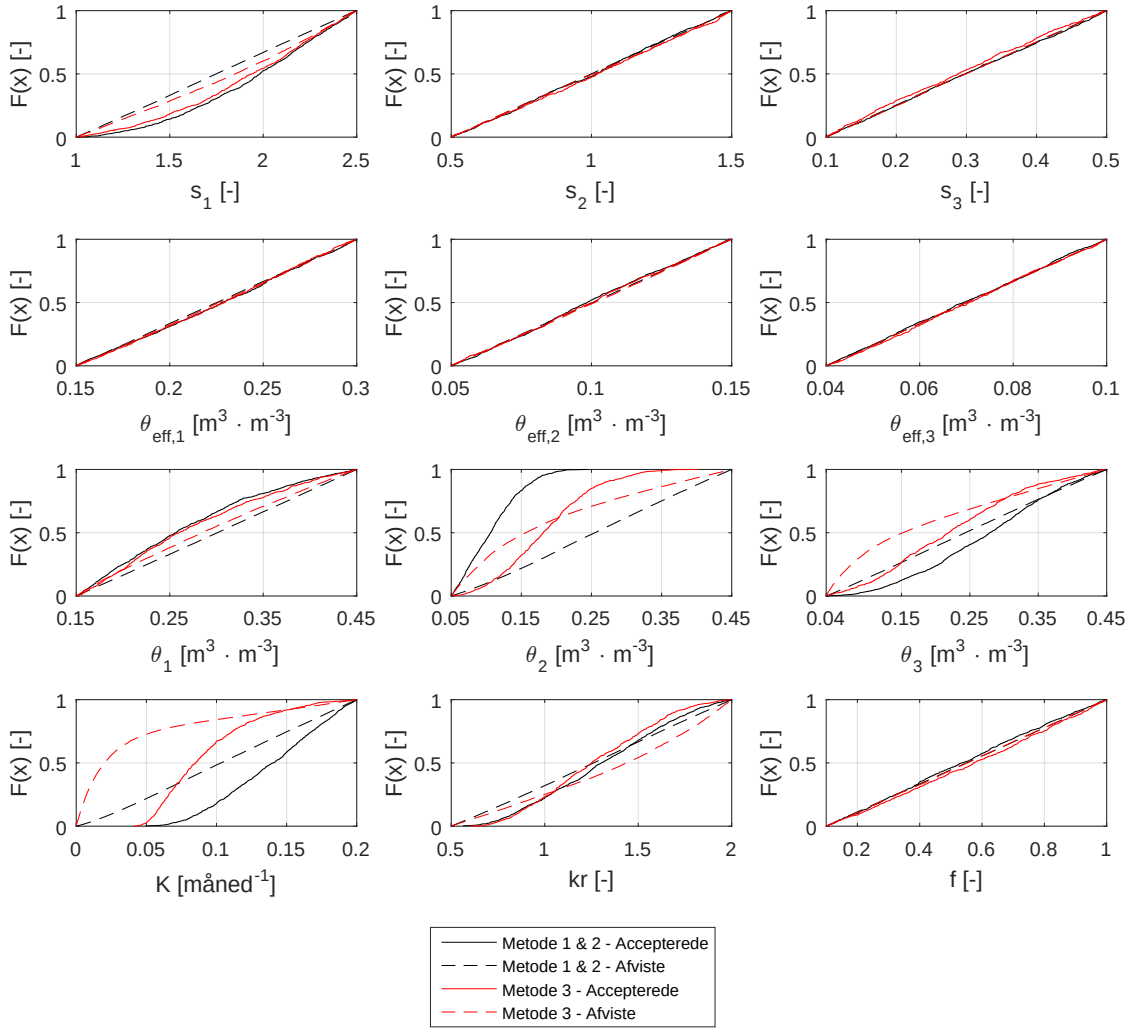


Figur 8.16. Metode 3: Dotty plots af parametre for hver accepteret simulering. Simuleringen med højeste globale likelihood er markeret med rød cirkel for hver parameter.

Figur 8.16 illustrerer dotty plots ved anvendelse af metode 3 til evaluering af accepterede Monte Carlo resultater. Det bemærkes, at der forekommer samme tendenser for stejlhedsparameteren, den effektive porøsitet samt fyldningsgraden. Dog er der en tendens til at hovedvægten af de accepterede simuleringer er i den øvre del af intervallet for stejlhedsparameteren i sand. Ligeledes er der en tendens til at der nødvendiggøres en nedbrydningsrate større end $K = 0{,}05$ måned^{-1}. For den totale porøsitet i sand forekommer der en tendens til, at der skal anvendes en værdi nær minimumsværdien for samplingen. Den totale porøsitet for ler afgrænses af minimumsværdien og en værdi på omtrent $\theta_2 = 0{,}35\,\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{m}^{-3}$, hvor der forekommer et optimum ved $\theta_2 = 0{,}20\,\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{m}^{-3}$. For den totale porøsitet i kalk forekommer der en svag tendens til stigende likelihood omkring midten af det samplede interval ved $\theta_3 = 0{,}17\,\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{m}^{-3}$. For udvaskningskorrigeringen accepteres hovedsageligt simuleringer i intervallet 1 - 1,5 hvilket er tilsvarende metode 2. Der er altså en tendens til, at den udvaskede nitratkoncentration er underestimeret.
På baggrund af de opstillede dotty plots for alle tre metoder kan det konkluderes, at en relativt stor del, af de samplede parametre er usikre. Som nævnt kan denne usikkerhed skyldes at et optimum ikke er afdækket i de samplede parameterspænd. Det vælges ikke at udvide parameterspændet, men i stedet udarbejdes i det følgende en sensitivitetsanalyse.

8.6.2 Sensitivitet

Sensitivitetsanalysen udarbejdes med henblik på at afdække, hvorvidt de uniformt fordelte dotty plots er et tegn på ufølsomhed. Hvis en sådan ufølsomhed afdækkes for en parameter, vil det medføre at output fra Modelkompleks ikke umiddelbart vil være afhængig af denne. Sensitivitetsanalysen udarbejdes på baggrund af de accepterede simuleringer, hvor der opstilles en empirisk akkumuleret fordelingsfunktion (CDF) for accepterede simuleringer. Ligeledes udarbejdes en akkumuleret fordelingsfunktion for de afviste simuleringer for hver parameter. Differencen mellem CDF for accepterede og afviste simuleringer indikerer sensitiviteten, hvor en relativt stor afvigelse indikerer at nogle værdier performer bedre, hvilket medfører sensitivitet. Figur 8.17 viser resultatet af sensitivitetsanalyse.



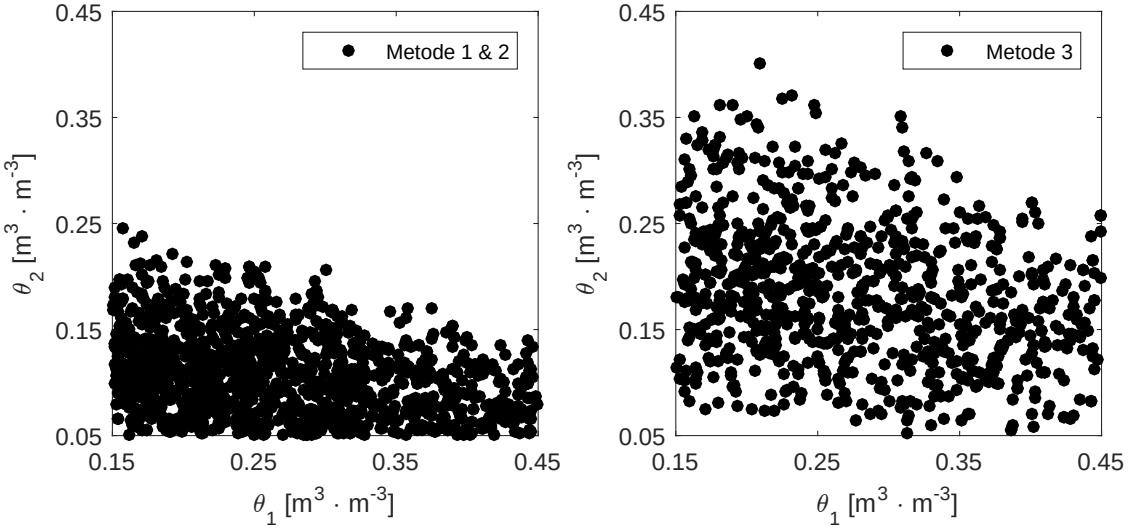
Figur 8.17. Sensitivitet for accepterede og afviste parametre.

Figur 8.17 viser Modelkompleksets parametersensitivitet ved sammenligning af akkumulerede fordelingsfunktioner for de accepterede og afviste simuleringer for hver evalueringsmetode. Det bemærkes, hvorledes der forekommer en lineær stigende tendens i hele spændet for hver parameter ved de afviste simuleringer ved metode 1 og 2. Herimod bemærkes det, at de afviste simuleringer for metode 3 ikke følger en sådan tendens, hvilket skyldes NSE-metoden. Af sensitivitetsanalysen vurderes det, at særligt parametre anvendt for den umættede zone er ikke sensitive. Dette gælder stejlhedsparameter, effektiv porøsitet og fyldningsgrad. Dette kan for den effektive porøsitet skyldes, at spændet er sat relativt afgrænset, hvilket potentielt kan medføre, at et optimum ikke forefindes. Da fyldningsgraden ikke viser nogen særlig tendens

i sensitivitet, må det vurderes at metoden for indragelse af dobbelt porøsitet, for observationspunkterne, ikke er sensitiv. En anden grund til tegn en insensitiv umættet zone kan tilskrives, at den primære transport over flere kilometer foregår i den mættede zone, hvorfor selve forsinkelsen i den umættede zone, over en distance på maksimalt 70 m, jf. 3.3 på side 16, for de udvalgte observationspunkter er uden betydning. Det forekommer dog en tendens til sensitivitet for stejlhedsparameteren i sand, hvilket kan skyldes, at geologien for den umættede zone for oplandene tilknyttet observationspunkterne er sanddomineret. Det bemærkes, at Modelkomplekset er særligt sensitiv for, at der skal være en vis nedbrydningsrate. Det bemærkes ligeledes, hvordan der forekommer sensitivitet ved variation af total porøsitet for alle medier. Da det således er klarlagt, hvorledes de anvendte parametre er sensitive i Modelkomplekset, undersøges hvorvidt noget af uniformiteten for det globale likelihood skyldes parameterkorrelation, hvilket på samme vis kan føre til ikke-unikke løsninger.

8.6.3 Parameterkorrelation

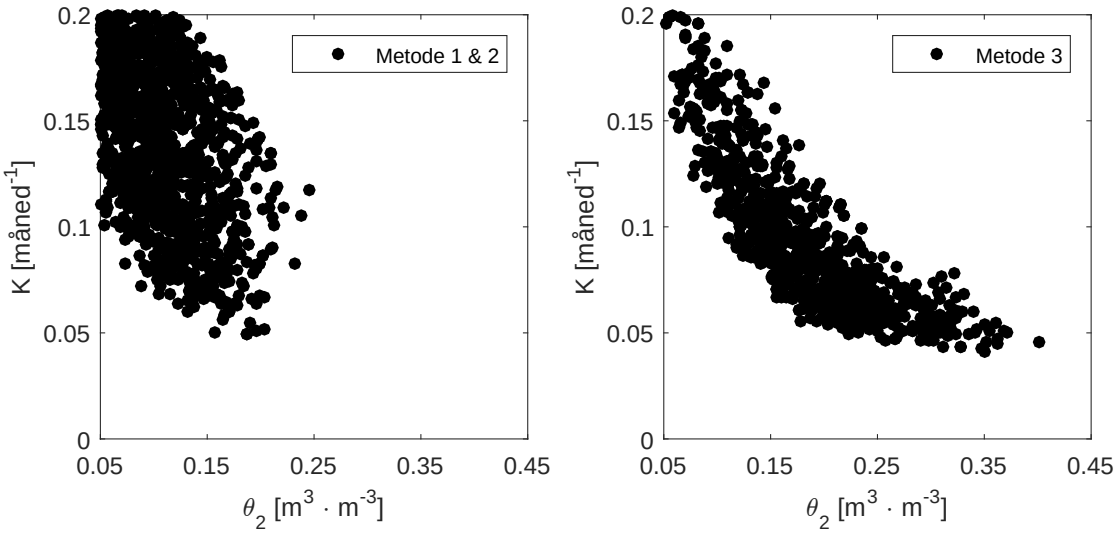
Undersøgelsen af parameterkorrelation udfærdiges ved at analysere alle mulige kombinationer for direkte korrelation de 12 parametre imellem, svarende til 66 kombinationsmuligheder. Det er forventeligt, at der for en model til beskrivelse af stoftransport gennem forskellige medier forekommer klare korrelationer mellem de geologisk specifikke parametre. Således vil en eksempelvis høj transporthastighed i sand kunne opvejes af en langsom i ler. Der forekommer heraf mulighed for en horisontal skalering af gennembrudskurven i tid. Ligeledes vil usikkerheden for udvaskningen samt nedbrydningsraten af nitrat forventes at være korreleret, da disse potentielt kan skalere gennembrudskurven vertikalt i koncentration. Da gennembrudskurven således forventes at kunne skaleres i begge dimensioner er det nødvendigt at afdække, hvilke af de samplede parametre, der er korrelerede. Korrelationen klarlægges ved at opstille en parameter, som funktion af en anden. I nærværende undersøgelse præsenteres udelukkende direkte korrelerede parametre. Korrelationerne illustreres ved figurerne 8.18-8.23. Undersøgelsen opstilles separat for metode 1, 2 og 3. Da der som nævnt accepteres præcist samme simuleringer i metode 1 og 2, vil korrelationsundersøgelserne være ens, hvorfor metode 1 og 2 kan samles i én figur.



Figur 8.18. Total porøsitet i sand, θ_1, som funktion af total porøsitet i ler, θ_2.

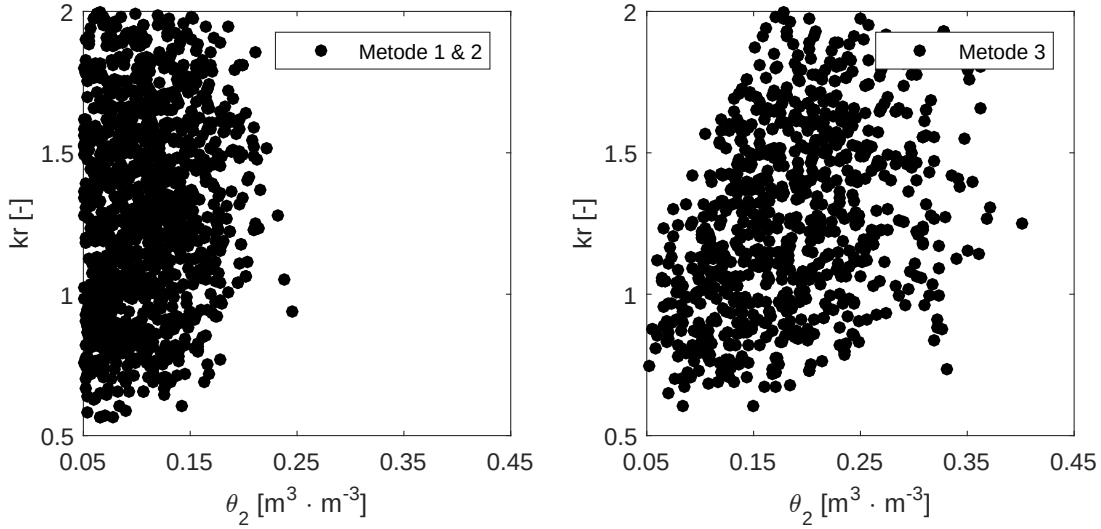
Figur 8.18 viser korrelationen mellem den totale porøsitet i sand og den totale porøsitet i ler. Det illustreres, at der er tendens til forekomst af en sammenhængen mellem de to parametre. Det bemærkes, at der ved stigende totalporøsitet i sand forekommer flere accepterede simuleringer ved aftagende totalporøsitet i ler. Dette skyldes, at hvis gennembruddet af nitrat sker for hurtigt i det ene medium, så vil transporten

skulle ske tilsvarende langsomt i det andet. Dette er forventeligt i et Modelkompleks, der er relativt stærkt afhængig af transporttider gennem både den umættede og mættede zone gennem tre specifikke medier.



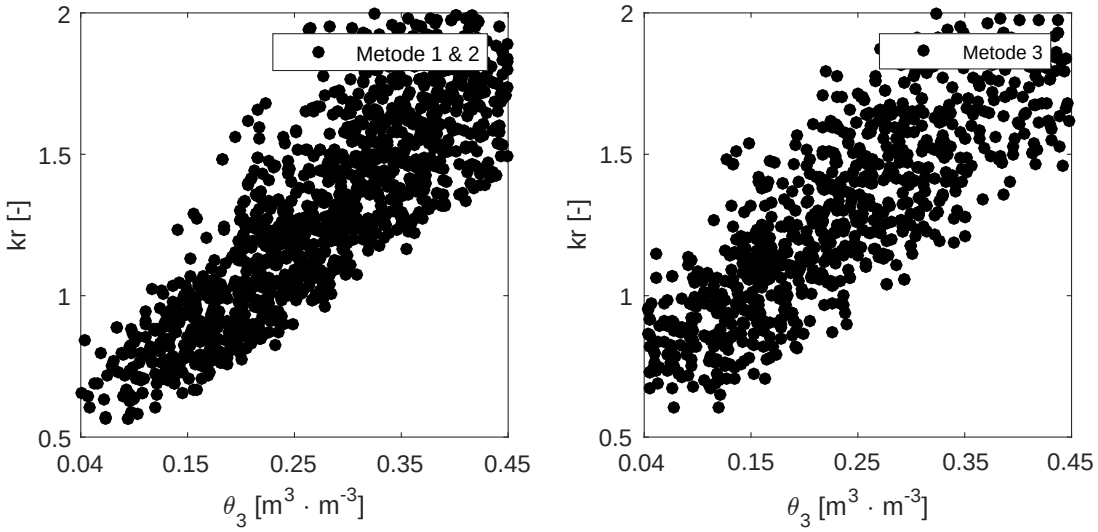
Figur 8.19. Total porøsitet i ler, θ_2, som funktion af nedbrydningsraten, K.

Figur 8.19 viser korrelationen mellem den totale porøsitet i ler og nedbrydningsraten. Det forekommer, særligt for metode 3, en klar tendens til parameterkorrelation. Ved stigende total porøsitet i ler, svarende til langsommere transport nødvendiggøres ikke samme relativt høje nedbrydningsrate. Nitrattransporten sker med en tilstrækkeligt lav hastighed til at denitrifikation kan nå at forekomme under redoxgrænsen, som er defineret til mergelhorisonten, hvilken er klassificeret geologisk som ler jf. afsnit 7.3.3 på side 59.



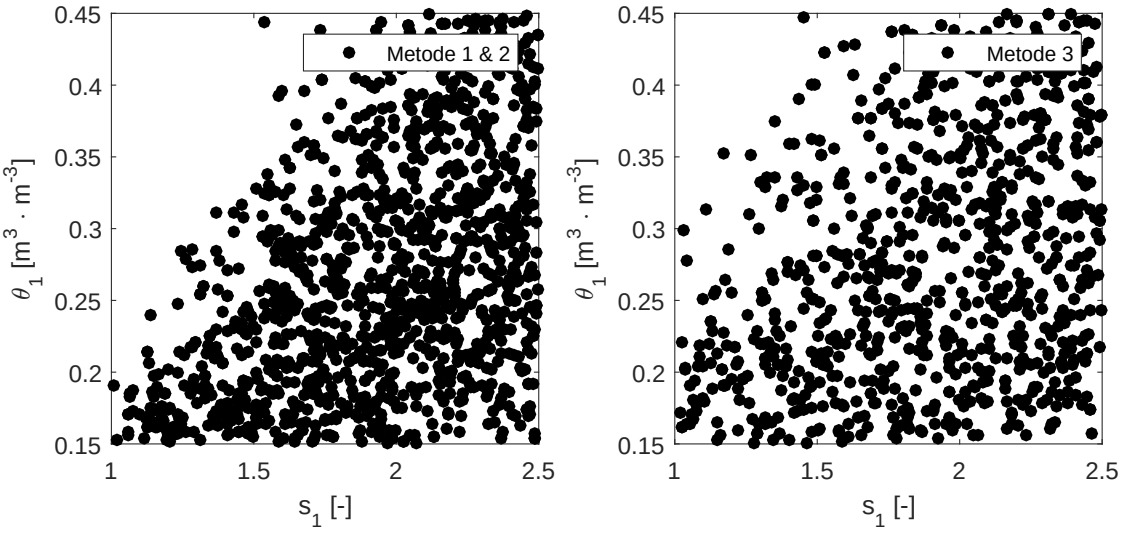
Figur 8.20. Total porøsitet i ler, θ_2, som funktion af udvaskningskorrigeringen, kr.

Figur 8.20 viser korrelationen mellem den totale porøsitet i ler og udvaskningskorrigeringen. Det bemærkes, særligt for metode 3, at der forekommer en klar tendens til at der ved stigende totalporøstitet nødvendiggøres en stigende udvaskningskorrigeringen. Dette skyldes, at hvis stoffet bliver tilstrækkeligt tilbageholdt, nødvendiggøres tilførsel af en større nitratmængde som input, for at simuleringen kan accepteres.



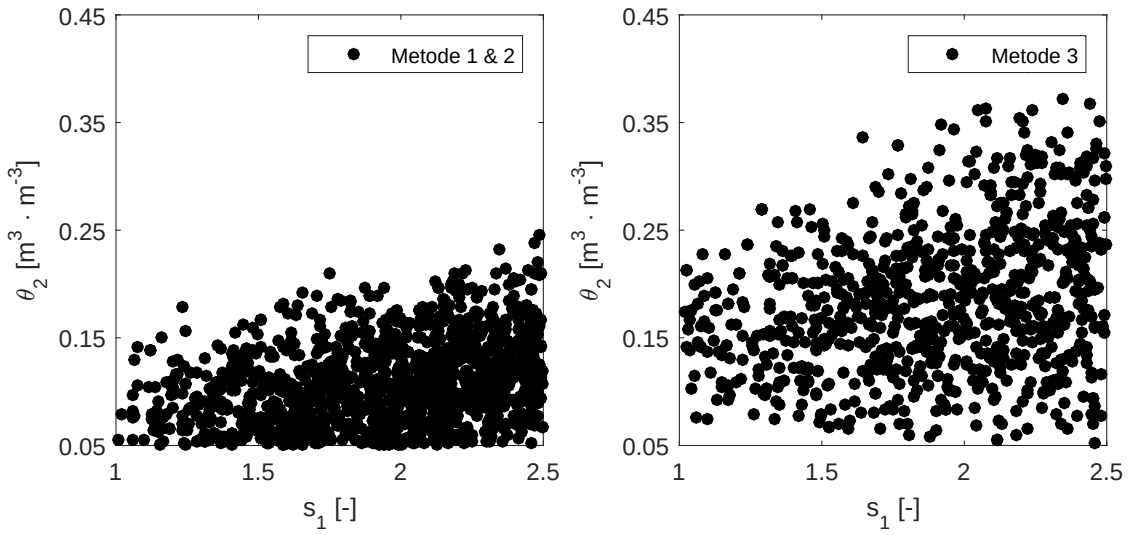
Figur 8.21. Total porøsitet i kalk, θ_3, som funktion af udvaskningskorrigeringen for nitratudvaskningen, *kr*.

Figur 8.21 viser på samme vis korrelationen mellem den totale porøsitet i kalk og udvaskningskorrigeringen for nitratudvaskning. Det er igen tydeligt, at samme tendens til korrelation forekommer, hvorfor forklaringen tilhørende figur 8.20 igen er gældende i nærværende tilfælde. Tendensen vises dog markant klarere ved korrelationen, hvis kalk indrages som variabel. Dette skyldes sandsynligvis, at en markant del af transporten i den mættede zone styres af den totale porøsitet i kalk, da det primære grundvandsmagasin for Sydvest-området er udgjort af kalk.



Figur 8.22. Stejlhedsparameter i sand, s_1, som funktion af total porøsitet i sand, θ_1.

Figur 8.22 viser korrelationen mellem stejlhedsparameteren i sand og den totale porøsitet i sand. Det er vist, at der ved stigende værdi for stejlhedsparameteren nødvendiggøres en stigende total porøsitet til at nedbremse transporthastigheden i sand i den umættede zone. Grunden til at denne korrelation udelukkende spores i sand, skyldes potentielt at den umættede zone for de udvalgte grundvandsdannende oplande generelt er domineret af sand.

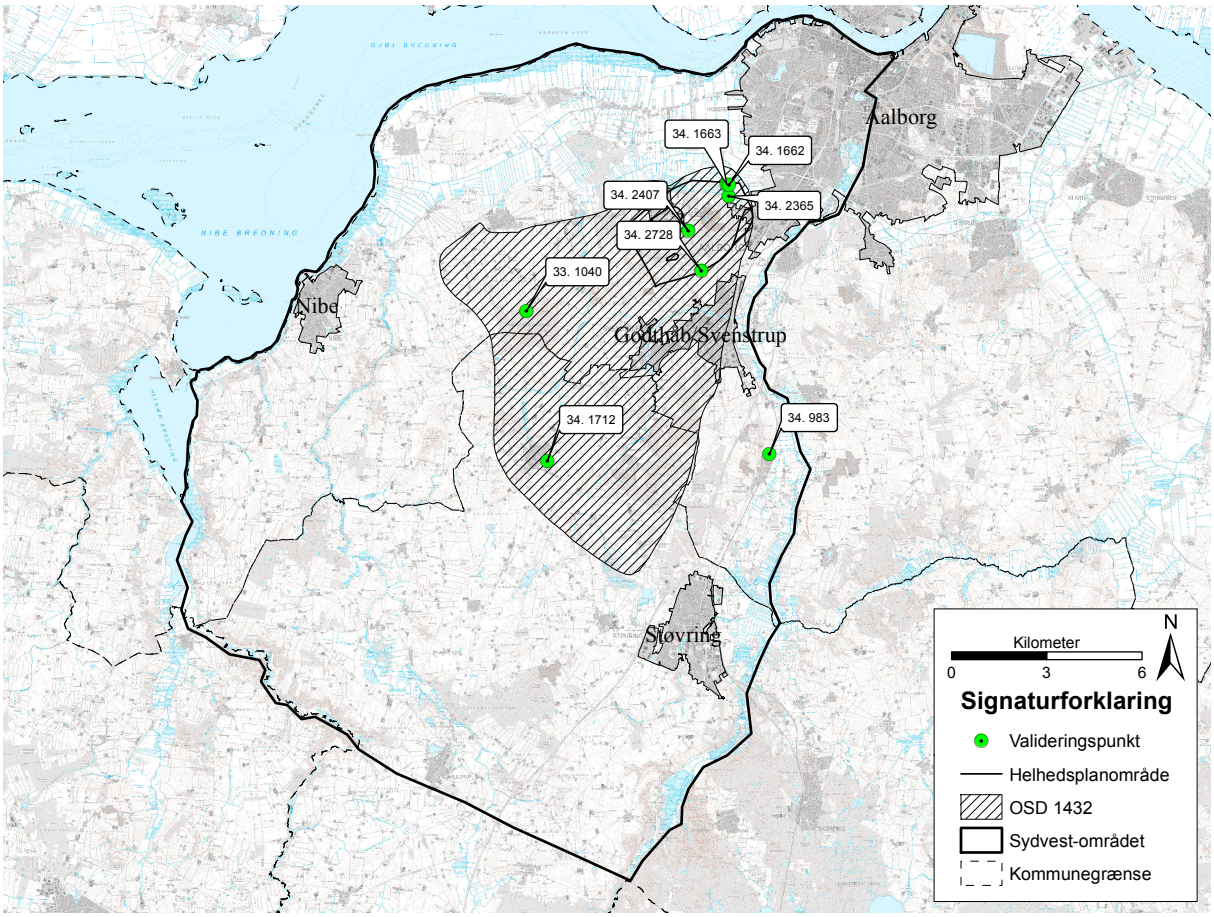


Figur 8.23. Stejlhedsparameter i sand, s_1, som funktion af total porøsitet i ler, θ_2.

Figur 8.23 viser på samme vis korrelationen mellem den stejlhedsparameteren i sand og den totale porøsitet i ler. Det er igen tydeligt, at samme tendens til korrelation forekommer, hvorfor forklaringen tilhørende figur 8.22 igen vil være gældende i nærværende tilfælde. Eksemplet er dog en illustration af korrelation på tværs af geologiske medier. Af korrelationsanalysen vurderes det, at der forekommer direkte korrelation mellem anvendte parametre i Modelkomplekset. Det vurderes ligeledes at parametre kan korrelerede på kryds af alle medier, hvilket potentielt vil medføre, at der kan forekomme korrelation som ikke er belyst i det nærværende. Da der anvendes ni parametre til styring af transporthastighed i de forskellige medier, vil der utvivlsomt forekomme equifinalitet, hvor flere parametersæt giver samme globale likelihood ved evaluering.

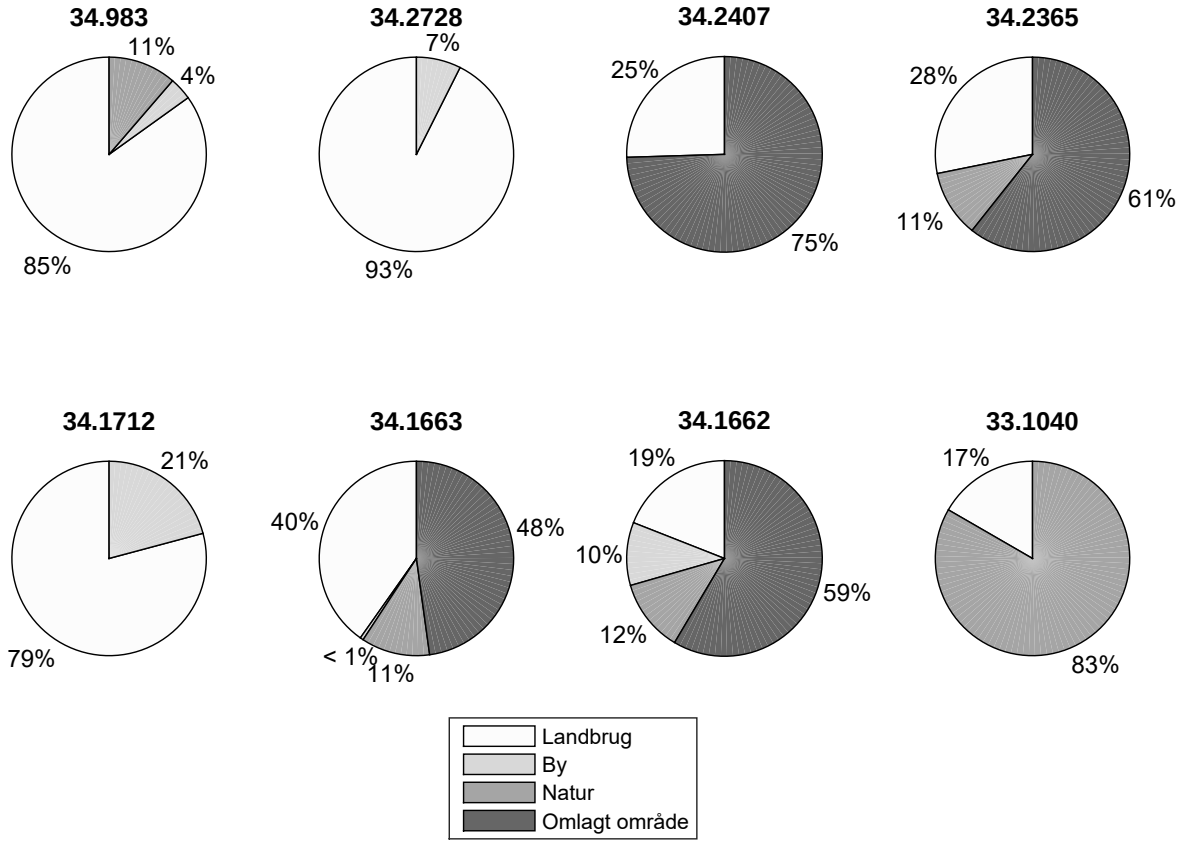
8.7 Validering

Modelkomplekset anvendelighed er således dokumenteret, og det er muligt med opsatte acceptkriterier for forskellige evalueringsmetoder, at simulere nitratkoncentrationer i udvalgte observationspunkter i kalibreringen. De accepterede simuleringers tilhørende parametersæt videreføres til en validering således præcis samme parameterkombinationer simuleres for andre vandforsyningsboringer. Til validering af Modelkompleksets anvendelighed til nitratfremskrivning udtages en række vandforsyningsboringer som observationspunkter til validering. Der udvælges bevidst punkter nær og i OSD 1432, da dette er et særligt interesseområde med henblik på vandindvinding og derfor også beskyttelse. Valideringspunkternes placering i Sydvest-området, i form af vandforsyningsboringer, er illustreret i 8.24.



Figur 8.24. Placering af de otte udvalgte valideringspunkter.

For de udvalgte valideringspunkter kræves ikke samme kriterier som for observationspunkterne til kalibrering. Derimod anvendes valideringspunkterne til yderligere bekræftelse af Modelkompleksets anvendelighed og til en afdækning af begrænsninger. Fordelingen af arealanvendelsen i de grundvandsdannende oplande for de udvalgte valideringspunkter er illustreret i figur 8.25. Det bemærkes, af figur 8.25, hvorledes der forekommer relativt stor variation i arealfordelingen for de respektive grundvandsdannende oplande for valideringspunkterne. Særligt vandforsyningsboring 34.983, 34.2728 og 34.1712 er domineret af landbrug, hvor eksempelvis 33.1040 består af overvejende natur i Sønderholm Plantage.



Figur 8.25. Fordeling af arealanvendelse for udvalgte observationspunkter til validering.

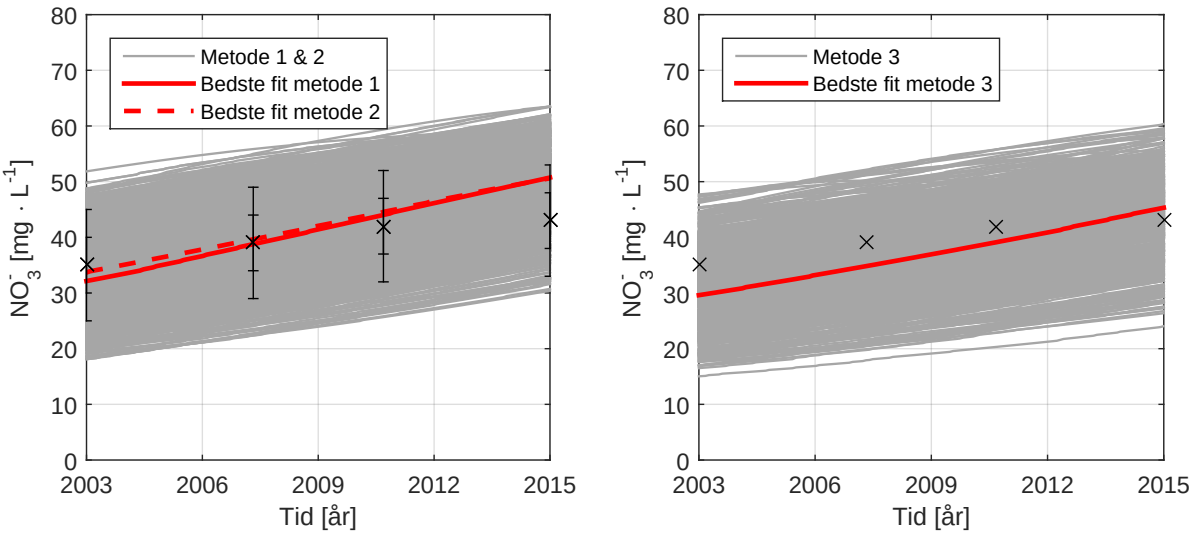
På samme vis som for observationspunkterne til kalibrering udarbejdes en samlet informationstabel til beskrivelse af valideringspunkterne. Tabel 8.4 viser en opsummerende beskrivelse af valideringspunkterne og dertilhørende nitratdata.

Tabel 8.4. Filtersætningsinterval, den maksimale og minimale målte nitratkoncentration, antal målinger, måleperiode og tendens for nitratkoncentrationen for valideringspunkterne.[GEUS, 2015].

DGU nr.	Enhed	**34.983**	**34.2728**	**34.2407**	**34.2365**
Filtersætning	[m.u.t.]	-	75,0 - 84,0	66,0 - 78,0	66,0 - 78,0
N_{obs}	[−]	10	2	4	10
Måleperiode	[år]	1990-2013	2008-2013	2003-2015	-
Min. NO_3^-	$[mg \cdot L^{-1}]$	18,0	<0,5	35,0	<1,0
Max. NO_3^-	$[mg \cdot L^{-1}]$	25,0	<0,5	43,0	4,5
Tendens	[−]	Ingen/stigende	Ingen	Stigende	Stigende
DGU nr.	Enhed	**34.1712**	**34.1663**	**34.1662**	**33.1040**
Filtersætning	[m.u.t.]	50,0 - 120,0	47,0 - 62,0	56,5 - 74,0	86,0 - 98,0
N_{obs}	[−]	6	13	14	9
Måleperiode	[år]	1992-2012	1987-2015	1987-2013	2010-2015
Min. NO_3^-	$[mg \cdot L^{-1}]$	0,8	3,0	1,0	1,5
Max. NO_3^-	$[mg \cdot L^{-1}]$	14,0	39,0	16,0	3,2
Tendens	[−]	Stigende	Stigende	Stigende	Ingen

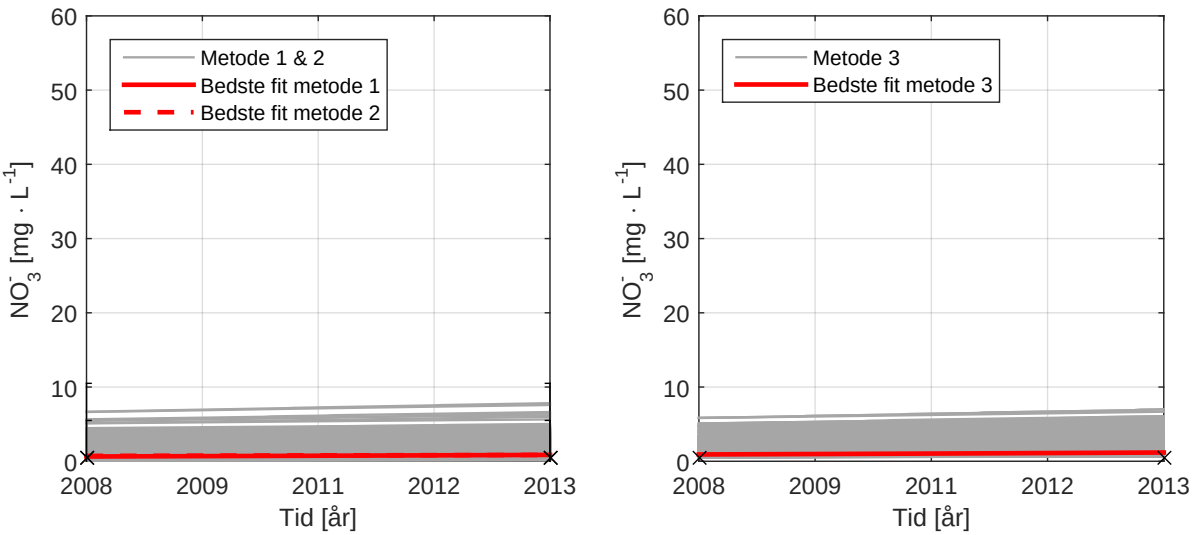
Valideringen tager udgangspunkt i de accepterede simuleringer. Det undersøges om der opnås et godt fit ved anvendelse af selvsamme parametre til andre vandforsyningsboringer og dertilhørende oplande.

I de følgende figurer 8.26-8.33 illustreres grafisk, hvorledes den simulerede nitratkoncentration fitter målingerne for de udvalgte valideringspunkter.



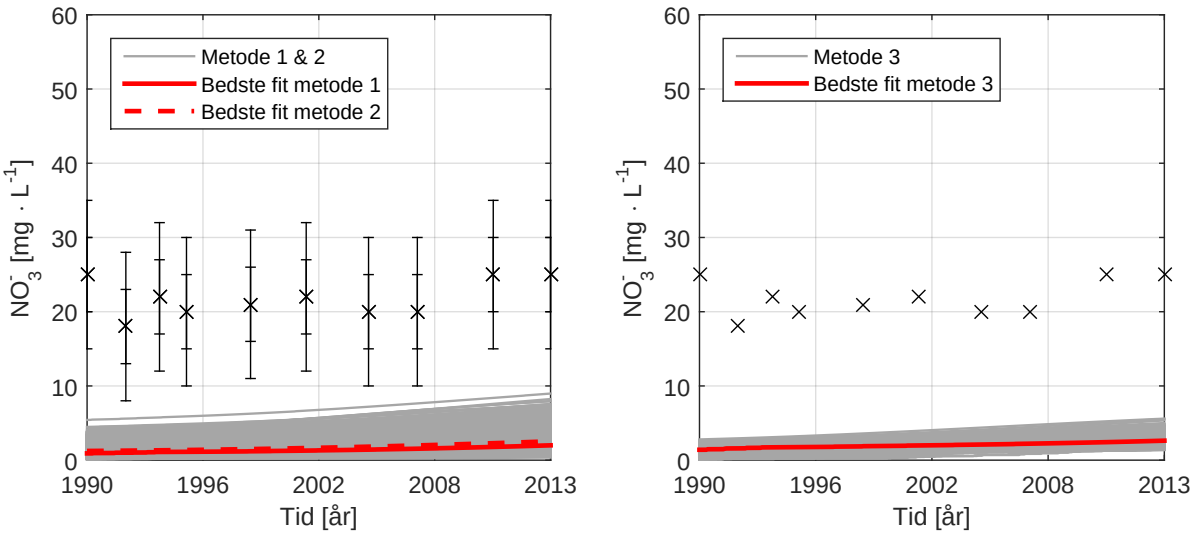
Figur 8.26. Vandforsyningsboring **34.2407**: Accepterede simuleringer for metode 1 og 2 samt maksimalt tilladelig afvigelse (venstre). Accepterede simuleringer for metode 3 (højre). Bedste fit er illustreret med rød.

Af figur 8.26 bemærkes det, at simuleringerne for alle evalueringsmetoder generelt følger den stigende tendens i nitratkoncentrationen for observationspunkt. Det bemærkes dog, at ikke alle simuleringer falder indenfor det opsatte acceptkriterie for metode 1 og 2, hvilket indikerer at en yderligere del af de accepterede simuleringerne ville afvises for denne vandforsyningsboring. Generelt er der en tendens til en relativt stejlt stigende simuleret nitratkoncentration sammenlignet med det observerede.



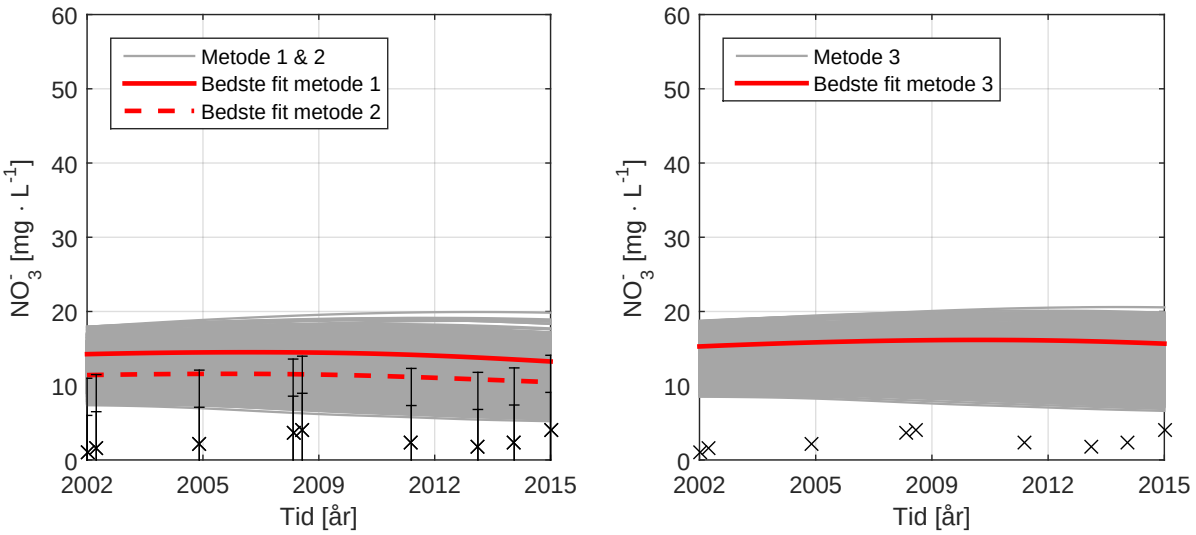
Figur 8.27. Vandforsyningsboring **34.2728**: Accepterede simuleringer for metode 1 og 2 samt maksimalt tilladelig afvigelse (venstre). Accepterede simuleringer for metode 3 (højre). Bedste fit er illustreret med rød.

Figur 8.27 bemærkes, at Modelkomplekset simulerer tilsvarende lave nitratkoncentrationer som det målte, hvor der ligeledes ikke simuleres en stigende tendens. Nitrathistorikken for nærværende vandforsyningsboring er forholdsvis ubeskrevet med to målinger over en fem årig periode, hvorfor validering af nærværende vandforsyningsboring er relativt ubetydelig i den samlede vurdering af Modelkomplekset.



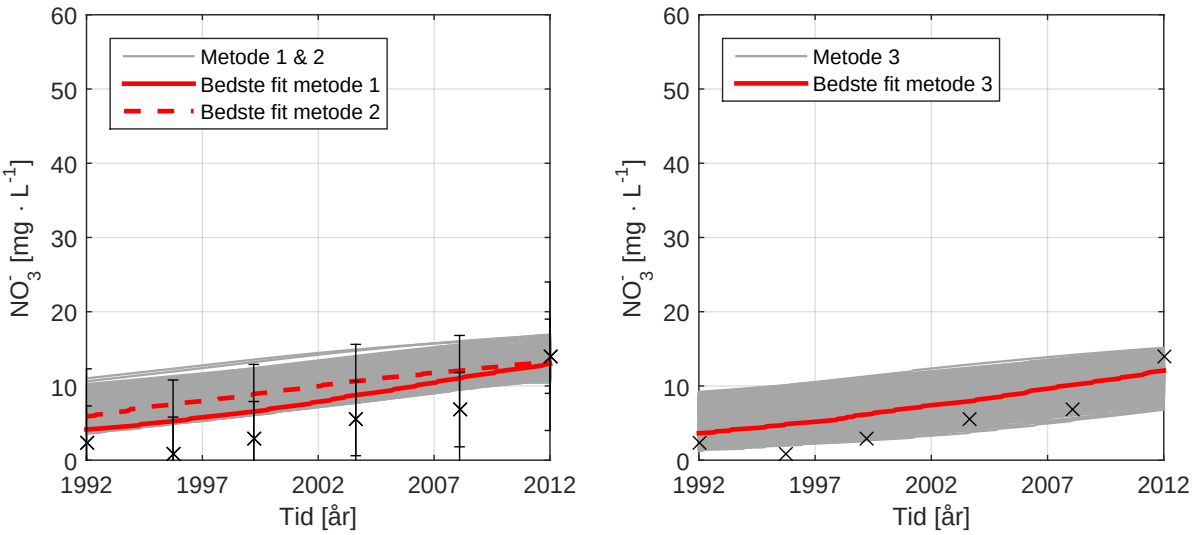
Figur 8.28. Vandforsyningsboring **34.983**: Accepterede simuleringer for metode 1 og 2 samt maksimalt tilladelig afvigelse (venstre). Accepterede simuleringer for metode 3 (højre). Bedste fit er illustreret med rød.

Af figur 8.28 bemærkes, at Modelkompleks ikke er i stand til at simulere nitratkoncentrationer for nærværende observationspunkt med en tilfredsstillende sikkerhed. Den generelle tendens er, at der simuleres markant lavere nitratkoncentration end målt. Det tyder på at redoxgrænsen i dette område er fastsat fejlagtigt højt geologisk i et område, hvor der i det naturlige system ikke forekommer reduktion af nitrat. En fejlbehæftet placering af redoxgrænsen vil medføre at en forholdsvis stor mængde af det tilstrømmende vand reduceres. Vandforsyningsboring 34.983 er pr. 2013 ikke i drift, da AKV-Ellidshøj Nord nedlæggedes i 2013 jf. GEUS [2015].



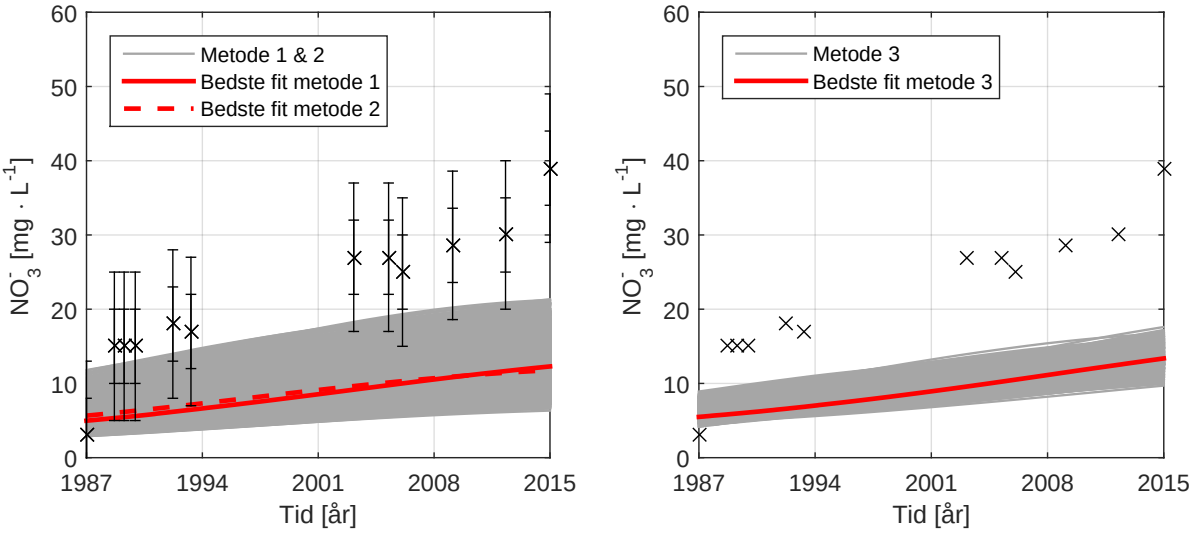
Figur 8.29. Vandforsyningsboring **34.2635**: Accepterede simuleringer for metode 1 og 2 samt maksimalt tilladelig afvigelse (venstre). Accepterede simuleringer for metode 3 (højre). Bedste fit er illustreret med rød.

Figur 8.29 viser, omvendt figur 8.28, et scenarie, hvor der generelt simuleres højere nitratkoncentrationer end hvad der måles. Dette vurderes, at dette skyldes at redoxgrænsen ved mergelhorisonten for dette tilfælde er defineret for lavt geologisk. En større strukturel sikkerhed i fastlæggelsen af redoxgrænsen, vil potentielt medfører at Modelkomplekset er i stand til at simulere og fremskrive nitratkoncentrationer for vandforsyningsboring 34.983 og 34.2635.



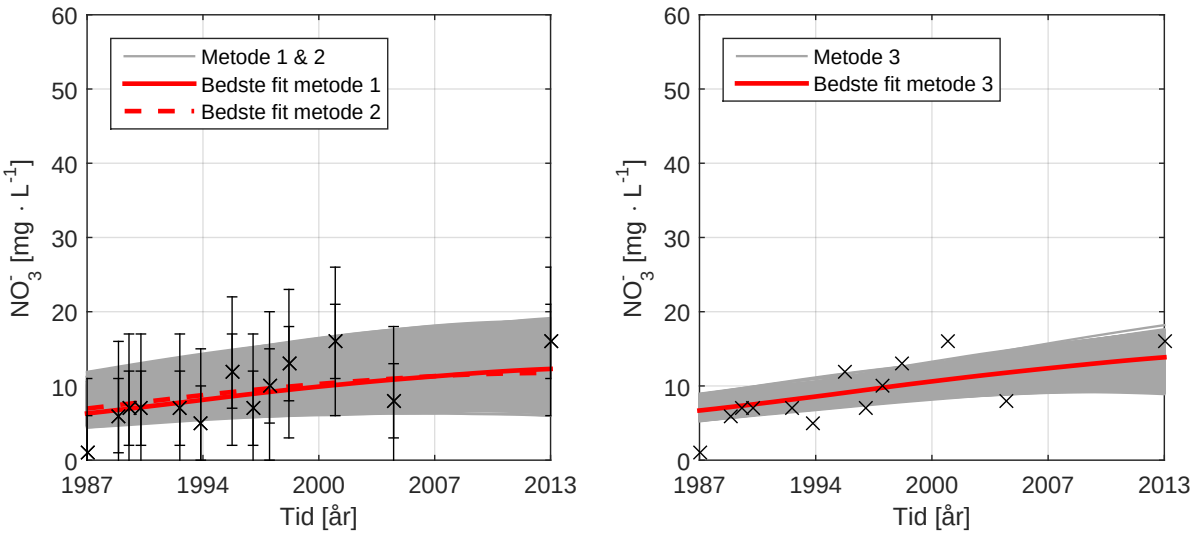
Figur 8.30. Vandforsyningsboring **34.1712**: Accepterede simuleringer for metode 1 og 2 samt maksimalt tilladelig afvigelse (venstre). Accepterede simuleringer for metode 3 (højre). Bedste fit er illustreret med rød.

Af figur 8.30 bemærkes, at en relativt stor del af simuleringer opfylder acceptkriteriet for metode 1 og 2. Desuden bemærkes det, at bedste fit for metode 1 og 3 overordnet følger den stigende tendens i den målte nitratkoncentration. Der foreligger dog en tendens til at de accepterede simuleringer ligger i det højere interval i nitratkoncentrationen nær grænsen for acceptabilitet.



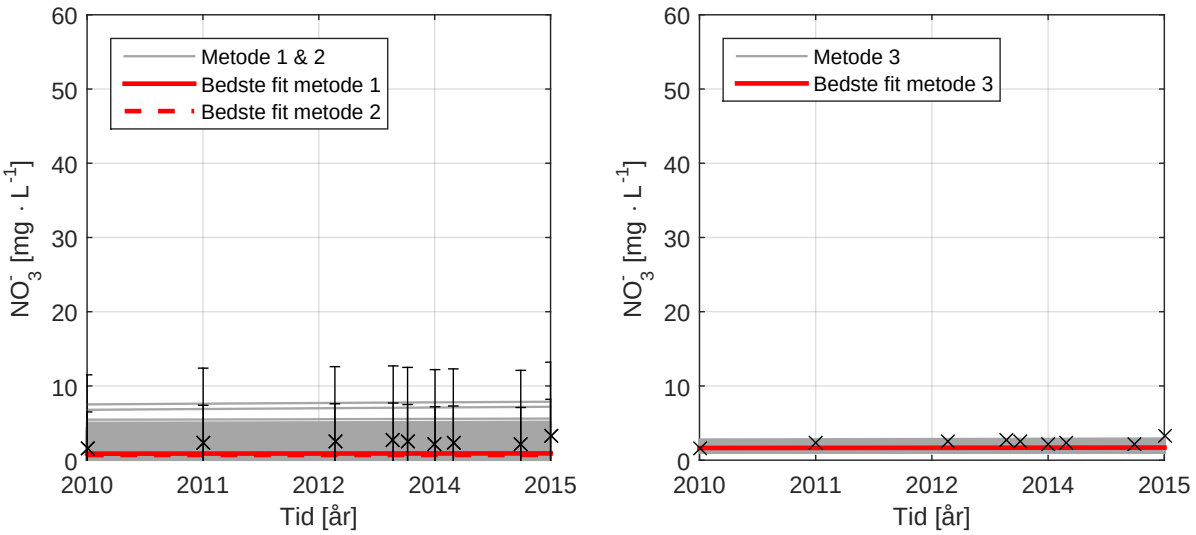
Figur 8.31. Vandforsyningsboring **34.1663**: Accepterede simuleringer for metode 1 og 2 samt maksimalt tilladelig afvigelse (venstre). Accepterede simuleringer for metode 3 (højre). Bedste fit er illustreret med rød.

Figur 8.31 viser generelt en underestimering af nitratkoncentrationen for den specifikke boring ved AKV-Drastrup 2. Dette er gældende med accepterede parametersæt på baggrund af alle evalueringsmetoder. Der måles bemærkelsæsværdigt høje koncentrationer i denne vandforsyningsboring sammenlignet med de resterende tilknyttet samme vandforsyningsanlæg. Det vurderes, at der forekommer strukturelle udfordringer for modellen af en sådan karakter, at Modelkomplekset ikke kan valideres for den specifikke vandforsyningsboring.



Figur 8.32. Vandforsyningsboring **33.1662**: Accepterede simuleringer for metode 1 og 2 samt maksimalt tilladelig afvigelse (venstre). Accepterede simuleringer for metode 3 (højre). Bedste fit er illustreret med rød.

Af figur 8.32 illustreres at Modelkomplekset ligger inden for det opstillede acceptkriterie for metode 1 og 2. Desuden bemærkes det, at den generelt stigende tendens for den målte nitrat koncentration modelleres med en relativ stor præcision. Det bemærkes at Modelkomplekset med de accepterede parametersæt er i stand til at simulere et koncentrationsforløb for vandforsyningsboring 34.1662 placeret mindre end 100 m fra vandforsyningsboring 34.1663, illustreret på figur 8.31. Heraf vurderes det, at der potentielt forekommer uregelmæssigheder for vandforsyningsboring 34.1663.



Figur 8.33. Vandforsyningsboring **33.1040**: Accepterede simuleringer for metode 1 og 2 samt maksimalt tilladelig afvigelse (venstre). Accepterede simuleringer for metode 3 (højre). Bedste fit er illustreret med rød.

Ved figur 8.33 bemærkes, at Modelkomplekset simulerer tilsvarende lave nitratkoncentrationer som det målte, hvor der ligeledes ikke simuleres en stigende tendens. Det er i midlertid interessant at undersøge, hvordan hver vandforsyningsboring kan evalueres separat efter de opstillede evalueringsmetoder. Med baggrund i de selvsamme accepterede simuleringer og dertilhørende parametersæt undersøges det, hvor stor en procentdel af disse der accepteres. Andelen beregnes derved som forholdet mellem antallet af accepterede simuleringer i kalibrering og antallet af accepterede simuleringer i valideringen. Dette giver et udtryk for tilhørsgraden til den enkelte vandforsyningsboring i evalueringen. Resultaterne er vist i tabel 8.5.

Tabel 8.5. Procentdel af de accepterede parametersæt opfyldende de opsatte acceptkriterier for hhv. metode 1, 2 og 3 for hvert observationspunkt til validering. Det bemærkes at samme antal accepteres i metode 1 og 2, hvilket skyldes samme kriterie.

	Metode 1 & 2	**Metode 3**
DGU Nr.	A_{acc} [%]	A_{acc} [%]
34.983	0,0	0,0
34.2728	100,0	0,0
34.2407	81,6	41,6
34.2365	30,0	0,0
34.1712	99,9	96,6
34.1663	7,2	12,5
34.1662	100,0	100,0
33.1040	100,0	36,3

Det bemærkes af tabel 8.5 at Modelkomplekset er udfordret i beskrivelsen af enkelte observationspunkter med de accepterede parametersæt. Ligeledes bemærkes, hvordan der forekommer maksimal procentvis difference mellem metode 1, 2 og 3 for observationspunkt 34.2728. Dette skyldes at evalueringsmetode 3 er udfordret, hvis alle målinger for observationspunktet er lig middelværdien for hele tidsserien. Det vurderes at Modelkomplekset er særligt udfordret i simulering af nitratkoncentrationer i observationspunkt 34.983, 34.2728, 34.2365 og 34.1663, hvilket også vurderes i den grafiske betragtning, hvilket betyder en aftagende validitet. Da validiteten af Modelkomplekset således er belyst og udfordret vil der i det følgende afsnit foretages supplerende undersøgelser for at klarlægge usikre elementer i Modelkomplekset, hvorinden der udfærdiges en diskussion af Modelkompleksets evne til at modellere nitrat fra udvaskning til kildeplads.

8.8 Diskussion af validering

På baggrund af det opsatte Modelkompleks kan der drages en række erfaringer. Ved de definerede evalueringsmetoder er Modelkomplekset i stand til at foretage en prædiktion med en usikkerhed i størrelsesordenen 5-10 $\mathrm{mg} \cdot \mathrm{L}^{-1}$ for de udvalgte observationspunkter. Særligt Metode 3 der er baseret på NSE vurderes særligt overbevisende til evaluering.
Der foreligger dog for Modelkomplekset en række udfordringer. Da der kræves anvendelighed på regional skala er den interne validitet afhængig af spredningen og antallet af vandforsyningsboringer, der kan accepteres med de opsatte krav. Da der foretages en manuel selektion af vandforsyningsboringer til både kalibrering og validering, vil der naturligt forekomme en vis selektionsbias. Det vurderes, at des flere vandforsyningsboringer, der kan inddrages i en validering des højere både intern og ekstern validitet for Modelkomplekset. Hvis en betragtelig mængde vandforsyningsboringer kan inddrages i valideringen, således den fulde regionale diversitet kan afdækkes, forventes det at Modelkomplekset kan valideres eksternt og derfor være reliabel til andre lokationer end Sydvest-området.
Det vurderes at Modelkomplekset er særligt udfordret for validiteten ved placering af redoxgrænsen ved mergelhorisonten. Med en halveringstid for nitrat i grundvandet i en størrelsesorden på 100-400 dage, vurderes det, at hvis transporten foregår under redoxgrænsen i en typisk størrelsesorden på >5 år, så vil koncentrationen reduceres i en sådan drastisk grad at fejlagtig placering af redoxgrænsen er den primære fejlkilde i Modelkomplekset. Dette vurderes at være grunden til en valideringsfejl for vandforsyningsboring 34.983. Omvendt placeres redoxgrænsen for 34.2365 fejlagtigt dybt, hvorfor der ikke forekommer tilstrækkelig reduktion. Det vurderes, at det er nødvendigt at undersøge for andre metoder til implementering af reduktionspotentiale. Det er ligeledes påvist, at Modelkomplekset ikke kan valideres uden reduktionspotentiale. Der kan heraf ikke simuleres og valideres en prædiktion uden

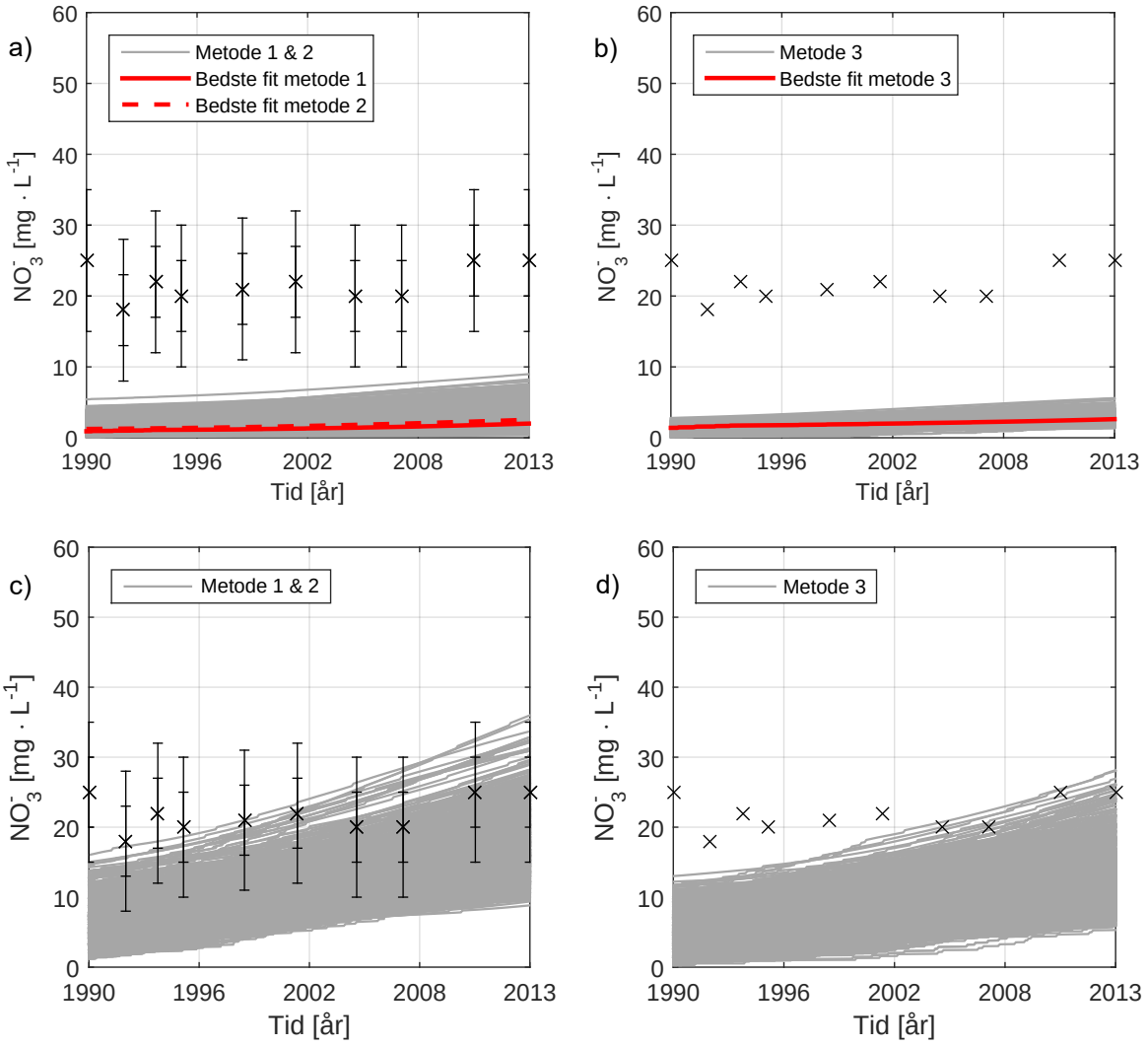
potentiale som ekstremscenarie.
For vandforsyningsboringer med en forholdsvis lav indvindingsmængde vurderes det at anvendelse af pumpehistorik med afvigelse fra reelle pumpeforhold vil medføre en aftagende validitet. Det er ligeledes fundet at generelt manglende beskrivelse af pumpehistorik, vanskeliggør en validering yderligere. Det vurderes at Modelkomplekset hovedsageligt er anvendelig til prædiktion for vandforsyningsboringer med en jævn og betragtelig indvindingsmængde med tilnærmelsesvist konstant defineret grundvandsdannende opland og sænkningstragt.
Da Modelkomplekset er relativt enestående i evnen til modellering af nitrat fra udvaskning til kildeplads er det ikke muligt at foretage en direkte sammenligning med andre metoder. En sammenligning med andre, eventuelt mere komplekse modeller, vil potentielt kunne bekræfte validiteten af Modelkomplekset.

8.9 Supplerende undersøgelser

På baggrund af den samlede validering af Modelkompleksets evne til at simulere nitratkoncentrationer i vandforsyningsboringer, vurderes Modelkomplekset særdeles anvendeligt. Der optræder dog særlige udfordringer i fastlæggelsen af en forventeligt redoxgrænse, hvilket kan føre til fejlestimering af den målte koncentration, hvorfor denne grænse studeres indledningsvis. Hernæst undersøges hvordan Modelkomplekset simulerer nitratkoncentration uden dobbeltporøsitet i den umættede zone. Afslutningsvis undersøges det om en yderligere grov forsimpling af den umættede zone kan anvendes i Modelkomplekset.

8.9.1 Modelkompleks uden nitratreduktion

Det vurderes, på baggrund af valideringen, at der for Modelkomplekset forekommer relativt markante udfordringer ved anvendelse af den fastlagte redoxgrænse. Betragtes **a** og **b** på figur 8.34, der tidligere blev præsenteret i afsnit 8.7 på side 97, er det tydeligt, at der forekommer en klar underestimering af nitratkoncentrationen, hvilket tilskrives fejlbehæftet placering af redoxgrænsen i netop oplandet for vandforsyningsboring 34.983 tilknyttet tidligere AKV-Ellidshøj Nord. Det undersøges således, hvordan koncentrationsforløbet for selvsamme vandforsyningsboring ser ud uden potentiale for reduktion af nitrat ved denitrifikation. Samme accepterede simuleringer med tilhørende parametersæt visualiseres med eneste forskel i at nedbrydningsraten $K = 0\,\text{måned}^{-1}$. Betragtes **c** og **d** på figur 8.34 illustreres koncentrationsforløbet uden redoxpotentiale, hvor **a** og **b** illustrerer med redoxpotentiale.



Figur 8.34. Illustration af effekten ved ophævelse af redoxpotentiale for vandforsyningsboring **34.983**: På figuren er **a** og **b** med nedbrydning, hvor **c** og **d** er uden. Accepterede simuleringer for metode 1 og 2 samt maksimalt tilladelig afvigelse (venstre). Accepterede simuleringer for metode 3 (højre).

Ved sammenligning på figur 8.34 er det tydeligt, hvordan koncentrationen er betragteligt højere uden potentiale for reduktion og derfor med tilsvarende større præcision fitter målingerne. Der er dog en tendens til overestimering af stejlheden for nitratudviklingen med en svag underestimering af nitratkoncentrationen i den begyndende del af måleperioden. Forskellen i simulering med og uden redoxpotentiale indikerer, at modellen er særligt sensitiv for placeringen af redoxgrænsen, da nitraten bliver reduceret i en sådan høj grad, når partiklen passerer redoxgrænsen.

8.9.2 Modelkompleks uden dobbeltporøsitet i umættet zone

Af parameteranalysen i afsnit 8.6 på side 83 er det fundet, at Modelkomplekset udviser relativ insensitivitet for de umættet zone specifikke parametre effektiv porøsitet, stejlhedsparameter og ikke mindst fyldningsgrad. Det er derfor essentielt at undersøge, hvordan Modelkomplekset kan valideres på samme måde uden dynamisk korrigering af sprække aktivering. Til dette opsættes et lignende udtryk for, hvordan Modellen evalueres op mod valideringspunkterne. Hertil er det således muligt at undersøge den procentvise forskel i andelen af accepterede simuleringer med og uden dobbeltporøsitet. Hvis der her, forekommer en markant forskel, er det et udtryk for at implementering af dobbelt porøsitet ikke er fuldkommen insensitiv. Tabel 8.6 viser forskellen i den procentvise andel af accepterede simuleringer for de udvalgte valideringspunkter med og uden modellering af dobbeltporøsitet i UZ-Modellen. Grøn

indikerer at med dobbelt porøsitet har en større andel accepterede sammenlignet med uden dobbeltporøsitet, mens rød indikerer det modsatte.

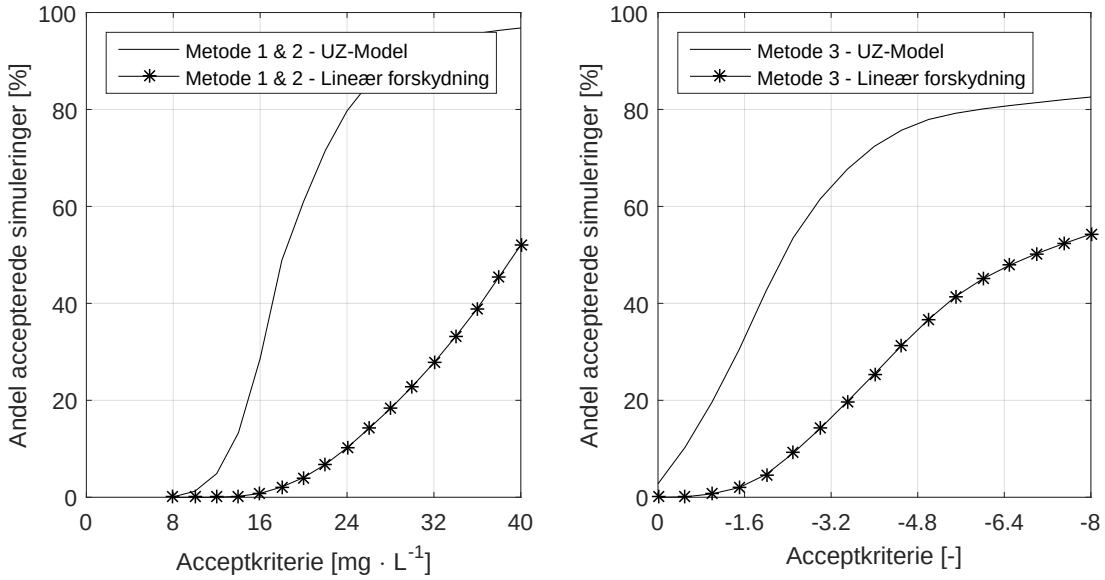
Tabel 8.6. Forskel i procentvis andel accepterede simuleringer med og uden modellering af dobbeltporøsitet i umættet zone.

	Metode 1 & 2	**Metode 3**
DGU Nr.	A_{acc} [%]	A_{acc} [%]
34.983	0,0	0,0
34.2728	0,0	0,0
34.2407	51,6	31,6
34.2365	20,0	0,0
34.1712	0,0	1,1
34.1663	7,2	10,1
34.1662	0,0	0,0
33.1040	0,0	8,2

Det bemærkes, af tabel 8.6, hvorledes Modelkomplekset generelt performer bedre i valideringen med implementering af dobbeltporøsitet i kalk i den umættede zone. Det er muligt, at opsætningen af en ny GLUE analyse fra start vil kunne medføre tilsvarende validering uden dobbelt porøsitet og derved manglende sprækkeaktivering i kalk. Det vælges ikke yderligere at undersøge effekten af det dobbelt porøse medium da det er generelt tvivlsomt og vanskeligt at validere, hvorvidt den anvendte metode til modellering af den umættede zone er fordelagtig. Da UZ-Modellen udgør basen for modelleringen af den umættede zone er det en nødvendighed at optimere denne, før der overvejes nye implementeringsmetoder for det dobbeltporøse medium. Det undersøges på baggrund af valideringen hvorledes en forsimpling ved en lineær-forskydnings metode kan modellere nitrattransport i umættede zone med samme tilfredsstillelse.

8.9.3 Lineær forskydning af transport i umættede zone

På samme måde som gennembrudskurver fra UZ-Modellen skaleres ved forskydning i den mættede zone ved partikeltracking, undersøges det om lineær forskydning af typekurver for udvaskningen kan udgøre modellering af nitrattransport i den umættede zone. Derved erstattes UZ-Modellen med lineær forskydning i Modelkomplekset for nærværende undersøgelse. Forskydningen muliggøre ved at fastlægges af spænd for transporthastigheder i hhv. sand, ler og kalk i den umættede zone. Da tykkelsen af hvert geologisk medie over grundvandspejlet er beregnet i afsnit 3.3 på side 16 er det muligt at beregne en transporttid gennem den umættede zone, hvis transporthastigheden fastholdes. Der anvendes samme 90-% konfidensinterval for transporthastigheder som præsenteret i tabel 6.3 i afsnit 6.6.3 på side 50. Konfidensintervallet anvendes, da det vurderes at øge sammenligningsgrundlaget at benytte samme størrelsesforhold for transporthastigheder i den umættede zone i forhold til UZ-Modellen. De fastsatte konfidensintervaller for transporthastigheder i den umættede zone samples uniformt til beregning af forskydningstiden gennem de tre medier.
Ligeledes anvendes samme totalporøstitet, nedbrydningsrate og udvaskningskorrigering for udvaskning. Der modelleres udelukkende enkelt porøst ved lineær forskydning. Der anvendes samme evalueringsmetoder samt observationspunkter til kalibrering som i nærværende kapitel præsenteret i afsnit 8.5 på side 78. Undersøgelsen baseres udelukkende på en grafisk betragtning af gennembrudskurver til de udvalgte observationspunkter på figur 8.2 på side 73, samt metodens evne til at opfylde tilsvarende acceptkriterier. Heraf vil der ikke foretages en lignende undersøgelse af parameterusikkerhed.
Figur 8.35 illustrerer, hvorledes den procentvise andel af accepterede simuleringer er afhængig af acceptkriteriet, for metode 1, 2 og 3. Modelkompleksets evne til at simulere nitratkoncentration med UZ-Model og lineær forskydning sammenholdes.



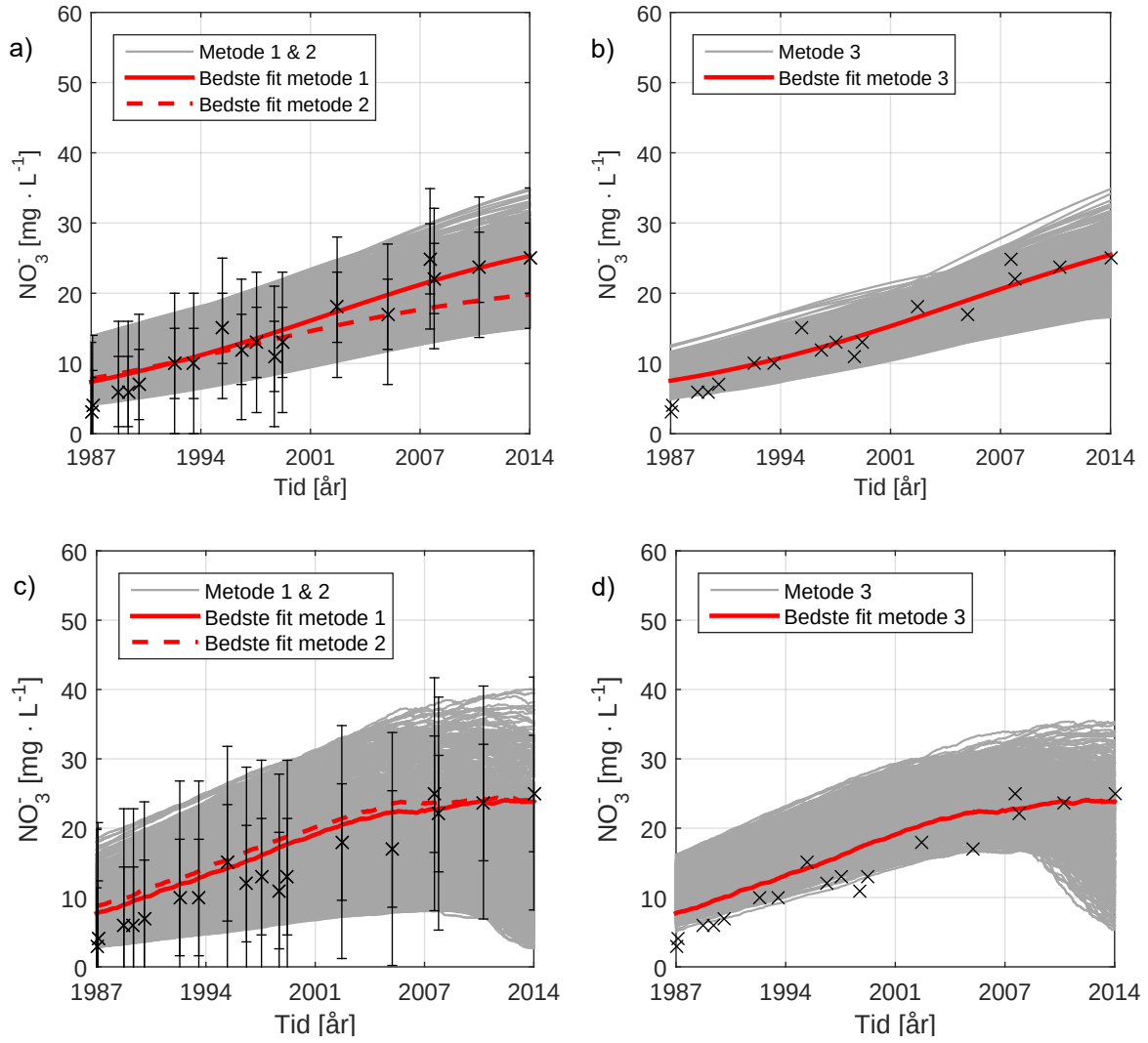
Figur 8.35. Sammenligning af andel accepterede simuleringer som funktion af acceptkriterie for anvendelse af hhv. UZ-Model og lineær skalering.

Det bemærkes af figur 8.35 at der ved anvendelse af UZ-Modellen accepteres en større procentvis andel simuleringer til samme acceptkriterie sammenlignet med anvendelse af lineær forskydning. Herved kan Modelkomplekset ikke med samme præcision tilpasses de observerede data, sammenlignet med et Modelkompleks inkluderende UZ-Modellen. Dette er gældende for alle evalueringsmetoder. Hvis præcist samme antal simuleringer skal godkendes for hver metode fås følgende resultat, vist i tabel 8.7.

Tabel 8.7. Acceptkriterier for lineær forskydning bestemt på baggrund af samme antal accepterede simuleringer.

Metode	**1** Limits of Acceptability	**2** Fuzzy Trapeziodial	**3** Nash-Sutcliffe Efficiency
N_{acc}	1256	1256	858
Acceptkriterie	$\lvert C_{m,i} - C_{s,i} \rvert \leq 16{,}8\,\mathrm{mg} \cdot \mathrm{L}^{-1}$	$\lvert C_{m,i} - C_{s,i} \rvert \leq 16{,}8\,\mathrm{mg} \cdot \mathrm{L}^{-1}$	$-1{,}1 < \ell_{\mathrm{global}}$

Anvendes acceptkriterier som angivet i tabel 8.7 er det muligt at undersøge, hvorledes lineær forskydning kan anvendes til modellering af nitrattransport i den umættede zone. Da det er fundet, at lineær forskydning ikke i samme grad evner at simulere nitratkoncentration i nærværende opsætning accepteres en større afvigelse sammenlignet med UZ-Modellen. Som eksempel illustreres de accepterede simuleringer ved anvendelse af lineær forskydning for en udvalgt vandforsyningsboring på figur 8.36. På figuren illustrer **a** og **b** gennembrudskurver for UZ-Modellen, hvor **c** og **d** illustrer gennembrudskurver ved lineær forskydning.



Figur 8.36. Eksempel på implementering af lineær forskydning for vandforsyningsboring **34.1664**: På figuren viser **a** og **b** gennembrudskurver fra UZ-Modellen, hvor **c** og **d** viser gennembrudskurver ved lineær forskydning. Accepterede simuleringer for metode 1 og 2 samt maksimalt tilladelig afvigelse (venstre). Accepterede simuleringer for metode 3 (højre). Bedste fit er illustreret med rød.

Det bemærkes på figur 8.36, for **c** og **d**, at der forekommer et fald i nitratkoncentrationen for nogle af de accepterede simuleringer. Det vurderes dog ud fra en umiddelbar grafisk betragtning at der ved implementering af lineær forskydning ikke forekommer tilstrækkelig udjævning af afstrømningkurven. Dette skyldes de anvendte typekurver for udvaskning, men kan potentielt også skyldes at antallet af partikler pr. beregningscelle ikke er tilstrækkeligt til at udjævne gennembrudskurven ved foldningsintegration. Heraf vurderes det, at UZ-Modellen er fordelagtig i tilfælde af at antallet af indsatte partikler i grundvandsmodellen ønskes minimeret. Herudover bemærkes det, at der ved anvendelse af UZ-Modellen kan opsættes relativt strengere acceptriterier, hvilket betyder en større præcision sammenlignet med lineær forskydning af typekurver. I det følgende afsnit vil der udarbejdes en sammenfatning på baggrund af erfaringer opnået i nærværende kapitel.

8.10 Sammenfatning

På baggrund af den stokastiske analyse af Modelkompleksets evne til at simulere nitratkoncentrationer fra udvaskning til kildeplads, kan der drages en række erfaringer. Dette med en usikkerhed i størrelsesordenen 5-10 $\mathrm{mg \cdot L^{-1}}$. Det konkluderes at Metode 3 generelt er anvendelig som evaluering af Modelkomplekset. Generelt er Modelkomplekset i stand til at simulere nitratkoncentrationer af forskellig karakter, både

kritiske områder og områder, hvor der ikke kan måles nogen form for stigende tendens. Desuden evner Modelkomplekset at simulere på både udbredt regional skala og på kildeplads skala med forholdsvis kort afstand mellem vandforsyningsboringerne. Ud af de 100.000 udførte Monte Carlo simuleringer accepteres ca. 1 % af de tilknyttede parametersæt, hvilket er tilstrækkeligt til afdækkelse af parametertendens i dotty plots.
Med udgangspunkt i den udførte analyse af parameterusikkerhed forefindes det, at der påvises særlig ufølsomhed for stejlhedsparameteren i ler og kalk, samt den effektive porøsitet i alle medier. Desuden bemærkes det, at metoden for indførsel af dobbeltporøs sprækkeaktivering ikke er særligt følsom ved variation af fyldningsgraden. Da ni ud af tolv parametre direkte beskriver transporten af nitrat gennem først den umættede og dernæst mættede zone i tre forskellige medier, vil der heriblandt disse parametre forekomme korrelation. Desuden er det fundet at disse parametre potentielt kan skalere koncentrationsforløbet horisontalt i tid og derved styre, hvornår der skal forekomme gennembrud til en vandforsyningsboring.
På samme måde hvormed der skaleres horisontalt i tid, kan gennembrudskurven skaleres vertikalt i nitratkoncentration. Dette sker ved udvaskningskorrigeringen. Derfor er mere raffineret beskrivelse af nitratudvaskningen ønskværdig, hvis inputusikkerheden hertil skal minimeres. En anden parameter til vertikal skalering er nedbrydningsraten. Det findes dog at hvis nedbrydningsraten er af en tilstrækkelig størrelse, så vil nitraten nedbrydes tilnærmelsesvis fuldstændigt, hvis partiklen transporteres under redoxgrænsen. På baggrund af de udvalgte observationspunkter vurderes det, at der skal forekomme reduktion af nitrat hvis acceptkriterierne skal overholdes. Fejlagtig placering af redoxgrænsen vil begrænse Modelkompleksets evner til simulering af nitratkoncentrationer, da Modelkomplekset udviser særligt sensitivitet for denne grænse. Det er fundet at implementering af dobbeltporøsitet i den umættede zone har en betydning for valideringen, men det er ikke klarlagt, hvorledes implementeringen kan valideres. Lineær skalering kan potentielt anvendes til modellering af den umættede zone som erstatning. Det er fundet at lineær skalering ikke er anvendelig i nærværende konfiguration. Modelkomplekset er således opsat og der er foretaget en evaluering af evne til at simulere nitratkoncentrationer ved stokastisk anvendelse. Det vurderes at Modelkomplekset er anvendeligt til at fremskrive nitratproblematikken i en risikovurdering.

Del IV

Risikovurdering

Kapitel 9

Risikovurdering for Sydvest-området

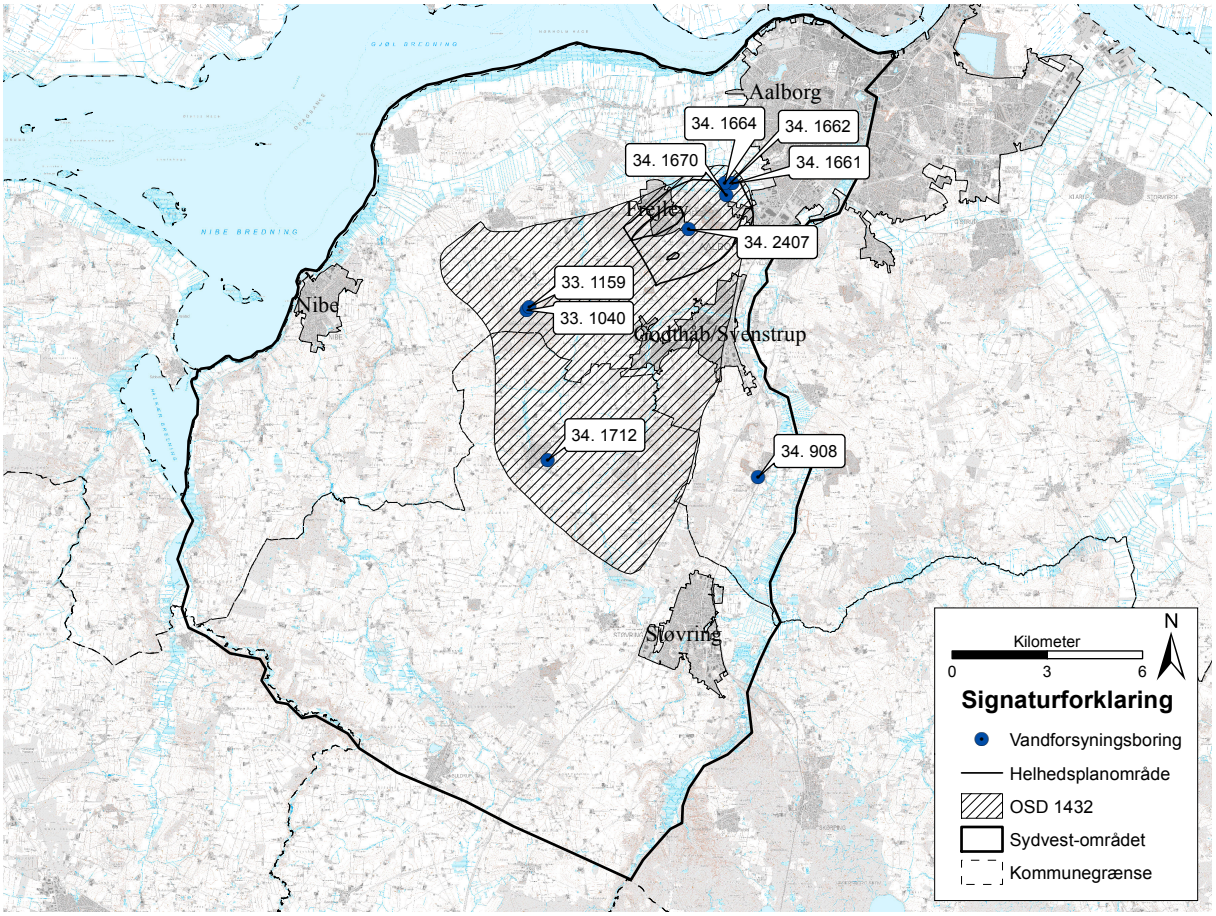
Det er påvist at nitratproblematikken for Sydvest-området i den nærmeste fremtid kan betyde sløjfede vandforsyningsboringer. En stigende tendens udgør en risiko for forsyningssikkerheden af rent drikkevand til den almene forbruger. I risikovurderingen undersøges det om den generelle tendens for stigende nitratkoncentrationer i den almene vandforsyning er forsættende i fremtiden. Med udgangspunkt i det opsatte Modelkompleks er det muligt at udarbejde en risikovurdering for Sydvest-området. Risikovurderingen vil, som beskrevet i problemformuleringen i afsnit 4 på side 23, omhandle en evaluering af effekten af allerede implementerede indsatsplaner. Desuden vil risikovurderingen omhandle effekten af den nyligt vedtagede Fødevare- og landbrugspakke. Afslutningsvis udfærdiges et ekstremscenarie, hvor der indføres naturarealer i hele de grundvandsdannende oplande til en række udvalgte vandforsyningsboringer.

9.1 Formål

Formålet med risikovurderingen er at klarlægge, hvordan nitratproblematikken for Sydvest-området udvikles i fremtiden. Det er essentielt, at fastslå om nogle vandforsyningsboringer er lukningstruede og i så fald, hvornår en eventuel sløjfning nødvendiggøres. Med baggrund i det opsatte Modelkompleks er det interessant at undersøge, hvordan initiativer til ændring af nitratudvaskningen har en effekt på nitratudviklingen for den almene vandforsyning. De accepterede parametersæt tilknyttet Metode 3 anvendes i risikovurdering, da netop denne metode viser særligt stor prædiktionsevne i kalibreringen. Modelkomplekset kan anvendes til evaluering af både implementerede og planlagte indsatsplaner, samt regulering på nationalt niveau. Desuden kan Modelkomplekset anvendes til screening af områder, hvor en indsats vil have en særligt stor beskyttende effekt mod nitrat og omvendt. Risikovurderingen har udover en fremskrivning af nitrat til formål at belyse følgende elementer:

- Effekt af helhedsplan
- Effekt af Fødevare- og landbrugspakke
- Effekt ved etablering af naturarealer

Med baggrund i de opstillede elementer vil risikovurderingen omhandle en vurdering af, om allerede udarbejdede og realiserede indsatsplaner i helhedsplanområdet, vist i figur 9.1, reelt har en effekt i forhold til at beskytte grundvandet mod stigende nitratkoncentrationer. Hertil undersøges det, hvorvidt den vedtagede Fødevare- og landbrugspakke og den øgede nitratudvaskning som følge udgør en risiko i fremtiden. Derudover undersøges flere oplande, med henblik på at klarlægge om nogle af disse er påvirkelige overfor arealomlægning, således det kan vurderes, om iværksatte og fremtidige indsatsplaner vil have en beskyttende effekt og hvilke grundvandsdannende oplande der bør prioriteres højest i forhold til beskyttende tiltag. Figur 9.1 viser de anvendte vandforsyningsboringer til risikovurdering.



Figur 9.1. Placering af de ni udvalgte vandforsyningsboringer.

En fremskrivning til år 2100 vurderes tilstrækkelig i forhold til beskrivelse af nitratproblematikken på både kort og lang sigt. Risikovurderingen foretages på baggrund af vandforsyningsboringerne samt de accepterede parametersæt, anvendt i kapitel 8 på side 71. Fem af ni vandforsyningsboringer ligger i helhedsplanområdet, og kan derfor anvendes bl.a til vurdering af effekten af implementerede indsatsplaner. Det bemærkes at samtlige vandforsyningsboringer er beliggende i eller nær OSD 1432, hvorfor risikovurderingen centreres omkring netop dette område. Til undersøgelse af de opstillede elementer i risikovurdering udfærdiges en række scenarier for fremtiden.

9.2 Opstilling af scenarier

For hvert scenarie til risikovurderingen er det nødvendigt at estimere nitratudvaskningen fra og med år 2016 til år 2100 for at kunne fremskrive nitratkoncentrationen. Denne fremskrivning skal repræsentere udvaskningen fra landbrug-, natur- og byarealer. Fremskrivningen af nitratudvaskningen for natur- og byarealer forventes ikke at ændres betydeligt, hvorfor de bibeholdes til nitratudvaskningen, som beskrevet i afsnit 6.5.2 på side 46.
En fremskrivning af nitratudvaskningen for landbrugsarealer er forbundet med relativ stor usikkerhed, da dette er påvirket af, hvilke plan- og lovgivningsmæssige initiativer der både statsligt og kommunalt iværksættes og implementeres jf. afsnit 3.2 på side 12. Det vurderes at ændret nedbørsmængde- og mønster er af mindre betydning, hvorfor usikkerheden ved fremskrivningen af nedbør i nærværende rapport ikke belyses. Yderligere er det uvist, hvordan udviklingen i dyrkningen af landbrugsarealer vil være frem til år 2100, og om den fremtidige teknologi vil have en indflydelse herpå.
For en fremskrivningsperiode på 85 år vurderes det, at det nuværende niveau i nitratudvaskningen fra landbrugsarealer, vil være et acceptabelt bud på en udvaskning. Derfor vil udvaskningen for

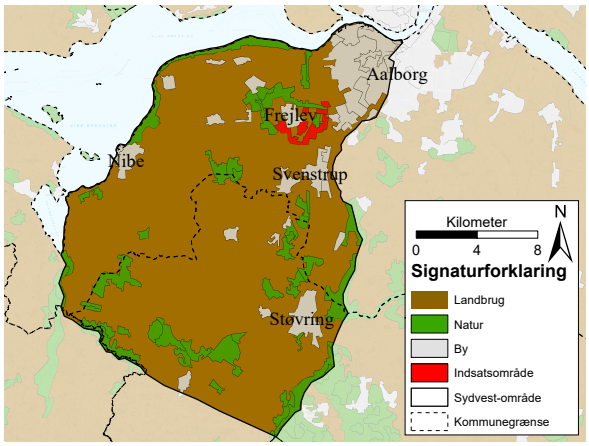
landbrugsarealer være konstant fra og med år 2016 til år 2100, da det ikke vurderes muligt at forudsige variationer i udvaskningen.
Til udarbejdelsen af risikovurderingen opstilles fire scenarier til fremskrivning af nitrat til år 2100. Scenarierne er som følgende;

- **Scenarie 1**: Referencescenarie
- **Scenarie 2**: Uden indsatsplaner i helhedsplanområdet
- **Scenarie 3**: Implementering af Fødevare- og landbrugspakken
- **Scenarie 4**: Totalomlægning i grundvandsdannende oplande

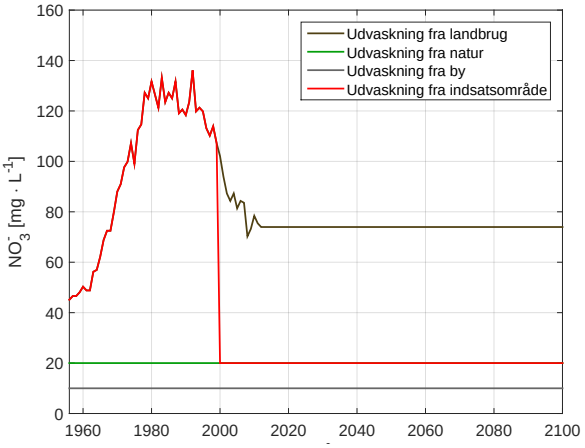
Scenarierne vil i de følgende afsnit uddybes i tilsvarende rækkefølge som ovenstående. Der vil for hvert af de følgende scenarier tilknyttes arealanvendelse, samt en typekurve til beskrivelse af nitratudvaskningen for hver arealtype. Beskrivelsen og fastlæggelsen af de fire opstillede scenarier muliggør, at der for de følgende afsnit kan foretages en sammenligning scenarierne imellem. Scenarie 1 er en fremskrivning af nitratkoncentrationen, hvor de nuværende forhold i Sydvest-området bibeholdes. Scenarie 1 sammenholdes med Scenarie 2, 3, og 4, hvilket giver mulighed for at evaluere effekten af hhv. de etablerede indsatsplaner, Fødevare- og landbrugspakken og etableringen af naturarealer. Scenarie 1 vil derfor fungere som et referencescenarie. I det følgende afsnit forefindes en uddybende beskrivelse af hvert scenarie.

9.2.1 Scenarie 1

Det første scenarier anvendes til beskrivelse af de nuværende forhold i et referencescenarie. Derfor anvendes arealanvendelse som beskrevet i afsnit 6.5.2 på side 46. Arealanvendelsen for Sydvest-området er illustreret på figur 9.2, indeholdende arealtyperne landbrug, natur og by, samt et indsatsområde.



Figur 9.2. Oversigt over arealanvendelsen i Sydvest-området for Scenarie 1.



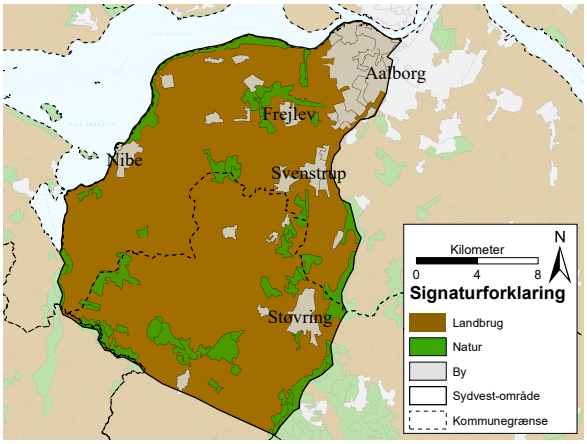
Figur 9.3. Typekurver for nitratudvaskningen tilhørende arealanvendelsen for Scenarie 1.

Det bemærkes af figur 9.3 at nitratudvaskningen i fremskrivningsperioden antages at være konstant, da det som nævnt er forbundet med relativ stor usikkerhed at forudsige en varierende nitratudvaskning. Nitratudvaskningen for landbrugsarealerne i området fastholdes ved scenarie 1 på udvaskningskoncentrationen gældende for år 2015. Indsatsområdet omlægges i år 2000 fra landbrug til natur, jf. 6.5.2 på side 46.

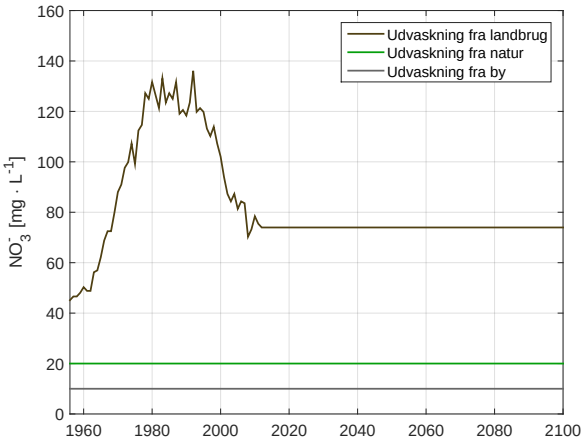
9.2.2 Scenarie 2

Det følgende scenarie etableres med det formål at undersøge, hvordan tilstanden i helhedsplanområdet udvikles, hvis ikke indsatser implementeredes i år 2000. Ved fjernelsen af indsatsområdet muliggøres det at se effekten af den realiserede indsatsplan. Arealanvendelsen, på nær i indsatsområdet, er uændret og tilsvarende Scenarie 1. Scenarie 2 giver derfor en vurdering af, hvordan nitratkoncentrationen i de

udvalgte vandforsyningsboringer udvikles uden de allerede etablerede indsatser. Arealanvendelsen for Scenarie 2 er illustreret på figur 9.4 uden indsatsområde.



Figur 9.4. Oversigt over arealanvendelsen i Sydvest-området for Scenarie 2.

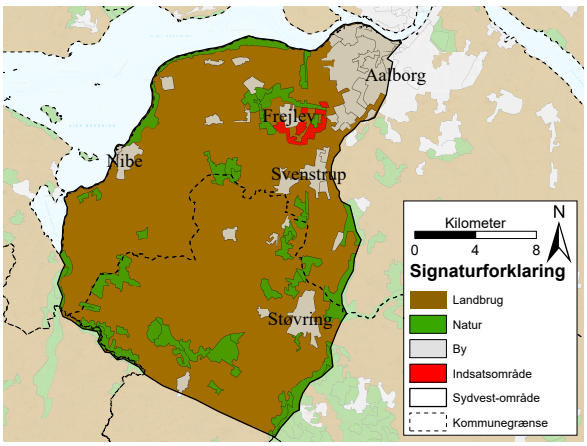


Figur 9.5. Typekurver for nitratudvaskningen tilhørende arealanvendelsen for Scenarie 2.

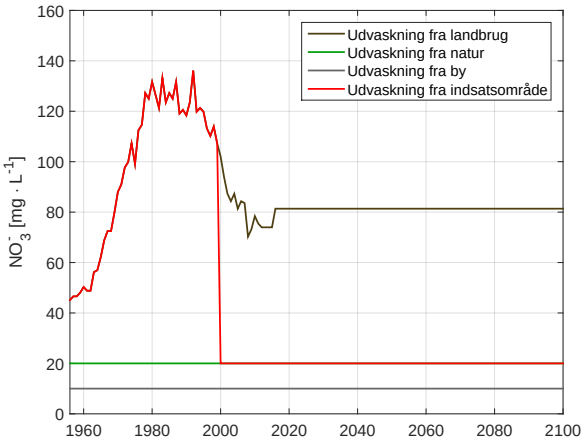
Nitratudvaskningen for Scenarie 2, som er illustreret på figur 9.5, er tilsvarende Scenarie 1 jf. figur 9.3 med undtagelse af, at nitratudvaskningen fra indsatsområdet er fjernet.

9.2.3 Scenarie 3

Det tredje scenarie anvender samme arealanvendelse som Scenarie 1. I Scenarie 3 medregnes den vedtagede Fødevare- og landbrugspakke, som er beskrevet i afsnit 3.2 på side 12, således at nitratudvaskningen fra landbrugsarealer forøges med 10 % fra og med år 2016, jf. afsnit 3.2 på side 12. Med Scenarie 3 er det muligt at undersøge, hvilken effekt forøgelsen i nitratudvaskningen har på nitratkoncentrationen i vandforsyningsboringerne. Desuden muliggøres det at undersøge om visse grundvandsdannende oplande er påvirkelige overfor netop denne forøgelse i udvaskningen fra landbruget.



Figur 9.6. Oversigt over arealanvendelsen i Sydvest-området for Scenarie 3.

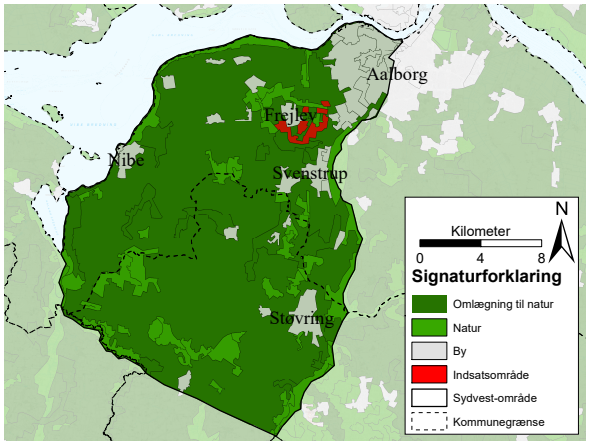


Figur 9.7. Typekurver for nitratudvaskningen tilhørende arealanvendelsen for Scenarie 3.

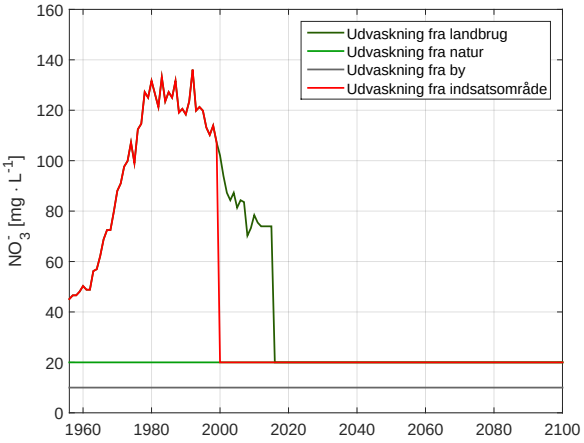
Forøgelsen i nitratudvaskningen er illustreret på figur 9.7, hvor koncentrationen er forøget med de førnævnte 10 %. De resterende typekurver er uændrede.

9.2.4 Scenarie 4

For det fjerde og sidste scenarie erstattes samtlige landbrugsarealer med naturarealer. Scenarie 4 adskiller sig derfor markant fra scenarie 1, 2 og 3 jf. figur 9.8. Fra år 2016 omlægges samtlige landbrugsarealer til natur med tilsvarende nitratudvaskning. Jf. opsætning af Modelkomplekset er det udelukkende det grundvandsdannende opland som påvirker nitratkoncentrationen. Derfor opnås samme effekt som ved kun at ændre de grundvandsdannende oplande.



Figur 9.8. Oversigt over arealanvendelsen i Sydvest-området for Scenarie 4.

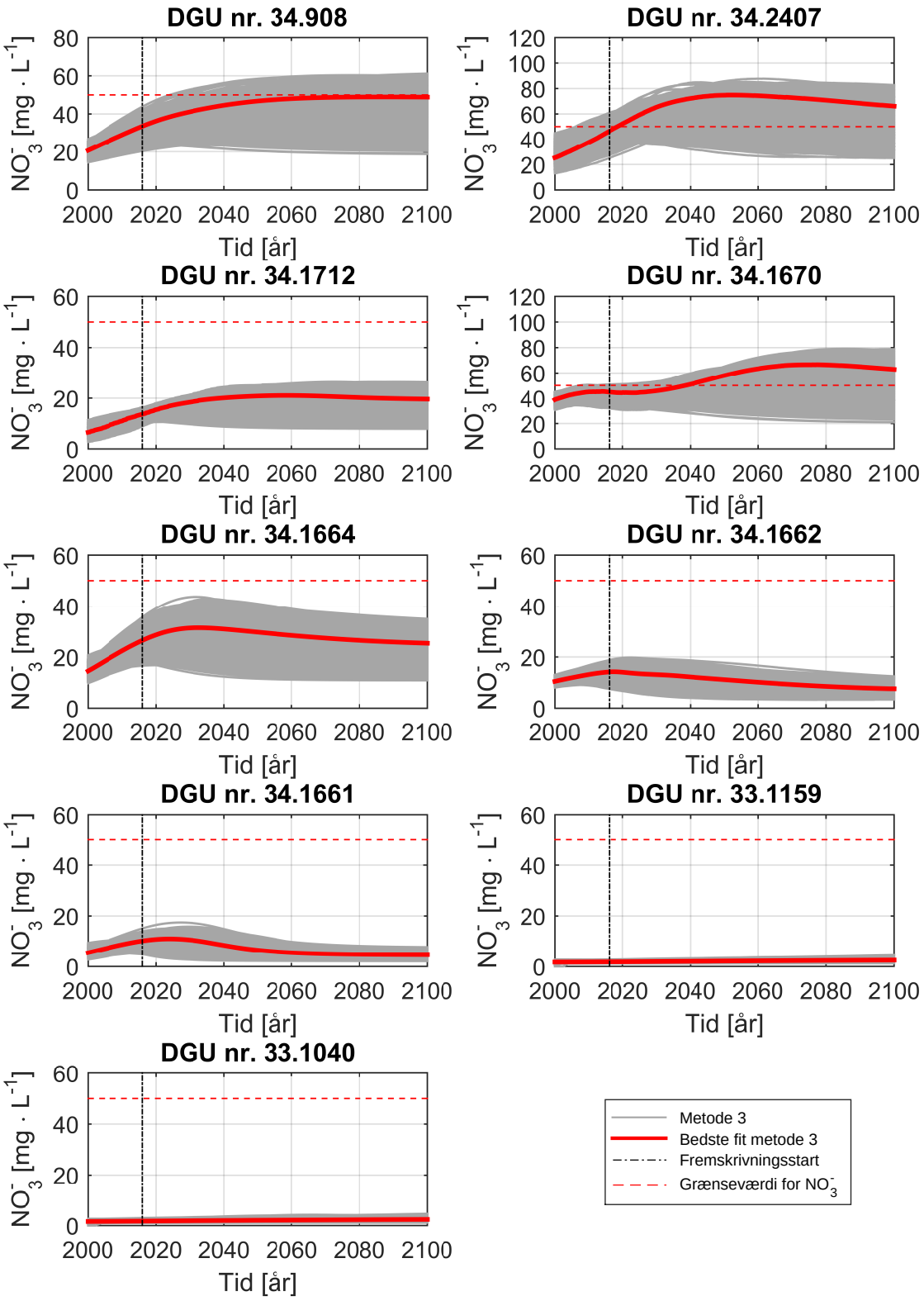


Figur 9.9. Typekurver for nitratudvaskningen tilhørende arealanvendelsen for Scenarie 4.

Figur 9.9 illustrerer typekurverne for de fire arealtyper på figur 9.8, hvor nitratudvaskningen fra natur- og byarealer samt indsatsområdet er tilsvarende Scenarie 1. Nitratudvaskningen fra landbrugsarealer, der omlægges til naturarealer følger udvaskningen for landbrug til og med år 2015, hvorefter udvaskningen er tilsvarende natur fra 2016.
Det følgende afsnit vil omhandle en fremskrivning af nitratkoncentrationen for Scenarie 1, hvor effekterne fra Scenarie 2, 3 og 4 efterfølgende vil beskrives.

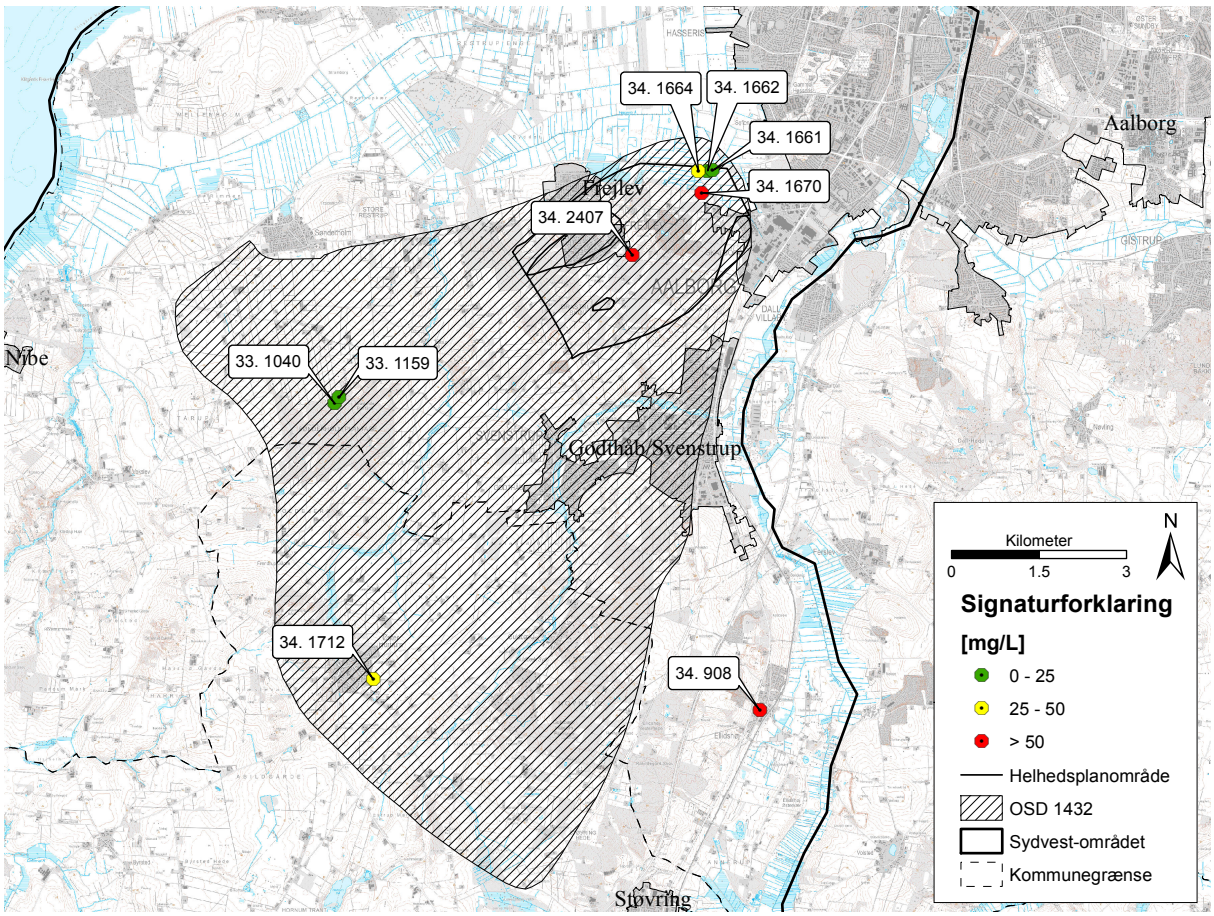
9.3 Fremskrivning til år 2100

I det følgende afsnit udfærdiges en risikovurdering på baggrund af resultater for nitratfremskrivningen for Scenarie 1. Det undersøges, hvorvidt der for de udvalgte vandforsyningsboringer forekommer en risiko for overskridelse af grænseværdien for nitrat mod år 2100. Samtidigt undersøges det, hvornår en potentiel overskridelse forekommer, samt hvornår en aftagende effekt på nitratkoncentrationen kan påvises. Risikovurderingen udfærdiges for ni vandforsyningsboringer, hvor den geografiske placering er vist på figur 9.1 på side 114.
Til risikovurderingen bestemmes andelen af simuleringer over grænseværdien, hvor der beregnes et 90 %-konfidensinterval på baggrund af denne. Den maksimale- og minimale simulerede koncentration af nitrat bestemmes ligeledes. Desuden undersøges det i hvilket årstal simuleringerne gennemsnitligt aftager ved den maksimale koncentration. Andelen af den samlede transporttid forekommende under redoxgrænsen angives ligeledes i risikovurderingen.
Figur 9.10 viser simuleret nitratkoncentration for fremskrivningen til år 2100 for de udvalgte vandforsyningsboringer.



Figur 9.10. Fremskrivning af nitratkoncentrationen for alle ni vandforsyningsboringer i Scenarie 1. Bemærk at den vertikale akse er skaleret og tilpasset til hver vandforsyningsboring.

Figur 9.11 viser den maksimalt simulerede nitratkoncentration for hver vandforsyningsboring. Hertil præsenteres resultater der anvendes i den samlede risikovurderingen i tabel 9.1. Vandforsyningsboringerne klassificeres efter risiko for overskridelse af grænseværdien for nitrat.



Figur 9.11. Maksimalt simuleret nitratkoncentration for vandforsyningsboringerne i fremskrivningsperioden.

Tabel 9.1. Scenarie 1: Andelen af simuleringer over grænseværdien, 90 %-konfidensinterval for antal år før grænseværdi overskrides, samt den maksimale og minimale nitratkoncentration. Derudover er det gennemsnitslige toppunkt i nitratkoncentrationen angivet og andelen af den samlede transporttid forekommende under redoxgrænsen, $a_{tp,redox}$. Vandforsyningsboringer kategoriseres efter maksimal nitratkoncentration som for figur 9.11.

DGU nr.	Sim. o. grænseværdien [%]	$t_{90\%}$ [år]	Maks. NO_3^- [mg · L^{-1}]	Min. NO_3^- [mg · L^{-1}]	Toppunkt [år]	$a_{tp,redox}$ [%]
34.908	15,7	20 - 78	61,2	18,7	2068	53,7
34.2407	60,0	3 - 67	87,8	24,9	2042	0,0
34.1712	-	-	26,4	7,9	2048	58,5
34.1670	60,8	16 - 44	79,1	29,0	2059	5,4
34.1664	-	-	43,7	10,9	2030	81,9
34.1662	-	-	19,8	3,3	2017	88,8
34.1661	-	-	17,4	2,0	2021	92,3
33.1159	-	-	4,4	1,1	2083	97,8
33.1040	-	-	4,7	1,0	2083	97,0

Det bemærkes af tabel 9.1 at der for hvert scenarie angives en andel simuleringer over grænseværdien. Andelen angiver hvor stor en procentdel af det totale antal accepterede simuleringer. Desuden beregnes et 90 %-konfidensinterval, der angiver, hvornår grænseværdien med 90 % sandsynlighed bliver overskredet. Derudover er den maksimale og minimale nitratkoncentration for samtlige scenarier angivet. Ydermere angiver tabel 9.1 i hvilket år det gennemsnitslige toppunkt for nitratkoncentration forekommer.

34.908

Ved fremskrivning af nitratkoncentrationen for vandforsyningsboringen overskrider 15,7 % af simuleringerne grænseværdien. Af denne procentdel vil der med 90 % sandsynlighed gå mellem 20 og 78 år, før grænseværdien for nitrat overskrides. Som vist på figur 9.10 simuleres en forsat stigende tendens for størstedelen af fremskrivningsperioden frem mod ca. år 2060, hvorefter der forekommer en stagnation. Den hhv. maksimale og minimale nitratkoncentration simuleres til 61,2 $mg \cdot L^{-1}$ og 18,7 $mg \cdot L^{-1}$, hvorfor grænseværdien potentielt overskrides med op i mod 11,2 $mg \cdot L^{-1}$. Det gennemsnitlige toppunkt for simuleringerne passeres i år 2068, svarende til 52 år efter fremskrivningsstart.

Det vurderes på baggrund af resultaterne i tabel 9.1 og figur 9.10, at vandforsyningsboring 34.908 er i risiko for overskridelse af grænseværdien indenfor en relativt begrænset tidsperiode, hvor grænseværdien potentielt brydes allerede om 20 år. Af den totale transporttid i grundvandet foregår 53,7 % under redoxgrænsen, hvorfor det vurderes at reduktionspotentialet er forholdsvist lavt, hvilket medvirker en forøget nitratsårbarhed for det grundvandsdannende opland. Ligeledes vurderes det at grundvandsbeskyttende tiltag vil have markant effekt på nitratkoncentrationen, da 74 % af arealanvendelsen for det grundvandsdannende opland er udgjort af landbrug.

34.2407

For vandforsyningsboringen overskrider 60,0 % af simuleringerne grænseværdien. Af denne procentdel vil der med 90 % sandsynlighed gå mellem 3 og 66 år, før grænseværdien for nitrat overskrides. Den kortsigtede risiko for overskridelse bekræftes af at simuleringen overskrider grænseværdien indenfor få år. Betragtes vandforsyningsboringen visuelt på figur 9.10, bemærkes en stigende nitratkoncentration i hele fremskrivningsperioden med aftagende hældning. Den hhv. maksimale og minimale nitratkoncentration simuleres til 87,8 $mg \cdot L^{-1}$ og 24,9 $mg \cdot L^{-1}$, hvorfor grænseværdien potentielt overskrides med op i mod 37,8 $mg \cdot L^{-1}$. Det gennemsnitlige toppunkt for simuleringerne passeres i år 2042, svarende til 26 år efter fremskrivningsstart.

Der forekommer ikke transport under redoxgrænsen, hvorfor reduktionspotentialet ikke er tilstede, hvilket medvirker til en relativt stærkt forøget nitratsårbarhed for det grundvandsdannende opland.

Det vurderes på baggrund af resultaterne i tabel 9.1 og figur 9.10, at vandforsyningsboring 34.2407 er i risiko for overskridelse af grænseværdien indenfor en relativt begrænset tidsperiode, hvor grænseværdien potentielt brydes allerede om 3 år.

34.1712

Fremskrivning af nitratkoncentrationen for vandforsyningsboringen viser ingen overskridelse af grænseværdien. Den hhv. maksimale og minimale nitratkoncentration simuleres til 26,4 og 7,9 $mg \cdot L^{-1}$, hvorfor der simuleres maksimalt 23,6 $mg \cdot L^{-1}$ under grænseværdien. Det gennemsnitlige toppunkt for simuleringerne passeres i år 2048, svarende til 32 år efter fremskrivningsstart.

Af den totale transporttid i grundvandet foregår 58,5 % under redoxgrænsen, hvorfor det vurderes at reduktionspotentialet er forholdsvis højt, hvilket medvirker en formindsket nitratsårbarhed for det grundvandsdannende opland grundet de reducerede forhold.

Det vurderes at vandforsyningsboring 34.1712 er i mindre risiko for overskridelse af grænseværdien indenfor fremskrivningsperioden.

34.1670

Ved fremskrivning af nitratkoncentrationen overskrider 60,8 % af simuleringerne grænseværdien. Af denne procentdel vil der med 90 % sandsynlighed gå mellem 16 og 44 år, før grænseværdien for nitrat overskrides. Den hhv. maksimale og minimale nitratkoncentration simuleres til 79,1 $mg \cdot L^{-1}$ og 29,0 $mg \cdot L^{-1}$, hvorfor grænseværdien potentielt overskrides med op i mod 29,1 $mg \cdot L^{-1}$. Det gennemsnitlige toppunkt for simuleringerne passeres i år 2059, svarende til 43 år efter fremskrivningsstart.

Det vurderes på baggrund af resultaterne i tabel 9.1 og figur 9.10, at vandforsyningsboring 34.1670 er i

risiko for overskridelse af grænseværdien indenfor en relativt begrænset tidsperiode, hvor grænseværdien i værste fald brydes om 16 år. Der forekommer en relativt begrænset transporttid under reducerede forhold, hvilket medvirker til en relativt stærkt forøget nitratsårbarhed for det grundvandsdannende opland.
For vandforsyningsboring 34.1670 vurderes det, at der er udbredt risiko for nitratkoncentrationer over grænseværdien.

34.1664
For vandforsyningsboringen simuleres ingen overskridelse af grænseværdien. Den hhv. maksimale og minimale nitratkoncentration simuleres til 43,7 og 10,9 $mg \cdot L^{-1}$, hvorfor der simuleres maksimalt 6,3 $mg \cdot L^{-1}$ under grænseværdien. Der simuleres altså nitratkoncentration tilnærmelsesvis ved grænseværdien for denne vandforsyningsboring. Det gennemsnitlige toppunkt for simuleringerne passeres i år 2030, svarende til 14 år efter fremskrivningsstart.
Af den totale transporttid i grundvandet foregår 81,9 % under redoxgrænsen, hvorfor det vurderes at reduktionspotentialet er særligt højt, hvilket medvirker en formindsket nitratsårbarhed for det grundvandsdannende opland.
Det vurderes at vandforsyningsboring 34.1664 er i mindre risiko for overskridelse af grænseværdien indenfor fremskrivningsperioden.

34.1662
Fremskrivning af nitratkoncentrationen for vandforsyningsboringen viser ingen overskridelse af grænseværdien. Den hhv. maksimale og minimale nitratkoncentration simuleres til 19,8 og 3,3 $mg \cdot L^{-1}$, hvorfor der simuleres maksimalt 30,2 $mg \cdot L^{-1}$ under grænseværdien. Det gennemsnitlige toppunkt for simuleringerne passeres i år 2017 allerede 1 år efter fremskrivningsstart. Til trods for at toppunktet forekommer i den nærmeste fremtid, vurderes det ikke at påvirke risikoen, da den maksimale simulerede nitratkoncentration er markant under grænseværdien.
Af den totale transporttid i grundvandet foregår 88,8 % under redoxgrænsen, hvorfor det vurderes at reduktionspotentialet er højt, hvilket medvirker en minimal nitratsårbarhed for det grundvandsdannende opland grundet de reducerede forhold.
Det vurderes at vandforsyningsboring 34.1662 ikke er i risiko for overskridelse af grænseværdien indenfor fremskrivningsperioden.

34.1661
Vandforsyningsboringen, der er vist på figur 9.10, har en relativt minimal stigning mellem år 2016 og omkring 2030, hvorefter tendensen aftager til tilnærmelsesvis horisontal. Tabel 9.4 viser den maksimale og minimale nitratkoncentration på hhv. 17,4 og 2,0 $mg \cdot L^{-1}$, hvilket gør at denne vandforsynignsboring er, hvor der er simuleret den laveste nitratkoncentration af samtlige vandforsyningsboringer tilknyttet AKV-Drastrup 2 Kildeplads. Eftersom at den maksimale koncentration er 17,4 $mg \cdot L^{-1}$ vil ingen simulering overskride grænseværdien for hele fremskrivningsperioden. Toppunktet forekommer i år 2021, svarende til 5 år efter fremskrivningsstarten.
Det kan vurderes, at der ikke forekommer risiko i forhold til nitratkoncentrationen for hele fremskrivningsperioden, da simuleringerne ligger markant under grænseværdien. Med en gennemsnitlig transporttid for partiklerne i grundvandet på 45 år, hvoraf 92,3 % af tiden tilbringes under redoxgrænsen, vurderes de relativt lave nitratkoncentrationer realistiske for netop denne vandforsyningsboring.

Fremskrivning af nitratkoncentrationen for vandforsyningsboringen viser ingen overskridelse af grænseværdien. Den hhv. maksimale og minimale nitratkoncentration simuleres til 17,4 og 2,0 $mg \cdot L^{-1}$, hvorfor der simuleres maksimalt 32,6 $mg \cdot L^{-1}$ under grænseværdien. Dette medvirker at denne vandforsyningsboring er, hvor der er simuleret den laveste nitratkoncentration af samtlige vandforsyningsboringer tilknyttet AKV-Drastrup 2. Det gennemsnitlige toppunkt for simuleringerne passeres i år 2021 svarende til 5 år efter

fremskrivningsstart.
Af den totale transporttid i grundvandet foregår 92,3 % under redoxgrænsen, hvorfor det vurderes at reduktionspotentialet er højt, hvilket medvirker en lav nitratsårbarhed for det grundvandsdannende opland. Det vurderes at vandforsyningsboring 34.1661 ikke er i risiko for overskridelse af grænseværdien indenfor fremskrivningsperioden.

33.1159 og 33.1040
For begge vandforsyningsboringer er der ingen stigende tendens i nitratudviklingen, hvorfor grænseværdien ikke overskrides. Den maksimale koncentration for begge vandforsyningsboringer er mindre end $5{,}0\,\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}$. Toppunktet er beregnet til år 2083, hvilket er 67 år efter fremskrivningsstart. Da der hverken forekommer en tendens til tilnærmelses af grænseværdien eller stigende nitratkoncentrationer, er toppunktets betydning ikke interessant for vandforsyningsboringerne.
Yderligere viser tabel 9.1, at mindst 97 % af transporttiden foregår under redoxgrænsen gældende for begge grundvandsdannende oplande.
Det vurderes at vandforsyningsboringerne 33.1159 og 33.1040 ikke er i risiko for overskridelse af grænseværdien indenfor fremskrivningsperioden.

På baggrund af risikovurderingen for Scenarie 1 vurderes vandforsyningsboring 34.908, 34.2407 og 34.1670 i risiko for tilnærmelse og overskridelse af grænseværdien for nitrat i fremskrivningsperioden. For vandforsyningsboring 34.1664 og 34.1712 simuleres et forholdsvis højt nitratindhold, dog under grænseværdien. Det vurderes derfor er der her forekommer mindre risiko for nitratforurening i fremtiden. For de resterende vandforsyningsboringer vurderes det at der ikke er risiko for nitratforurening. I det følgende afsnit sammenholdes Scenarie 1 med de resterende scenarier således formålet om vurdering af effekten af de nævnte grundvandsrelaterede initiativer kan udfærdiges.

9.4 Effekt af grundvandsrelaterede initiativer

Som et led i risikovurderingen vil effekten af grundvandsrelaterede initiativer, herunder effekten af helhedsplan, effekten af Fødevare- og landbrugspakke samt effekten ved etableret totalomlægning til naturarealer, undersøges.

Scenarie 1 anvendes som referencescenarie, hvor de resterende tre anvendes separat til hver undersøgelse, således effekten af initiativerne belyses ved sammenligning. Scenarierne er beskrevet i afsnit 9.2 på side 114. Til undersøgelserne udvælges der for hver undersøgelse et sæt vandforsyningsboringer til at klarlægge effekten. Tabel 9.2 viser hvilke vandforsyningsboringer, der anvendes til undersøgelserne.

Tabel 9.2. Oversigt over hvilke vandforsyningsboringer der anvendes for hver undersøgelse. Det er angivet, hvilke scenarier der anvendes til evaluering af hver effekt for de grundvandsrelaterede initiativer.

DGU nr.	**Scenarie 1 & 2** Helhedsplan	**Scenarie 1 & 3** Fødevare- og landbrugspakke	**Scenarie 1 & 4** Totalomlægning
34.908	-	✓	✓
34.2407	✓	✓	✓
34.1712	-	-	✓
34.1670	✓	✓	✓
34.1664	✓	✓	✓
34.1662	✓	-	-
34.1661	✓	-	-
33.1159	-	✓	-
33.1040	-	-	-

Som vist i tabel 9.2 fravælges et antal vandforsyningsboringer for hver undersøgelse. Der fravælges vandforsyningsboringer, i undersøgelse af effekten af helhedsplanen, da der udelukkende kan simuleres effekter i vandforsyningsboringerne, der har beliggenhed i helhedsplanområdet. For de resterende undersøgelser fravælges vandforsyningsboringer grundet ensartet geografisk beliggenhed. Tabel 9.3 angiver for alle ni vandforsyningsboringer den gennemsnitslige dybde for hhv. umættet sand, ler og kalk i de grundvandsdannende oplande.

Tabel 9.3. Gennemsnitlig tykkelse, $d_{x,gns}$, af hhv. umættet sand, ler og kalk for de grundvandsdannende oplande til udvalgte vandforsyningsboringer til fremskrivning. Tilhørende median for transporttid af partikler, $t_{p,median}$, samt 90%-konfidensinterval for transport tid for partikler, $t_{p,90\%}$. Andelen af den samlede transporttid der forekommer under redoxgrænsen $a_{tp,redox}$.

DGU nr.	$d_{sand,gns}$ [m]	$d_{ler,gns}$ [m]	$d_{kalk,gns}$ [m]	$t_{p,median}$ [år]	$t_{p,90\%}$ [år – år]	$a_{tp,redox}$ [%]
34.908	23,81	13,38	1,00	6,83	[1,88 - 162,65]	53,7
34.2407	19,02	13,11	4,90	7,31	[2,73 - 74,88]	0,0
34.1712	13,88	6,43	1,78	18,39	[4,24 - 89,62]	58,5
34.1670	18,07	12,14	4,36	11,44	[0,44 - 66,85]	5,4
34.1664	20,34	11,94	4,20	6,32	[1,58 - 153,08]	81,9
34.1662	17,48	9,61	4,10	7,30	[0,96 - 159,32]	88,0
34.1661	18,29	8,01	2,57	45,31	[1,91 - 188,71]	92,3
33.1159	27,63	9,10	3,90	6,86	[4,98 - 53.73]	97,8
33.1040	35,54	11,52	1,94	7,23	[6,32 - 66,09]	97,0

Af tabel 9.3 bemærkes at medianen og et 90 %-konfidensinterval for transporttiden af partiklerne i

den mættede zone for hvert grundvandsdannende opland samt andelen af den samlede transporttid der forekommer under redoxgrænsen ligeledes er angivet. Tabel 9.4 viser resultaterne for Scenarie 1-4.

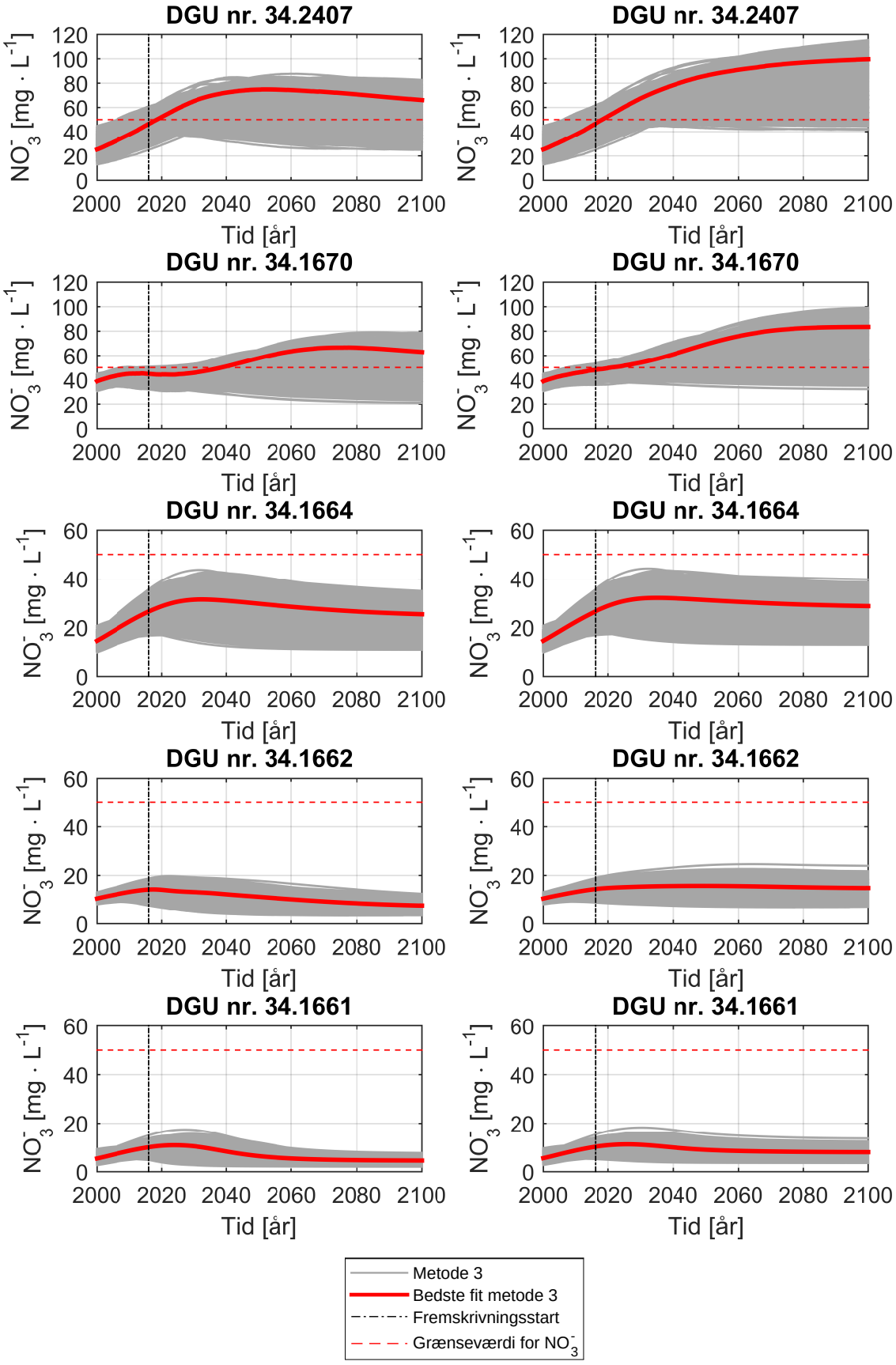
Tabel 9.4. Resultater for de ni vandforsyningsboringer. Tabellen indeholder andelen af simuleringer over grænseværdien (SOG), 90 %-konfidensinterval samt den maksimale og minimale forekommende nitratkoncentration. Derudover er det gennemsnitslige toppunkt i nitratkoncentrationen, for alle simuleringer, angivet.

DGU nr.	**Scenarie 1**		**Scenarie 2**		**Scenarie 3**		**Scenarie 4**	
	SOG [%]	$t_{90\%}$ [år]	SOG [%]	$t_{90\%}$ [år]	SOG [%]	$t_{90\%}$ [år]	SOG [%]	$t_{90\%}$ [år]
34.908	15,7	20 - 78	15,7	20 - 78	25,2	23 - 78	1,6	8 - 21
34.2407	60,0	3 - 67	71,2	3 - 37	60,0	3 - 64	58,4	3 - 50
34.1712	-	-	-	-	-	-	-	-
34.1670	60,8	16 - 44	74,0	6 - 33	62,0	16 - 43	54,5	16 - 46
34.1664	-	-	-	-	-	-	-	-
34.1662	-	-	-	-	-	-	-	-
34.1661	-	-	-	-	-	-	-	-
33.1159	-	-	-	-	-	-	-	-
33.1040	-	-	-	-	-	-	-	-
	Maks. NO_3^-	Min. NO_3^-	Maks. NO_3^-	Min. NO_3^-	Maks. NO_3^-	Min. NO_3^-	Maks. NO_3^-	Min. NO_3^-
	$[mg \cdot L^{-1}]$		$[mg \cdot L^{-1}]$		$[mg \cdot L^{-1}]$		$[mg \cdot L^{-1}]$	
34.908	61,2	18,7	61,2	18,7	65,0	20,3	54,6	5,6
34.2407	87,8	24,9	115,7	25,0	88,1	25,0	86,3	14,3
34.1712	26,4	7,9	26,4	7,9	27,7	8,6	25,0	2,9
34.1670	79,1	21,0	99,2	32,2	80,1	22,2	74,1	12,0
34.1664	43,7	10,9	44,2	12,9	43,7	11,9	43,7	3,5
34.1662	19,8	3,3	24,6	6,9	19,8	3,4	19,8	2,8
34.1661	17,4	2,0	18,3	3,6	17,4	2,2	17,4	1,0
33.1159	4,4	1,1	4,4	1,1	4,4	1,1	4,4	1,1
33.1040	4,7	1,0	4,7	1,0	4,7	1,0	4,7	1,0
	Toppunkt [år]		Toppunkt [år]		Toppunkt [år]		Toppunkt [år]	
34.908	2068		2068		2083		2034	
34.2407	2042		2093		2044		2038	
34.1712	2048		2055		2057		2037	
34.1670	2059		2080		2061		2052	
34.1664	2030		2035		2032		2028	
34.1662	2017		2034		2017		2017	
34.1661	2021		2023		2021		2021	
33.1159	2083		2083		2083		2082	
33.1040	2083		2083		2083		2082	

9.4.1 Effekt af indsatsplaner i helhedsplanområdet

For at vurdere effekten af de implementeret indsatsplaner i helhedsplanområdet sammenholdes Scenarie 1 og 2, da fremskrivningen af nitratkoncentrationen er foretaget med det samme udgangspunkt, dog uden omlægning i det beskrevne indsatsområde i år 2000. Dette udgør et sammenligningsgrundlag til evaluering af effekten af indsatsplanerne. Der tages udgangspunkt i fem vandforsyningsboringer, alle beliggende i helhedsplanområdet, da effekten vurderes at kunne belyses ud fra disse vandforsyningsboringer. Figur

9.12 illustrerer nitratfremskrivningen for Scenarie 1 og 2 for de udvalgte vandforsyningsboringer.



Figur 9.12. Fremskrivning af nitratkoncentrationen i vandforsyningsboring **34.2407**, **34.1670**, **34.1664**, **34.1662** og **34.1661**. Kolonnen til **venstre** er nitratfremskrivningen for Scenarie 1, hvor kolonnen til **højre** er for Scenarie 2. Bemærk at den vertikale akse er skaleret og tilpasset til hver vandforsyningsboring.

34.2407

For vandforsyningsboringen er det tydeligt, at der er en klar forskel i fremskrivningen for Scenarie 1 og 2. For Scenarie 2 på figur 9.12 er den fremskrevne nitratkoncentration stigende for hele perioden, hvor tilnærmelsesvis alle simuleringer ligger over grænseværdien. Det er til diskussion om et plateau evt. er opnået i år 2100 for Scenarie 2. Sammenholdes Scenarie 1 og 2 i tabel 9.4 bemærkes det at tiden før koncentrationen bliver overskredet, for Scenarie 1 spænder i et interval fra 3 til 67 år, hvor intervallet for Scenarie 2 spænder fra 3 til 37 år. Etableringen af naturarealer har derfor potentielt udskudt, tiden før grænseværdien bliver overskredet, med 30 år. Desuden overskrider 60,0 % af de accepterede simuleringer grænseværdien i løbet af hele fremskrivningsperioden for Scenarie 1, hvorimod 71,2 % overskrider grænseværdien i Scenarie 2. Til trods for at grænseværdien overskrides har indsatsplanen i helhedsområdet reduceret den maksimalt forekommende koncentration fra 115,7 $mg \cdot L^{-1}$ til 87,8 $mg \cdot L^{-1}$. Toppunktet i koncentrationen forekommer 51 år senere for Scenarie 2.

Det kan for vandforsyningsboringen konkluderes at indsatsplanerne har en gunstig effekt, men at grænseværdien, til trods indsatsplanen, stadig forventes overskredet. Med indsatsplanen reduceres den stigende tendens til forskel fra uden indsatsplan. Jf. figur 8.25 på side 98 er 25,0 % af det grundvandsdannende opland til trods for indsatsplanen stadig bestående af landbrugsarealer, der potentielt kan omlægges til naturarealer i fremtiden.

34.1670

Betragtes vandforsyningsboringen på figur 9.12 er effekten af indsatsplanen ligeledes tydelig i dette tilfælde som ved vandforsyningsboring 34.2407. For Scenarie 2 stiger nitratkoncentrationen for hele fremskrivningsperioden, og er tilnærmelsesvis lineært stigende fra år 2000 til omkring 2070 og viser umiddelbart ikke visuelle tegn på at falde inden år 2100.

Sammenlignet med Scenarie 1 forekommer en reducering i perioden hvor et eventuelt løsningstiltag skal udfærdiges og implementeres. For Scenarie 2 overskrider 74,0 % af simuleringerne grænseværdien for nitrat i vandforsyningsboringen. Til trods for at grænseværdien bliver overskrides har indsatsplanen reduceret den maksimalte forekommende koncentration fra 99,2 $mg \cdot L^{-1}$ til 79,1 $mg \cdot L^{-1}$. Det gennemsnitslige toppunkt for alle simuleringer for nitratkoncentrationen forekommer i år 2080, 21 år senere end for Scenarie 1. Indsatsplanerne afhjælper den stigende tendens 21 år tidligere, hvorfor det kan konkluderes at etableringen af naturarealer har en positiv effekt. Etableringen af naturarealerne i helhedsområdet har således givet en relativ hurtig respons, eftersom at naturarealerne er etableret nær vandforsyningsboringen. Det vurderes at yderligere etablering af naturarealer, hvor de resterende 24 % landbrug omlægges til natur, vil være fordelagtigt til forsat reducering af den fremtidige nitratbelastning.

34.1664

Betragtes vandforsyningsboringen på figur 9.12 ligger alle simuleringer under grænseværdien. Tendens for Scenarie 2 er mindre aftagende end for Scenarie 1. Den maksimale nitratkoncentration er, jf. tabel 9.4, 0,5 $mg \cdot L^{-1}$ højere for Scenarie 2. Toppunkt forekommer i år 2036, 6 år senere end for Scenarie 1.

Samlet set har indsatsplanen en relativ begrænset effekt for vandforsyningsboringen tilknyttet AKV-Drastrup 2. På forhånd er nitratkoncentrationen i vandforsyningsboringen relativ lav, jf. tabel 8.1 på side 74, hvorfor indsatsplanen har en mindre virkning sammenlinget med vandforsyningsboring 34.2407 og 34.1670.

34.1662 og 34.1661

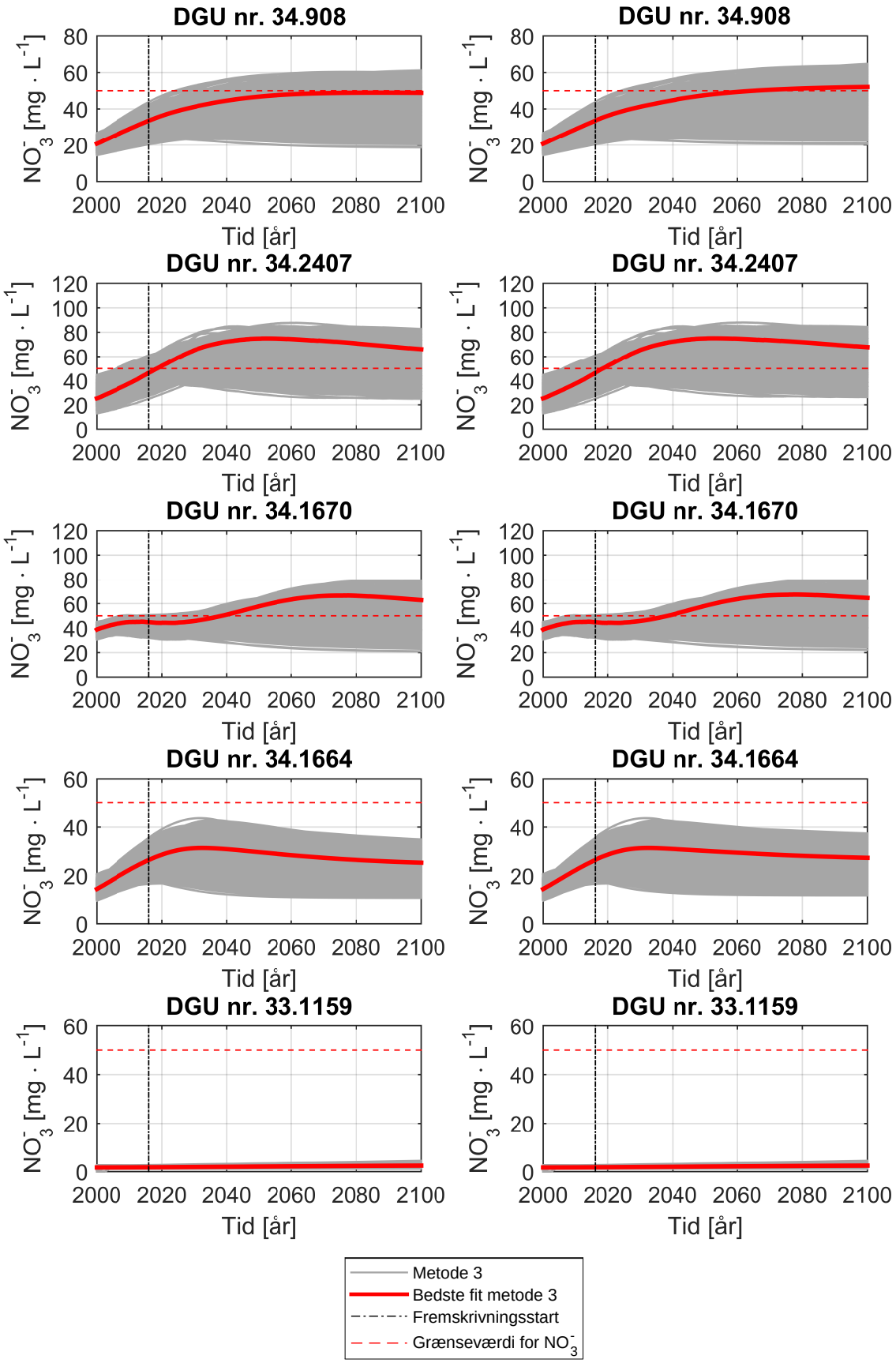
Effekten af indsatsplanen for vandforsynigsboringerne 34.1662 og 34.1661 evalueres i kombination da nitratfremskrivningen, jf. figur 9.12, er tilnærmelsesvis ens. For begge scenarier er alle simuleringer under grænseværdien, hvor den simulerede nitratkoncentration er marginalt højere for Scenarie 2. Forskellen i den maksimale og minimale koncentration er relativt begrænset. Toppunktet forekommer for 34.1662 og 34.1661 hhv. 17 og 2 år senere sammenlignet med Scenarie 1.

Samlet set er effekten af indsatsplanen relativt begrænset, men der er dog stadig en effekt, selvom nitratkoncentrationen for vandforsyningsboringerne, jf. tabel 8.1 på side 74 og 8.4 på side 98, på forhånd er relativ lav. Indsatsplanen i helhedsområdet sikrer en begrænset nitratudvaskning til grundvandet, og derfor også en fremtidig lav koncentration i vandforsyningsboringerne.

Ud fra en samlet vurdering af effekten af indsatsplanerne i helhedsområdet konkluderes det, at effekten er størst i vandforsyningsboringerne, hvor nitratkoncentrationen på forhånd er relativ høj. Dette skyldes den radikale ændring i udvaskningen, der bliver foretaget ved etableringen af naturarealerne i helhedsområdet. Etableringen af naturarealer har, for vandforsyningsboringerne 34.2407 og 34.1670, udsat tiden for, hvornår grænseværdien af nitrat bliver overskredet med op til hhv. 20 og 14 år. Denne udskydelse er en relativ kort periode, men det kan potentielt give en mulighed for at imødekomme problemet med den stigende nitratkoncentration. Dette forventes gjort ved etablering af nye vandforsyningsboringer. Den vurderede effekt af indsatserne ved AKV-Drastrup 2 er relativt minimal, da den primære beskyttende effekt her er reduktionspotentialet.
Effekten af indsatsplanen i helhedsområdet er således undersøgt. Den vedtagede Fødevare- og landbrugspakke giver en øget nitratudvaskning til grundvandet, hvilket potentielt kan være et problem for vandforsyningen. Derfor vil det følgende afsnit omhandle effekten af Fødevare- og landbrugspakken på baggrund af de udvalgte vandforsyningsboringer til netop denne undersøgelse.

9.4.2 Effekt af Fødevare- og landbrugspakken

Til vurdering af effekten af den implementerede Fødevare- og landbrugspakke er der ligeledes udvalgt et antal vandforsynigsboringer. Tabel 9.2 viser, hvilke vandforsynigsboringer der anvendes til undersøgelsen. Arealanvendelsen er ens for begge scenarier og adskilles udelukkende ved en 10 %-forøgelse af nitratudvaskningen fra landbrugsarealerne fra og med år 2016. Figur 9.13 illustrerer nitratfremskrivningen for Scenarie 1 og Scenarie 3.



Figur 9.13. Fremskrivning af nitratkoncentrationen i vandforsyningsboring **34.908**, **34.2407**, **34.1670**, **34.1664** og **33.1159**. Kolonnen til **venstre** er nitratfremskrivningen for Scenarie 1, hvor kolonnen til **højre** er for Scenarie 3. Bemærk at den vertikale akse er skaleret og tilpasset til hver vandforsyningsboring.

34.908

Effekten af Fødevare- og landbrugspakken er begrænset for vandforsyningsboring 34.908, hvilket illustreres på figur 9.13. Simuleringerne har sammenlignet med Scenarie 1, en vedvarende stigning for størstedelen af fremskrivningsperioden. Det bemærkes, hvorledes bedste fit bryder grænseværdien for Scenarie 2, hvilket ikke sker for Scenarie 1. Tabel 9.4 bekræfter således også at effekten af Fødevare- og landbrugspakken er begrænset. Antal simuleringer over grænseværdien stiger fra 15,7 % til 25,2 %. Den maksimale og minimale nitratkoncentration stiger med hhv. 3,8 og 1,6 $\mathrm{mg \cdot L^{-1}}$. Fødevare- og landbrugspakken forskyder tidspunktet for den gennemsnitlige maksimalkoncentration ved toppunktet med 15 år.

Der kan kompenseres for den stidende nitratkoncentration ved at etablere naturarealer i det grundvandsdannende opland, hvilket også arealmæssigt er muligt jf. figur 8.4, da 74,0 % af det grundvandsdannende opland er bestående af landbrug.

34.2407

Betragtes Scenarie 1 og 3 på figur 9.13 for vandforsyningsboringen, bemærkes det at graferne mellem scenarierne er tilnærmelsesvis ens, hvorfor det er vanskeligt at beskrive en konkret grafisk forskel for fremskrivningen scenarierne imellem. Den procentvise ændring for maksimum- og minimumskoncentrationen er mindre end 1,0 %.

Fødevare- og landbrugspakken har tilnærmelsesvis ingen negativ effekt på nitratkoncentrationen for denne vandforsyningsboring. Årsagen til at den manglende effekt tilskrives at arealanvendelsen i det grundvandsdannende opland, hvilken jf. 8.25 på side 98, består af 25,0 % landbrugsarealer.

34.1670

Betragtes vandforsyningsboringen på figur 9.13 er der, som for de to forgående vandforsyningsboringer, tilnærmelsesvis ingen visuel forskel mellem Scenarie 1 og 3. Tabel 9.4 viser at andelen af simuleringer over grænseværdien, mellem Scenarie 1 og 3, stiger fra 60,8 % til 62,0 %. Ændringen i den maksimale og minimale simulerede nitratkoncentration er mindre end 5,5 %, og toppunktet er forskudt med 2 år.

Fødevare- og landbrugspakken har ikke en tydelig effekt på nitratkoncentrationen i vandforsyningsboringen. Årsag til at der ingen effekt kan spores af Fødevare- og landbrugspakken kan bl.a. skyldes at landbrugsarealerne udgør et begrænset areal på 24,0 % af det grundvandsdannende opland, hvilket er tilsvarende vandforsyningsboring 34.2407.

34.1664

Figur 9.13 viser den samme tendens for Fødevare- og landbrugspakken som de foregående tre vandforsyningsboringer. Samtlige simuleringer ligger under grænseværdien for begge scenarier. Toppunktet er forskudt med 2 år.

Samme vurdering foretages for denne vandforsyningsboring som for de forgående, at Fødevare- og landbrugspakken ikke har en påvirkning på nitratkoncentration.

33.1159

Figuren 9.13 viser ingen effekt for hele fremskrivningsperioden for vandforsyningsboring 33.1159. Alle simuleringer er under 5,0 $\mathrm{mg \cdot L^{-1}}$. Både den maksimale og minimale koncentration er tilsvarende Scenarie 1. Der er derfor ikke registreret en effekt ved indførslen af Fødevare- og landbrugspakken for denne vandforsyningsboring.

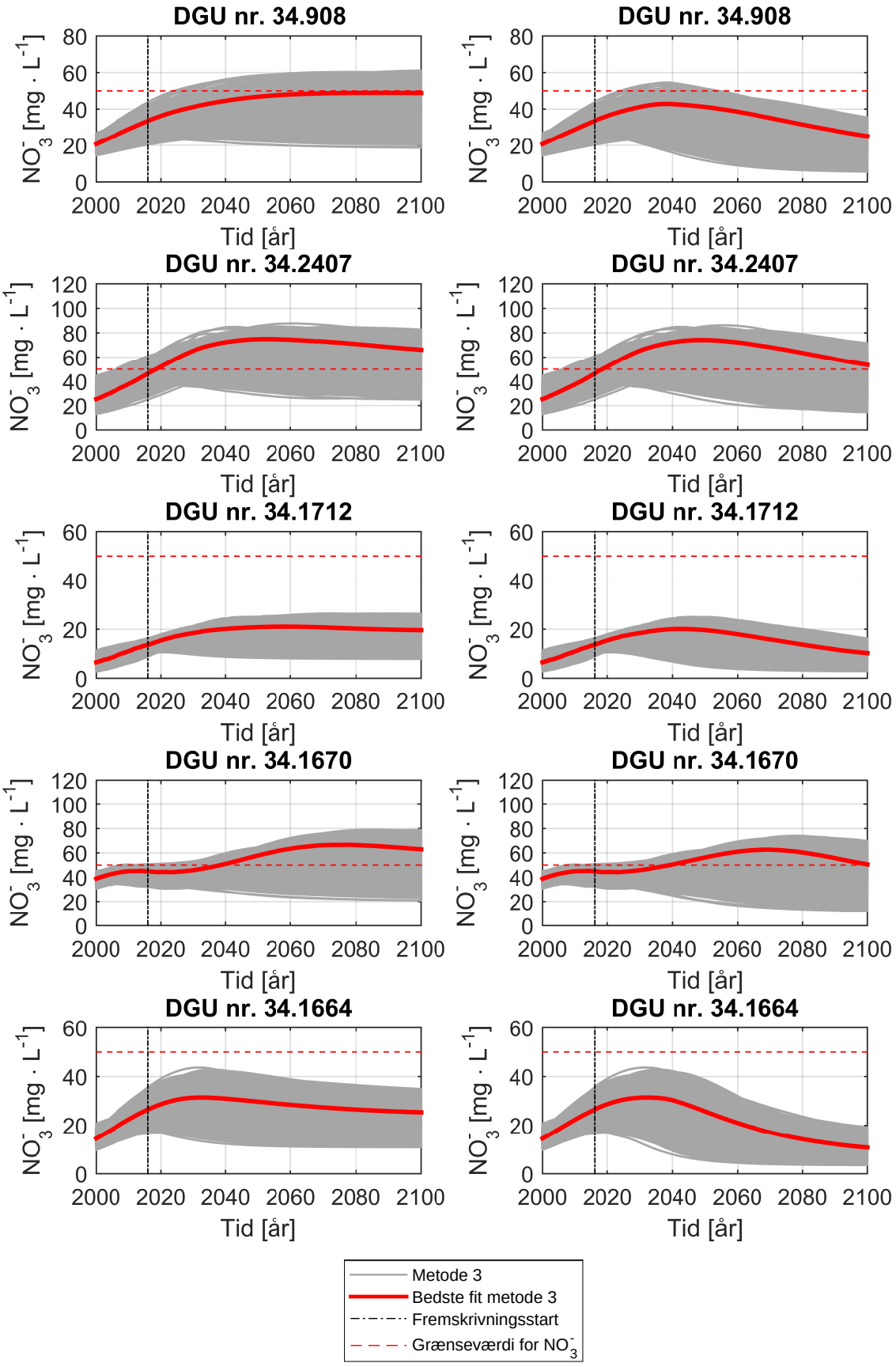
Til trods for at det grundvandsdannende opland er bestående af 33,0 % landbrugsareal er nitratfremskrivningen uændret. Dette kan skyldes at opholdsandelen under redoxgrænsen er 97,8 %, hvilket indikerer et højt reduktionspotentiale.

Det konkluderes at de grundvandsdannende oplande, til de udvalgte vandforsyningsboringer, er tilnærmelsesvis upåvirkelige overfor Fødevare- og landbrugspakken og dermed forøgelsen i nitratudvaskningen

med 10 %. Fødevare- og landbrugspakken har den største effekt på nitratkoncentrationen i vandforsyningsboring 34.908. Det grundvandsdannende opland for denne vandforsyningsboring, er bestående af 74,0 % landbrugsarelaer, hvilket er betragteligt mere end de resterende grundvandsdannende oplande. Nitratkoncentrationen i de øvrige vandforsyningsboringer er tilnærmelsesvis uændret. En forøgelse i nitratudvaskningen har ikke kun en konsekvens for grundvandet, men også for det omkringliggende miljø. Vandløb, søer og vådområdet påvirkes ligeledes af disse statslige tiltag, men konsekvensen for disse risikoområder undersøges ikke nærmere i nærværende rapport.
Det undersøges i det følgende afsnit om etableringen af naturarealer i samtlige grundvandsdannende oplande kan reducere risikoen for overskridelse af grænseværdier i fremskrivningsperioden.

9.4.3 Effekt ved totalomlægning til naturarealer

For at kunne vurdere effekten ved etablering af naturarealer er der udvalgt en række vandforsyningsboringer præsenteret i tabel 9.2 på side 123. Vandforsyningsboringerne er valgt, da nitratfremskrivningen her viser nogen til høj risiko for overskridelse af grænseværdien.
Til denne vurdering sammenlignes Scenarie 1 og 4, hvor der i hele de grundvandsdannende oplande, for de fem udvalgte vandforsyningsboringer, etableres arealer svarende til natur fra og med år 2016. Effekten ved indførelse af naturarealer i hele det grundvandsdannende oplande kan potentielt klarlægge, hvilke oplande der er påvirkelige overfor grundvandsbeskyttende tiltag. Ved klarlæggelsen af dette kan der sikres en målrettet beskyttelse af grundvandsressourcen i områder, der er særlig nitratsårbare og påvirkelige for ændringer i arealanvendelsen.
Figur 9.14 illustrerer Scenarie 1 og Scenarie 4 for de fem udvalgte vandforsyningsboringer. Effekten vurderes enkeltvis, for hver vandforsyningsboring efter samme princip som foregående undersøgelser.



Figur 9.14. Fremskrivning af nitratkoncentrationen i vandforsyningsboring **34.908**, **34.2407**, **34.1712**, **34.1670** og **34.1664**. Kolonnen til **venstre** er nitratfremskrivningen for Scenarie 1, hvor kolonnen til **højre** er for Scenarie 4. Bemærk at den vertikale akse er skaleret og tilpasset hver graf.

34.908

Ved en visuel betragtning, på figur 9.14, kan det bekræftes at etableringen af naturarealer har en tydelig effekt på nitratfremskrivningen. Omkring år 2040 vender den stigende tendens, hvorefter nitratkoncentrationen er generelt er aftagende i den resterende periode. Få simuleringer er i fremskrivningsperioden over grænseværdien, hvorefter der sker et fald i nitratkoncentrationen. For vandforsyningsboringen reduceres antallet af simuleringer over grænseværdien fra 15,7 % til 1,6 %, hvilket bekræfter at det er ganske få simuleringer, der overskrider grænseværdien.

Tabel 9.4 viser at den maksimale koncentration falder fra 61,2 til 54,6 $mg \cdot L^{-1}$. Den minimale koncentration aftager fra 18,7 til 5,6 $mg \cdot L^{-1}$. For toppunktet er der ligeledes sket en radikal ændring. Toppunktet for hvornår nitratkoncentrationen begynder at falde kommer 34 år tidligere end for Scenarie 1. Etableringen reduceres derfor ikke kun koncentrationen, men får den stigedes tendens til at vende allerede i år 2034, jf. tabel 9.4. Denne relative korte responstid kan bl.a. skyldes, jf. tabel 9.3 at der forekommer en minimal mængde umættet kalk i oplandet. Desuden er medianværdien for transporttiden i grundvandet på omkring 6 år, der i kombination med geologien i det grundvandsdannende opland kan give en hurtig respons for ændringer i arealanvendelsen.

Det vurderes at etableringen af naturarealer i det grundvandsdannende opland har en gunstig effekt for denne vandforsyningsboring og at risikoen for overskridelse af grænseværdien i fremskrivningsperioden kan reduceres markant. Det vurderes derfor særdeles fordelagtigt at omlægge oplandet til natur.

34.2407

Betragtes vandforsyningsboringen, på figur 9.14, er effekten ved komplet omlægning til natur i det grundvandsdannende opland ikke af samme grad som ved 34.908. Simuleringerne for Scenarie 4 aftager relativt mere end Scenarie 1 fra år 2050. Tabel 9.4 bekræfter denne visuelle betragtning. Den maksimale koncentration er ændret med 1,5 $mg \cdot L^{-1}$, mens den minimale koncentration er faldet med 13,1 $mg \cdot L^{-1}$. Den minimale koncentration bekræfter at flere simuleringer generelt ligger lavere for Scenarie 4. Andelen af simuleringer over grænseværdien er reduceret fra 60,0 % til 58,4 %. Det gennemsnitslige toppunkt for alle simuleringer forekommer 4 år tidligere i år 2034.

Det vurderes for nærværende vandforsyningsboring at etableringen af naturarealer i det grundvandsdannende opland ikke har en tilsvarende effekt på reduceringen af nitratkoncentrationen sammenlignet med 34.908, hvorfor oplandet vurderes at være mindre påvirkelig overfor en arealændring. Dette skyldes en kombination af at det grundvandsdannende opland består af 25 % landbrug, hvorfor kun en fjerdedel af oplandet omlægges til naturarealer. Desuden forefindes der i den umættede zone for netop dette opland umættet kalk med en gennemsnitlig tykkelse på 4,90 m. I kombination med manglende reduktionpotentiale kan der derfor i dette grundvandsdannende opland forventes at ændringer sker over en relativ lang periode, hvor der forventes at gå mere end 100 år før grænseværdien er overholdt.

34.1712

Figur 9.14 illustrerer ved sammenligning af Scenarie 1 og 4 ligeledes effekten af totalomlægning til naturarealer for vandforsyningsboring 34.1712. På baggrund af simuleringerne for Scenarie 4 forefindes et toppunkt i nitratkoncentrationen omkring år 2040, hvorefter nitratkoncentrationen er aftagende i den resterende del af fremskrivningsperioden. Den maksimale og minimale nitratkoncentration er aftaget og er derfor forsat under grænseværdien. Generelt simuleres en lavere nitratkoncentration i Scenarie 4, hvilket også bekræftes da minimums nitratkoncentration er aftaget fra 7,9 $mg \cdot L^{-1}$ til 2,9 $mg \cdot L^{-1}$. Det gennemsnitlige år for toppunktet forekommer 11 år tidligere ved Scenarie 4 sammenlignet med Scenarie 1.

Det vurderes at etableringen af naturarealerne har en effekt i dette opland og at en respons fra ændring forekommer indenfor en 30-40 års periode.

34.1670
Betragtes figur 9.14 er der tilnærmelsesvis den samme effekt som for vandforsyningsbornig 34.2407. Etableringen af naturarealerne har ikke en tydelige effekt før år 2070, hvor der simuleres relativt lavere nitratkoncentrationer i Scenarie 4 sammenlignet med Scenarie 1. Minimum nitratkoncentrationen er ligeledes 9,0 $\mathrm{mg} \cdot \mathrm{L}^{-1}$ lavere, hvor desuden den maksimale koncentration er aftaget med 5,0 $\mathrm{mg} \cdot \mathrm{L}^{-1}$. Andelen af simuleringer over grænseværdien er aftaget fra 60,8 % til 54,5 %, hvor det gennemsnitlige toppunkt forekommer i år 2052, hvilket er 7 år tidligere sammenlignet med Scenarie 1. Det vurderes derfor at etableringen af naturarealer er medvirkende til at vende den stigende tendens i nitratkoncentrationen tidligere.
Det vurderes at etableringen af naturarealer har en positiv effekt for denne vandforsyningsboring, men at responstiden fra omlægning er relativ lang. Ved en betragtning af den gennemsnitlige transporttid i grundvandet vil der med 90 % sandsynlighed gå mindre en 66 år før partiklen indfanges i vandforsyningsboringen. Dette i kombination med geologien i den umættede zone, der tilnærmelsesvis har en tilsvarende sammensætning som for 34.2407, giver det en relativ langsom transport af nitrat. Derfor også en relativ lang responstid på ændringer, hvor det vurderes at tiltagende ikke har den ønskede effekt indenfor fremskrivningsperioden.

34.1664
Betragtes figur 9.14 bemærkes forholdsvis tydeligt effekten af totalomlægning til naturarealer. Simuleringerne har tilnærmelsesvis samme stigende tendens indtil omkring år 2030. Fra år 2030 for Scenarie 4 bemærkes en aftagende nitratkoncentration til under 20 $\mathrm{mg} \cdot \mathrm{L}^{-1}$. Som illustreret i tabel 9.4 på side 124 bemærkes at den minimale simulerede nitratkoncentration er 7,4 $\mathrm{mg} \cdot \mathrm{L}^{-1}$ lavere sammenlignet med Scenarie 1. Ingen simuleringer overskrider grænseværdien. Toppunktet forekommer 2 år tidligere for Scenarie 4 sammenlignet med Scenarie 1.
For denne vandforsyningsboring vurderes tilnærmelsesvis samme effekt som for 34.1712 og 34.908. Etableringen af naturarealerne har en effekt og responsen fra ændringerne forekommer relativt hurtig indenfor 15 år. Det kan diskuteres om det er nødvendigt at foretage ændringer i dette opland, da den allerede iværksatte indsatsplan sikrer en lav nitratkoncentration for vandforsyningsboringen.

Det kan konkluderes, at der foreligger en effekt ved en total arealomlægning for alle grundvandsdannende oplande. Dette er også forventelig eftersom at nitratkoncentrationen i vandforsyningsboringerne over tid vil indstilles afhængig af udvaskningskoncentration. Effekten vil således være størst, hvor forskellen i nitratudvaskningen bliver størst efter en total arealomlægning. De grundvandsdannende oplande uden reduktion er følsomme for ændringer i udvaskning, hvor relativt større dele af oplandet kan omlægges i kombination med en sandet geologi. Effekten af omlægningen til naturarealer er opstillet som et ekstremscenarie, der bekræfter potentialet ved Modelkomplekset.

9.5 Sammenfatning

Det vurderes at Modelkomplekset er i stand til at fremskrive nitratkoncentrationer, hvor det ligeledes er muligt at undersøge effekten af grundvandsrelaterede initiativer. Ved at Modelkomplekset evner disse egenskaber er der mulighed for at undersøge scenarier på både regional og lokal skala. Modelkompleksets potentiale opfyldes ved at der på relativ kort tid kan simuleres nye resultater for andre eller flere vandforsyningsboringer, hvorefter en ny risikovurdering kan foretages, der kan belyse risikoen for hvor og hvornår koncentrationen af nitrat i grundvandet bliver problematisk i forhold til grænseværdien. Tabel 9.5 viser en sammenfattende risikovurdering for vandforsyningsboringerne.

Tabel 9.5. Årlig indvindingsmængde indikerer senest registrerede oppumpede årlige mængde vand. Risiko baseres på den udførte risikovurdering. Omfanget vurderes ved sammenfatning af risiko og indvindingsmængde. Risiko inddeles efter maks. koncentration som i tabel 9.1 på side 119. Hvis Indvindingsmængde større mindre end 25 000 $m^3 \cdot år^{-1}$ tildeles "+", hvis større end 100 000 $m^3 \cdot år^{-1}$ tildeles "+++"i omfang.

DGU Nr.	**Årlig indvindingsmængde** [NIRAS, 2015] $[m^3 \cdot år^{-1}]$	**Risiko** [−]	**Omfang** [−]
34.908	22330	+++	+
34.2407	43709	+++	++
34.1712	28371	+	++
34.1670	25038	+++	++
34.1664	236238	+	+++
34.1662	236238		
34.1661	236238		
33.1159	58100		
33.1040	58100		

Som vist i tabel 9.5 varierer risikoen for overskridelse af grænseværdien for de ni udvalgte vandforsyningsboringer fra ingen risiko til en risiko for at vandforsyningsboringen skal sløjfes. Vandforsyningsboring 34.908 viser en risiko for overskridelse af grænseværdien med nogen usikkerhed. Omfanget af en eventuelt sløjfning af denne boring udgør ikke en markant trussel for den samlede vandforsyning. For vandforsyningsboring 34.2407 og 34.1670 er det med relativt stor sandsynlighed nødvendigt at foretage en sløjfning inden for 13 år. Det vurderes at der forekommer en trussel for forsyningssikkerheden ved Frejlev Vandværk, da vandforsyningsboring 34.2407 udgør den totale indvindingsmængde for vandværkets Kildeplads Syd jf. [GEUS, 2015]. Til trods for relativt stor risiko for overskridelse af grænseværdien i vandforsyningsboring 34.1670 udgør indvindingsmængden ca. én procentdel af den samlede indvindingsmængde for AKV-Drastrup. Det skal tilknyttes at øget monitorering i vandforsyningsboringerne 34.1664 vurderes nødvendigt, da nitratkoncentrationen potentielt tilnærmes grænseværdien i fremtiden. Sammenholdes dette med den relativt betragtelige indvindingsmængde, vurderes det at løbende opfølgning og eventuelle yderligere arealomlægning vil være fordelagtigt for forsyningssikkerheden. De resterende vandforsyningsboringer vurderes ikke i risiko for overskridelse af grænseværdien af nitrat indenfor fremskrivningsperioden til år 2100.

Overordnet har den implementerede indsatsplan en effekt for de fem vandforsyningsboringer i helhedsplanområdet. Effekten er varierende, og vurderes mest effektiv ved 34.2407 og 34.1670, hvor koncentrationen på forhånd måles relativ høj og nær grænseværdien. Indsatsplanen forhindrer ikke 34.2407 og 34.1670, der har en stigende tendens i nitratkoncentrationen, i at overskride grænseværdien. Indsatsplanerne i helhedsområdet sikrer en beskyttelse af grundvandsressourcen samt en lav nitratkoncentration for de resterende vandforsyningsboringer i undersøgelsen.

Der er ved Fødevare- og landbrugspakken tilnærmelsesvis ingen påvirkning på nitratkoncentration for samtlige vandforsyningsboringer, hvor effekten blev undersøgt. For samtlige tilfælde forringes koncentrationerne marginalt. Dette statslige tiltag forventes at have større effekt på miljø i form af overfladerecipienter omkring landbrugsarealerne frem for grundvandskvaliteten.

Ved en etablering af naturarealer registreres effekten først ved vandforsyningsboringer, hvor den umættede geologi i oplandet har en sandholdig sammensætning i kombination med en relativt kort transporttid i den mættede zone uden reducerede forhold.

Kapitel 10

Konklusion

Hovedformålet med rapporten har været undersøgelse af hvorvidt der ved en simpel metode kan opsættes og verificeres en beregningsmodel til beskrivelse af nitrattransport fra udvaskning til vandforsyningsboring på regional skala. Motivationen baseres på at vandforsyningssikkerheden i Sydvest-området, herunder OSD 1432, er truet af stigende nitratkoncentrationer til trods for grundvandsbeskyttende indsatser siden midten af 1980'erne. Særligt nitratkoncentrationer i kalkdomineret geologi ved Drastrup er stigende til trods for omfattende grundvandsbeskyttelse siden år 1997.

Til undersøgelse af denne problemstilling er der opsat et Modelkompleks anvendeligt til stokastisk modellering af nitrat fra udvaskning til vandforsyningsboring. Dette er gjort muligt ved en uprøvet grey box metode, hvor der opsættes en simpel 1-dimensional vand- og stoftransportmodel for den umættede zone og sammenkoble med allerede eksisterende data fra en grundvandsmodel, hvortil transporten i den mættede zone styres af en fremadrettet partikeltracking. Metoden for opsætningen er særligt anvendelig til stokastisk modellering, eftersom vandforsyningsboringer og dertilhørende grundvandsdannede oplande efter interesse kan selekteres, hvilket minimere beregningstiden for både den umættede og mættede zone.

På baggrund af den stokastiske anvendelse af Modelkomplekset ved GLUE-metodologien kan parameter- og prædiktionsusikkerheden belyses. Med udgangspunkt i den udførte analyse af parameterusikkerhed forefindes det, at der påvises særlig insensitivitet for stejlhedsparameteren i ler og kalk, samt den effektive porøsitet i alle medier. Herudover er fyldningsgraden, hvilken kontrollerer aktivering af sprækkesystemet i kalken påvist insensitiv. Ved en korrelationsundersøgelse bekræftes det at der ikke forekommer korrelation mellem insensitive parametre. Det konkluderes ligeledes, at der forekommer korrelation mellem de samplede parametre, som ikke kan forefindes ved direkte korrelationsundersøgelse. Det er påvist at transportstyrende parametre potentielt kan skalere koncentrationsforløbet horisontalt i tid og derved styre, hvornår der skal forekomme gennembrud til en vandforsyningsboring. På samme vis er det muligt at skalere gennembrudskurven vertikalt i koncentration ved korrigering af nitratudvaskningen, hvorfor det vurderes at raffineret beskrivelse af nitratudvaskningen er ønskværdig, hvis inputusikkerheden hertil skal minimeres og en større prædiktionssikkerhed skal opnås.
Det konkluderes at hvis nedbrydningsraten er af en tilstrækkelig størrelse, så vil nitraten nedbrydes tilnærmelsesvis fuldstændigt, hvis partiklen transporteres under redoxgrænsen. Det vurderes ved negligering af reduktion at fejlagtig placering af redoxgrænsen vil begrænse Modelkompleksets evner til simulering af nitratkoncentrationer, hvorfor mere præcis fastlæggelse af redoxgrænsen er at foretrække, hvis validiteten skal forøges. Det er undersøgt, hvorvidt UZ-Modellen kan erstattes af en forsimplet lineær skalering af typekurver for nitratudvaskningen. Det konkluderes, at lineær skalering potentielt kan anvendes som transport af nitrat i den umættede zone. Hertil konkluderes det, at der kræves et betragteligt større antal partikler pr. beregningscelle for en sådan model sammenlignet med nærværende konfiguration.
Det konkluderes at metoden for implementering af dobbeltporøsitet i den umættede zone har en betydning for valideringen, men det er ikke klarlagt, hvorledes implementeringen kan valideres. Hertil konkluderes det, at implementeringen af dobbeltporøsitet ikke kan medføre den ønskede dynamiske gennemskylningseffekt i sprækkesystemet.
Det er fundet at metode 3 er særligt anvendelig i vurdering af Modelkomplekset evne til modellering af nitrat fra udvaskning til vandforsyningsboring. Det konkluderes at der forekommer en afvigelse i størrelsesordenen $\pm 5\,\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}$. Metode 3 anvendes på baggrund af resultatstatistikken og grafiske betragtning af koncentrationsforløb til risikovurderingen.

På baggrund af den udfærdigede risikovurdering for ni udvalgte vandforsyningsboringer vurderes særligt 34.2407, 34.908 og 34.1670, at være i risiko for overskridelse af grænseværdien for nitrat i fremskrivningsperioden til år 2100. Forsyningssikkerheden er særligt truet for Frejlev Vandværk, da vandforsyningsboring 34.2407 udgør den totale indvindingsmængde for vandværkets Kildeplads Syd.
Overordnet set har den implementerede indsatsplan en reducerende effekt for nitratkoncentrationen for vandforsyningen i helhedsplanområdet. Effekten er varierende, og vurderes mest effektiv ved 34.2407 og 34.1670, hvor koncentrationen på forhånd måles relativ høj og nær grænseværdien. Indsatsplanen forhindrer ikke 34.2407 og 34.1670, der har en stigende tendens i nitratkoncentrationen, i at overskride grænseværdien.

Det forventes at stigende nitratkoncentrationer for vandforsyningsboringerne tilknyttet AKV-Drastrup 2 aftager ved toppunktet i år 2017-2030, hvorfor effekten af indsatserne har en maksimal forsinkelse på 30 år fra implementering. Forsinkelsen er imidlertid større for AKV-Drastrup 1, hvor den maksimale forsinkelse af indsatserne simuleres til 59 år. En fremtidigt sløjfning af vandforsyningsboringer tilknyttet AKV-Drastrup 1 vurderes sandsynlig. Omfanget vurderes for AKV-Drastrup 1 at være mindre, sammenlignet med den samlede indvindingsmængde på nærliggende AKV-Drastrup 2.
Ved implementering af Fødevare- og landbrugspakken og derved en 10 %'s forøgelse for nitratudvaskningen vurderes effekten for nitratkoncentrationen, i de undersøgte vandforsyningsboringer, at være minimal. Dette statslige tiltag forventes at have større effekt på det omkringliggende miljø frem for grundvandskvaliteten.
Det er således konkluderet at Modelkomplekset er potentielt værdiskabende i form af evnen til at fremskrive nitratkoncentrationer i vandforsyningsboringer ved stokastisk modellering. Hertil er Modelkomplekset særdeles anvendeligt i beskrivelsen af ændret udvaskning ved overfladen, hvorfor anvendelse til målrettet regulering og evaluering af indsatsplaner er mulig. Det er klarlagt, at der til trods for denne evne, stadig foreligger en række usikkerheder i Modelkomplekset, hvorfor videre undersøgelse potentielt kan forbedre prædiktionsevnen betragteligt.

Kapitel 11

Videre undersøgelse og forbedringer

Det er påvist at flere elementer i Modelkomplekset kræver videre undersøgelse, hvis det klarlagte potentiale for modellering af nitrattransport på regional skala skal opnås. I bestræbelsen på at forbedre og minimere usikkerhed, i beskrivelsen af nitrat fra udvaskning til vandforsyningsboringer ved Modelkomplekset, præsenteres i nærværende kapitel en række initiativer til videre undersøgelse og forbedring. Der prioriteres initiativer og undersøgelser, der med minimale strukturelle ændringer vurderes at føre til markant forbedring.

Anvendelse af typekurver for nitratudvaskning, hvor det totale areal opdeles i underkategorierne landbrug, natur og by vil utvivlsomt afvige fra den reelle udvaskning. Særligt fastlæggelsen af en forventelig historik for nitratudvaskningen i landbruget er forbundet med usikkerhed. Det vil hertil være fordelagtigt, at anvende raffinerede udvaskningskort på regional skala, hvor særligt de grundvandsdannende oplande er detaljeret beskrevet. Samtidigt er det, særligt for historikken af udvaskningen, interessant at have veldefineret kendskab til, hvornår en nitratbeskyttende indsats er iværksat samt hvilken tidsperiode indsatsen strækkes over. Det vurderes at en detaljeringsgrad svarende til den horisontale diskretisering er passende. Til en sådan information er det ligeledes relevant, at placeringen af de forskellige indsatsområder er klarlagt. Det vurderes at en sådan geografisk og kronologisk detaljeret beskrivelse af udvaskningshistorikken for særligt de grundvandsdannende oplande ved AKV-Drastrup kildepladserne vil eliminere en række inputusikkerheder og afvigelser fra de reelle forhold og derved føre til en større sikkerhed i valideringen af Modelkomplekset.

Det er påvist, at Modelkomplekset er særligt sensitiv for placeringen af redoxgrænsen. Denne grænse, hvor reduktionen af nitrat påbegynder ved en 1. ordens nedbrydningsrate er i nærværende rapport fastlagt til mergelhorisonten. Det er tvivlsom hvorvidt mergelhorisonten definere denne grænse i hele modelområdet, da der forventes at der potentielt kan være tilgængeligt ilt og en minimal koncentration af reaktive nitratreducerende stoffer under en sådan horisont. Desuden er der ikke overalt i modelområdet påvist, at mergelhorisonten er geologisk tilstede, hvorfor det forventes, at der i områder af modelområdet forekommer markant mindre reduktion af nitrat end forventeligt under reelle forhold. Det vurderes at videre undersøgelse af placeringen af redoxgrænsen potentielt vil medføre relativt stor udbedring af Modelkompleksets validitet. Det tiltænkes, at grænsen kan fastlægges med stigende indhold af nitratreducerende stoffer i sedimentet herunder primært de reaktive indhold af pyrit, organisk kulstof og ferroforbindelser. Desuden kan sulfatkoncentrationen under det naturlige indhold benyttes som indikator for nitratreduktion, da reduktionen af sulfat forekommer med et lavere reduktionspotentiale sammenlignet med nitrat. Nedtrængningsdybden for ilt vurderes at være relativt usikker og i tilfælde afhængig af vandværkernes påvirkning på strømningsforholdene, hvorfor en inddragelse af redoxgrænsens placering i den stokastiske analyse som variabel vil potentielt medføre en større strukturel sikkerhed. En dynamisk placering af redoxgrænsen kan yderligere anvendes ved fremskrivning til år 2100, da det forventes at nitratfronten bevæges langsomt nedad efterhånden som de nævnte reaktive nitratreducerende stoffer opbruges. Samlet set vurderes det at være af topprioritet at fastlægge redoxpotentialet med en detaljeringsgrad som beskrevet.

I kalibreringen af Modelkomplekset er det fundet, at der foreligger en relativt markante variationer i målt nitratkoncentration indenfor korte tidsrum. Hertil kan det videre undersøges, hvorvidt der afhængig af afvigelser fra gennemsnitlig indvindingsmængde kan frasorteres målt data til kalibreringen. Således kan der ved år med ekstremer i indvindingen fjernes data, da det vurderes, at strømningsforholdene vil variere i en sådan grad, at Modelkomplekset ikke kan simulere denne usikkerhed i måledata. Desuden kan der

tillægges et kriterie for måledata, således vandforsyningsboringen skal have været aktiv i et fastsat antal år, før observationsdata anvendes. Ligeledes er Modelkomplekset overvejende valideret mod stigende nitrathistorik, hvilket skyldes, at der endnu ikke registreres entydigt aftagende nitratkoncentrationer i vandforsyningsboringer ved OSD 1432. Det forventes at Modelkompleksets validitet kan styrkes, hvis muligt at simulere påviste effekter af indsatser, som omtalt i 3.2.2 på side 14.

Litteratur

Aalborg Kommune, **2001**. Aalborg Kommune. *Delindsatsplan - For området mellem Nibevej og Ny Nibevej*. page 6, 2001.

Aalborg Kommune, **2009**. Aalborg Kommune. *Evaluering af indsatsplan for Drastrup - Rapport*. side 6–13, 2009.

Aalborg Kommune, **2000**. Aalborg Kommune. *Helhedsplan - For nuværende og fremtidig arealanvendelse i Drastrupområdet*, 2000.

Aalborg Kommune, **2015**. Aalborg Kommune. *Baggrund for indsatsplanlægning og grundvandsbeskyttelse i Aalborg Kommune - Temamøde om kvælstofudvaskning den 18. marts 2015*, 2015.

Aalborg Vand A/S, **2015**. Aalborg Vand A/S. *Om Vand A/S*. URL: `https://www.aalborgforsyning.dk/vand/om-vand-as.aspx`, 2015.

Aarhus Universitet, **2016**. Aarhus Universitet. *REVURDERING AF BASELINE*, 2016.

Beven, **2009**. Keith Beven. *Environmental Modelling: An Uncertain Future?* ISBN I 0: 0-415-46302-5 (hbk), Handbook. Routledge, 2009.

Brüsch, **1987**. Walter Brüsch. *Grundvandskemi og arealanvendelse - Grundvandskemi under hede, granplantage, løvskov og landbrug pa tørre sandede jorder*. ISBN: 87-503-6624-6, Handbook. Skov- og Naturstyrelsen, 1987.

Commission, **2010**. European Commission. *The EU Nitrates Directive*. side 1–4, 2010.

DANVA, **2010**. DANVA. *Udvidet vandrensning*. URL: `http://www.vandetsvej.dk/Udvidet-vandrensning-199.aspx`, 2010.

Det Kongelige Bibliotek, **2015a**. Det Kongelige Bibliotek. *Luftfoto fra 1992*. URL: `http://www.kb.dk/danmarksetfraluften/`, 2015.

Det Kongelige Bibliotek, **2015b**. Det Kongelige Bibliotek. *Luftfoto fra 2011*. URL: `http://www.kb.dk/danmarksetfraluften/`, 2015.

DHI, **2000**. DHI. *MIKE SHE WQ – User Manual Particle Tracking Module*. side 1–2, 2000.

Eldrup og Bonnerup, **2014**. Ellen Eldrup og Margrethe Dalsgaard Bonnerup. *Stoftransport i umættet kalk - Nitratforurening af grundvandet i Aalborg*. side 68–69, 2014.

EPA, **2002**. Environmental Protection Agency EPA. *Transport and fate of contaminants in the subsurface*. URL: `http://www.bvsde.ops-oms.org/muwww/fulltext/repind46/transport/transport.html`, 2002.

Feasta, Hiscocka, Dennisa, og Andrewsb, **1998**. N.A. Feasta, K.M. Hiscocka, P.F. Dennisa, og J.N. Andrewsb. *Nitrogen isotope hydrochemistry and denitrification within the Chalk aquifer system of north Norfolk, UK*. 211, side 233 – 252, 1998.

Geodatastyrelsen, **2015**. Geodatastyrelsen. *Kortforsyningen.dk*. URL: `http://download.kortforsyningen.dk/`, 2015.

GEUS, **2015**. GEUS. *Jupiter Database*. URL: http://data.geus.dk/geusmap/?mapname, 2015.

GEUS, **2009**. GEUS. *Grundvandsforvaltning i Danmark*. page 1, 2009.

Gladsaxe Kommune, **2015**. Gladsaxe Kommune. *Lerlagets tykkelse og grundvandsmagasiners sårbarhed*. URL: http://planer.gladsaxe.dk/dk/vand/indsats_grundvand/baggrundsviden/geologi_og_grundvandsstroemning_i_gladsaxe/lerlagets_tykkelse_og_grundvandsmagasiners_saarbarhed.htm, 2015.

Grant, Paulsen, Jørgensen, og Kyllingbæk, **2002**. Ruth Grant, Irene Paulsen, Villy Jørgensen, og Arne Kyllingbæk. *Vandmiljøplan II - baggrund og udvikling*. ISBN: 1399-8323, Elektronisk. Danmarks Miljøundersøgelser, Miljøministeriet, 2002.

Grønvald, **2015**. Per Grønvald. *Udviklingen i vandkvaliteten - nitrat*. Aalborg Forsyning, 2015.

Hansen, Schullehner, og Sigsgaard, **2014**. Birgitte Hansen, Jörg Schullehner, og Torben Sigsgaard. *Geoviden, geologi og geografi, NITRAT*, 2014.

Jensen, **2009**. Jacob Birk Jensen. *Parameter and Uncertainty Estimation in Groundwater Modelling*. side 53–67, 2009.

Jensen og Lindegaard, **2014**. Kaj Sand Jensen og Claus Lindegaard. *Ferskvandsøkologi*. ISBN: 978-87-02-02921-5, Handbook. Gyldendal, 2014.

Johansen, **2011**. Ole Munch Johansen. *Eco-hydrological modelling of stream valleys*. side 137–139, 2011.

Krause, Boyle, og Bäse, **2005**. P. Krause, D. P. Boyle, og F. Bäse. *Comparison of different efficiency criteria for hydrological model assessment*. side 1–9, 2005.

Kyllingsbæk, **2008**. Arne Kyllingsbæk. *Landbrugets husholdning og næringstoffer 1900-2005*, 2008.

Loll og Møldrup, **2000**. Per Loll og Per Møldrup. *Soil Characterization and Polluted Soil Assessment*, 2000.

Lorens Hansen, **1976**. Lorens Hansen. *Jordtyper ved Statens Forsøgsstationer*, 1976.

Lui, Freer, Beven, og Matgen, **2009**. Yanli Lui, Jim Freer, Keith Beven, og Patrick Matgen. *Towards a limits of acceptability approach to the calibration of hydrological models: Extending observation error*. Journal of Hydrology, 367, side 93–103, 2009.

Mathias, Butler, Jackson, og H.S.Wheater, **2006**. S.A Mathias, A.P. Butler, B.M. Jackson, og H.S.Wheater. *Transient simulations of flow and transport in the Chalk unsaturated zone*. 330, 1, 2006.

Mathias, **2005**. Simon Alexander Mathias. *Modelling flow and transport in the Chalk unsaturated zone*, 2005.

Miljø- og Fødevareministeriet, **2016**. Miljø- og Fødevareministeriet. *Bakteriel omdannelse af nitrat til atmosfærisk kvælstof*. URL: http://naturstyrelsen.dk/naturbeskyttelse/naturprojekter/tilskudsordninger/nye-vandprojekter/den-kommunale-vaadomraadeindsats/viden-om-vaadomraader/naeringsstoffer/kvaelstoffjernelse/bakterielomdannelse/, 2016.

Miljø- og Fødevareministeriet, **2015**. Miljø- og Fødevareministeriet. *Aftale om Fødevare- og landbrugspakke*, 2015.

Miljøministeriet, Fødevarer, og Fiskeri, **2004**. Miljøministeriet, Ministeriet for Fødevarer, og Landbrug og Fiskeri. *Vandmiljøplan III*, 2004.

Miljøministeriet, **2012**. Naturstyrelsen Miljøministeriet. *Statslig udmelding til vandplanernes retningslinjer 40 og 41 i forhold til byudvikling og anden ændret arealanvendelse i Områder med Særlige Drikkevandsinteresser (OSD) og indvindingsoplande*. page 3, 2012.

Miljøministeriet, **2011**. Naturstyrelsen Miljøministeriet. *Vandplan 2010 – 2015. Limfjorden. Hovedvandopland 1.2*. ISBN: 978-87-7279-336-8, PDF. Miljøministeriet, Naturstyrelsen, 2011.

Miljøstyrelsen, **2010**. Miljøstyrelsen. *Aftale mellem Regeringen og Dansk Folkeparti om Grøn Vækst 2.0*. URL: `http://mst.dk/media/mst/67080/gr%C3%B8nv%C3%A6kst2.pdf`, 2010.

Miljøstyrelsen, **2014**. Miljøstyrelsen. *Vandmiljøplanerne - et historisk overblik*. URL: `http://mst.dk/borger/landbruget-miljoeet/baeredygtighed-i-landbruget/vandmiljoeplanerne-et-historisk-overblik/`, 2014.

Miljøstyrelsen, **2005**. Miljøstyrelsen. *Vejledning om vandkvalitet og tilsyn med vandforsyningsanlæg*. URL: `http://www2.mst.dk/Udgiv/publikationer/2005/87-7614-727-4/pdf/87-7614-727-4.pdf`, 2005.

Naturstyrelsen, **2010**. Naturstyrelsen. *Grundvand - Kilder til forurening*. URL: `http://naturstyrelsen.dk/vandmiljoe/vand-i-hverdagen/grundvand/kilder-til-forurening/`, 2010.

NIRAS, **2015**. Aalborg NIRAS. *Grundvandsmodel for Sydvest-området*. Udleveret, 2015.

Retsinformation, **2011**. Retsinformation. *Bekendtgørelse om indsatsplaner*. URL: `https://www.retsinformation.dk/forms/R0710.aspx?id=139378`, 2011.

Retsinformation, **1986**. Retsinformation. *Beretning over vandmiljøplanen*. URL: `https://www.retsinformation.dk/Forms/R0710.aspx?id=105550`, 1986.

Scharling og Kern-Hansen, **2002**. Mikael Scharling og Claus Kern-Hansen. *Klimagrid - Danmark - Nedbør og fordampning 1990-2000, Beregningsresultater til belysning af vandbalancen i Danmark*. page 12, 2002.

Sonnenborg, **2006**. Torben O. Sonnenborg. *Vandressource- og stoftransport-modellering i kalk: status og muligheder*. ATV Møde, side 1–12, 2006.

Spitz og Moreno, **1996**. Karlheinz Spitz og Joanna Moreno. *A practical guide to groundwater and solute transport modeling*. ISBN: 0-471-13687-5, Handbook. Wiley - Interscience, 1996.

Sundhedsstyrelsen, **1994**. Sundhedsstyrelsen. *Drikkevand og Nitrat*. URL: `http://sundhedsstyrelsen.dk/publ/div/Miljoemedicin_udtalelser/drikkevand-nitrat.pdf`, 1994.

Thorling, Brüsch, Hansen, Langtofte, Mielby, og Møller, **2012**. Lærke Thorling, Walter Brüsch, Birgitte Hansen, Carsten Langtofte, Susie Mielby, og Rasmus Rønde Møller. *Grundvand, Status og udvikling 1989 – 2011*, 2012.

Vinther og Olsen, **2014**. Finn Pilgaard Vinther og Preben Olsen. *Næringsstofbalance og næringsstofoverskud i landbruget 1992/93-2012/13*. Aarhus Universitet, 2014.

WHO, **2011**. WHO. *Nitrate and nitrite in drinking-water*. URL: `http://www.who.int/water_sanitation_health/dwq/chemicals/nitratenitrite2ndadd.pdf`, 2011.

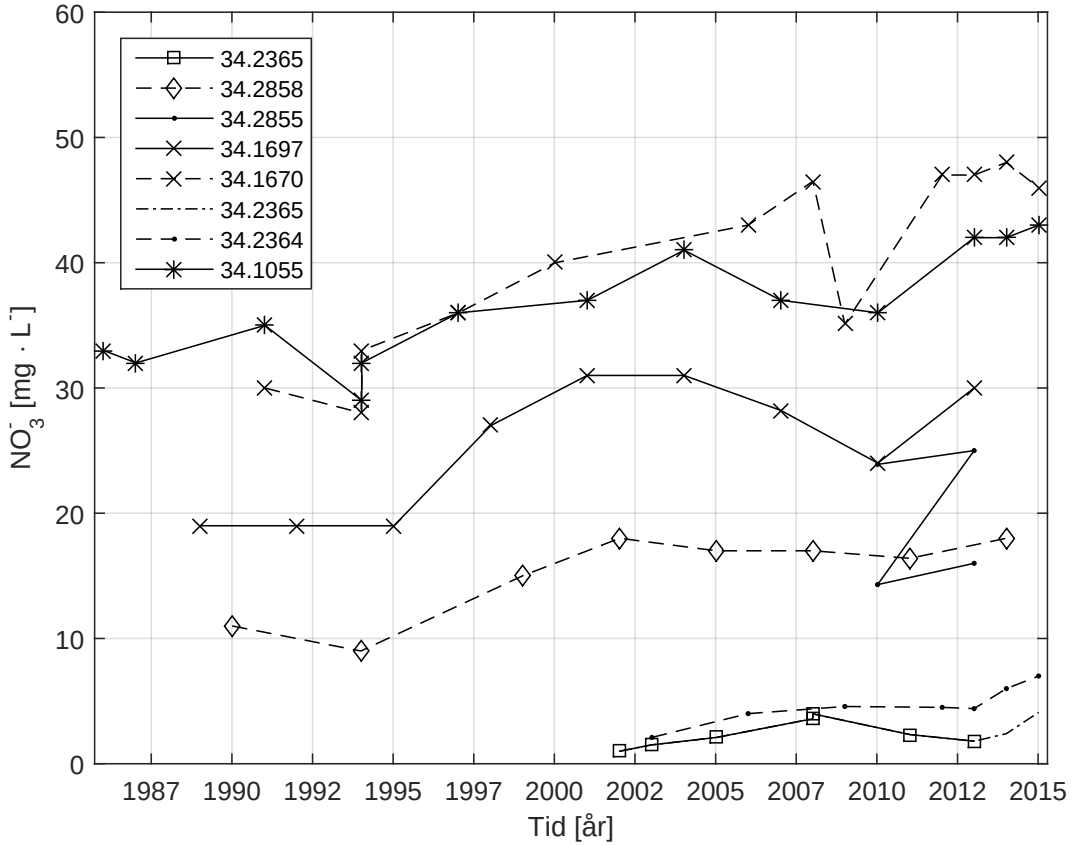
Appendiks A

Forundersøgelse

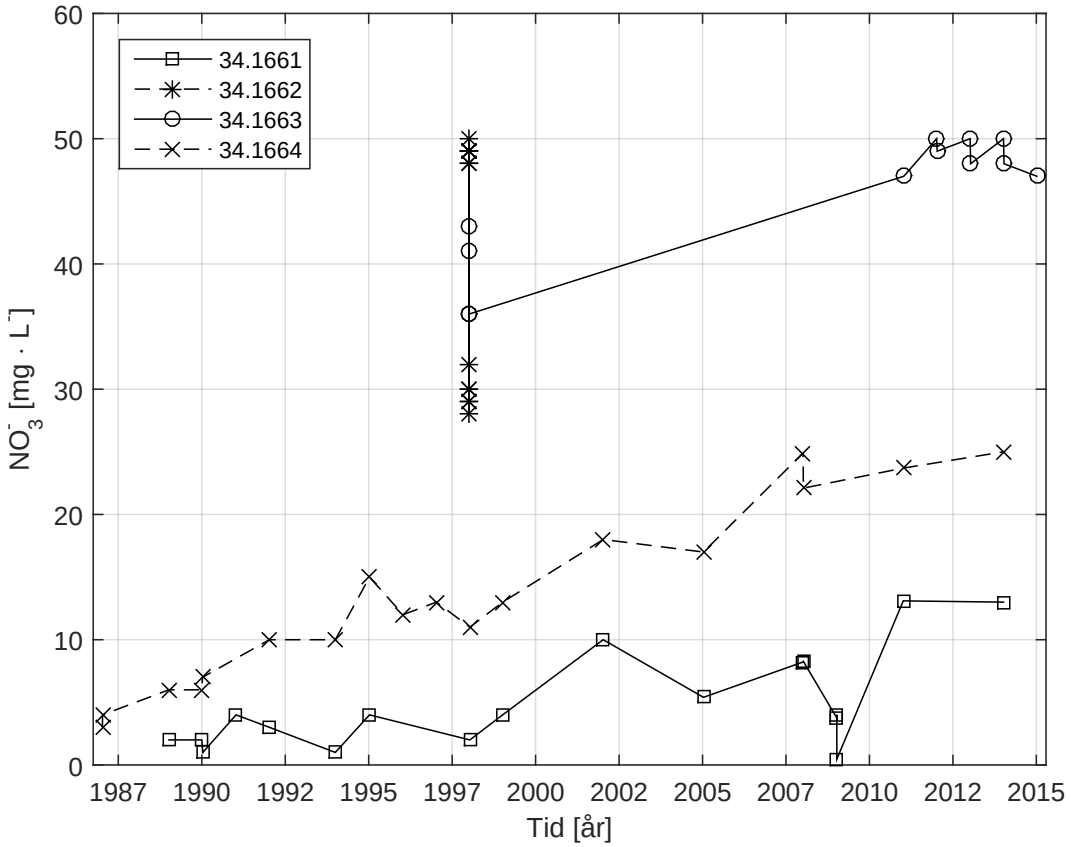
Følgende kapitel vil fungere som supplement til kapitel 3 på side 7

A.1 Nitratmonitorering i vandforsyningsboringer

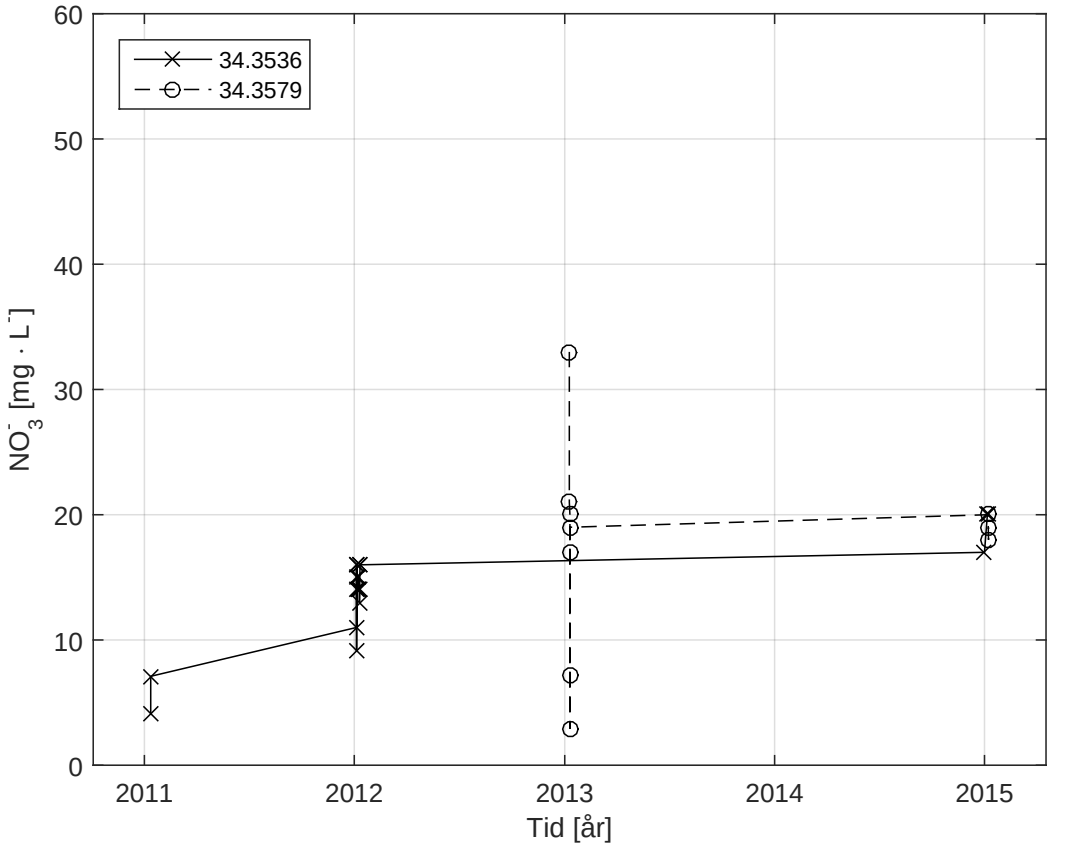
Til hvert af de udvalgte vandværker udarbejdes en grafisk illustration af udviklingen i nitratkoncentrationen for de aktive vandforsyningsboringer. Boringer, der anvendes til monitorering, er nedlagte eller anvendes som afværgeforanstaltning vil ikke indgå, da fokus i nærværende afsnit udelukkende omhandler vandforsyningsboringerne. Figur A.1-A.6 viser udviklingen i nitratkoncentrationen i aktive vandforsyningsboringer grupperet efter vandværk.
For vandværkerne AKV-Drastrup 1 og 2, AKV-Flødal, Frejlev samt Drastrup vandværk bemærkes det, at nitratkoncentrationen er stigende, hvilket i den nærmeste fremtid kan give problemer i forhold til forsyningssikkerheden. Anderledes er det for de resterende vandværker, hvor nitratkoncentrationen i grundvandet er af mindre størrelse og ikke udgør risiko på nuværende tidspunkt.



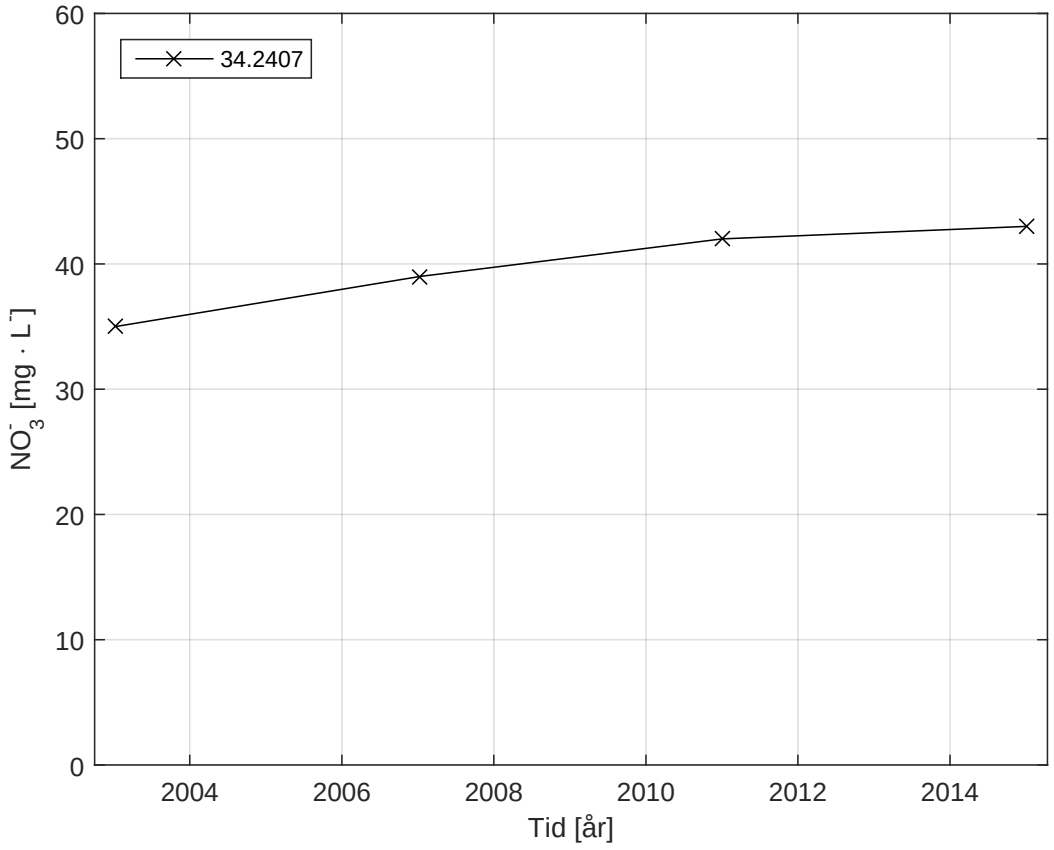
Figur A.1. Nitratkoncentration i aktive vandforsyningsboringer leverende til AKV-Drastrup 1. [GEUS, 2015]



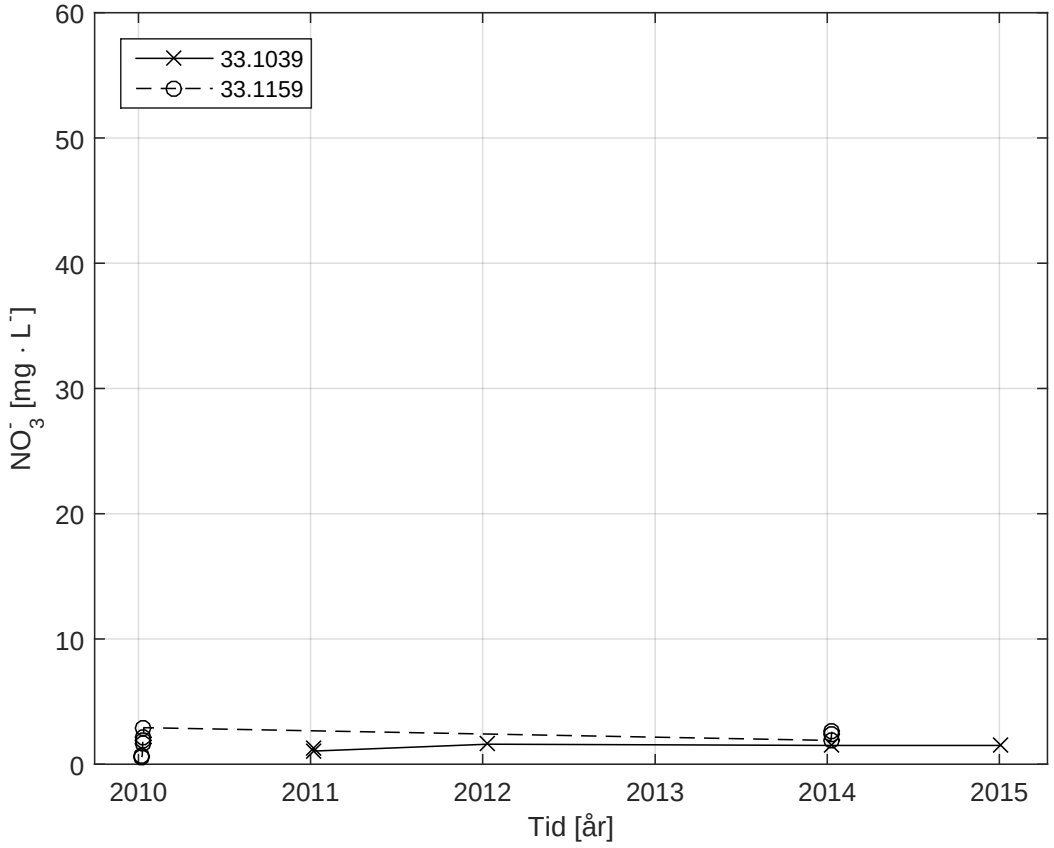
Figur A.2. Nitratkoncentration i aktive vandforsyningsboringer leverende til AKV-Drastrup 2. [GEUS, 2015]



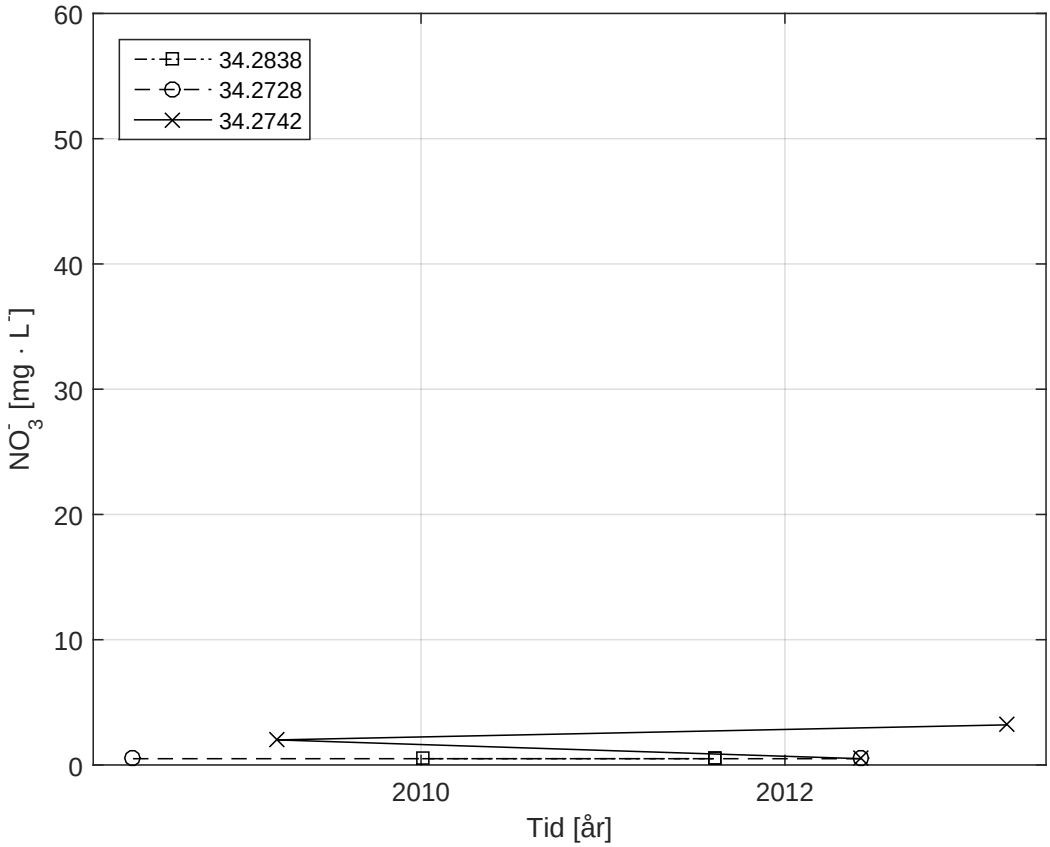
Figur A.3. Nitratkoncentration i aktive vandforsyningsboringer leverende til AKV-Flødal. [GEUS, 2015]



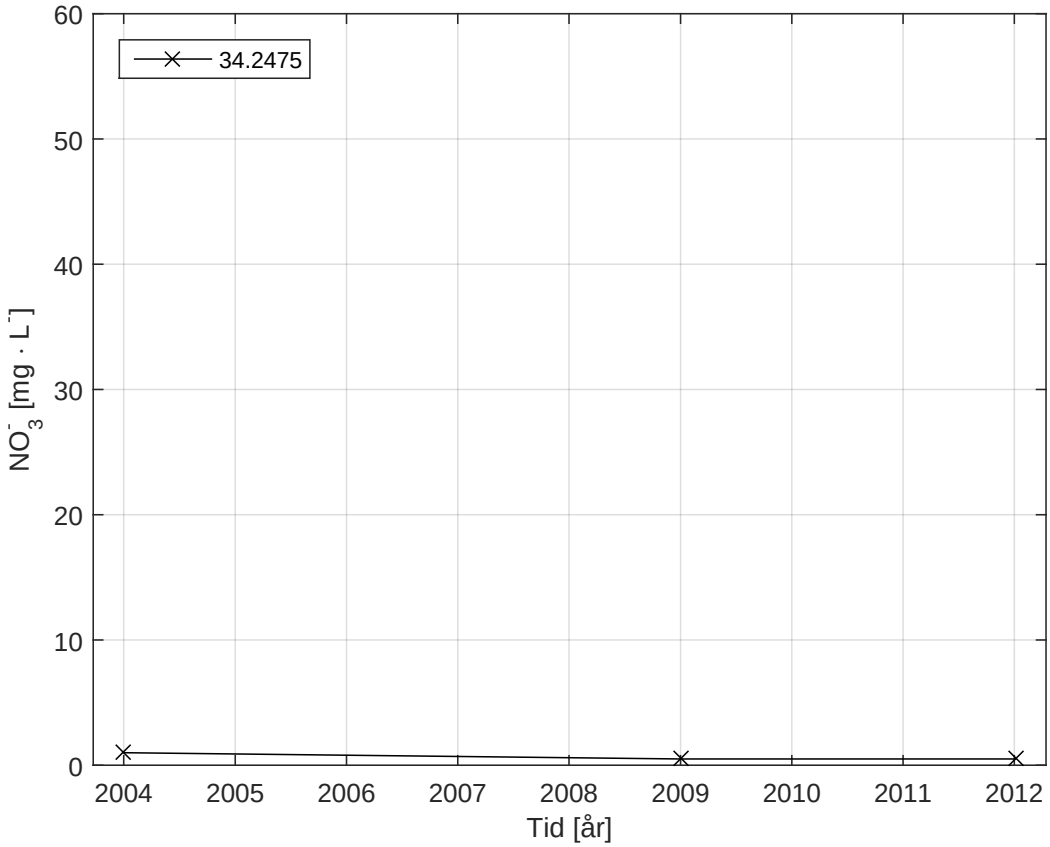
Figur A.4. Nitratkoncentration i aktive vandforsyningsboringer leverende til Frejlev Vandværk. [GEUS, 2015]



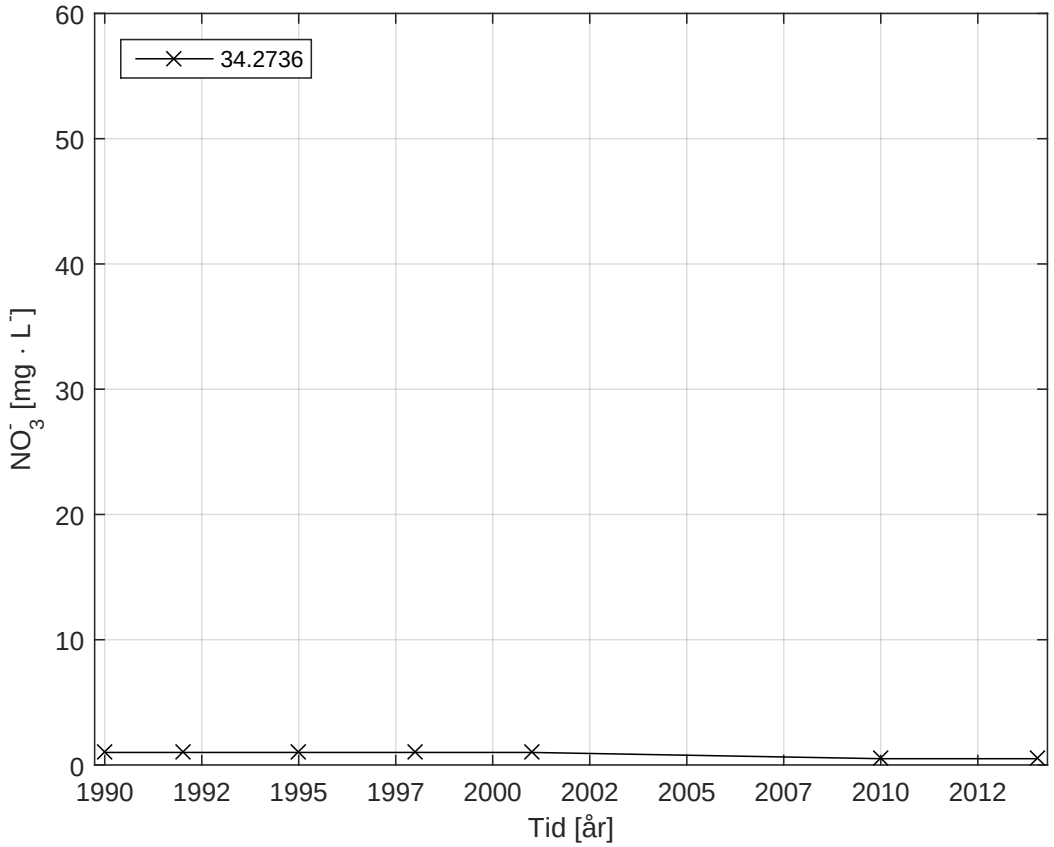
Figur A.5. Nitratkoncentration i aktive vandforsyningsboringer leverende til AKV-Nibe v. Sønderholm Plantage. [GEUS, 2015]



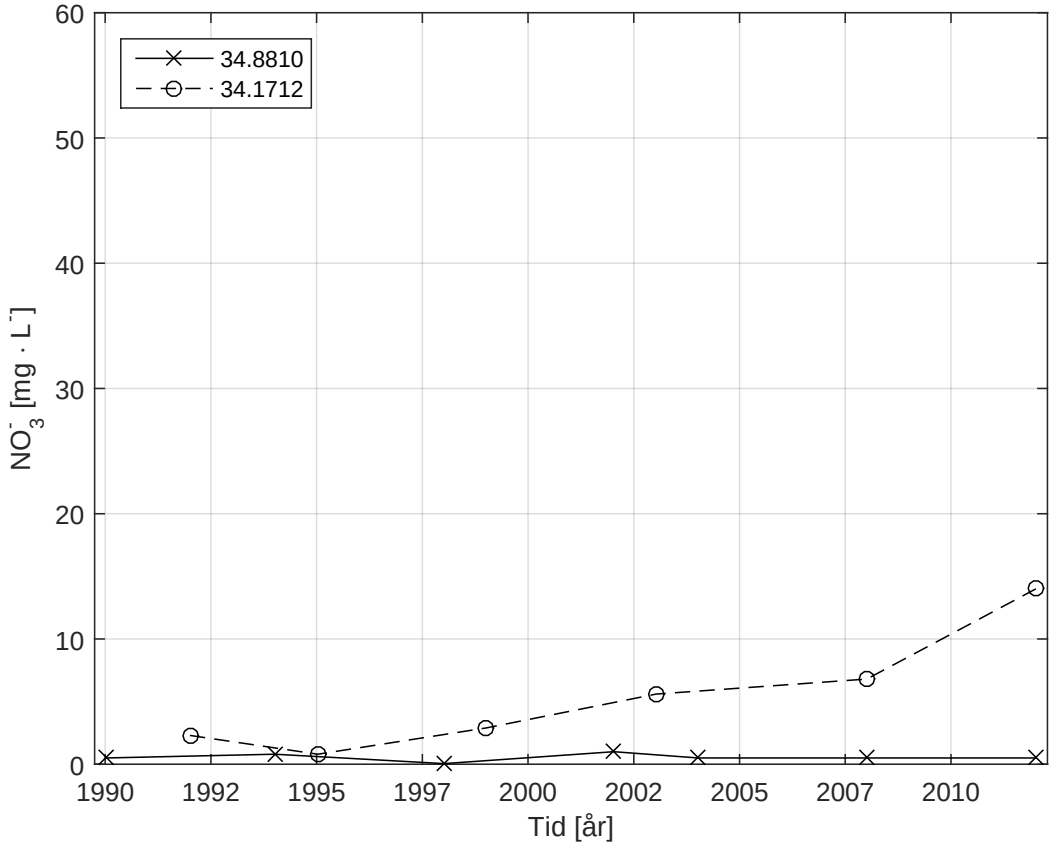
Figur A.6. Nitratkoncentration i aktive vandforsyningsboringer leverende til Svenstrup Vandværk. [GEUS, 2015]



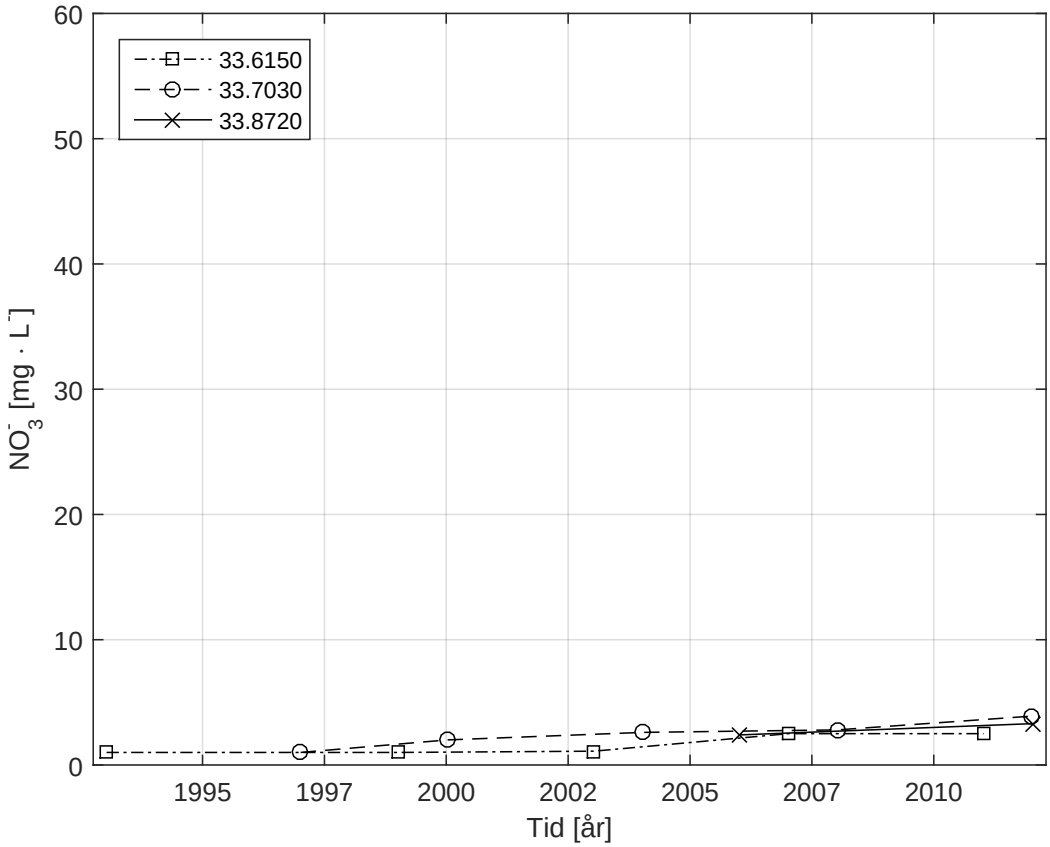
Figur A.7. Nitratkoncentration i aktive vandforsyningsboringer leverende til Guldbæk Vandværk. [GEUS, 2015]



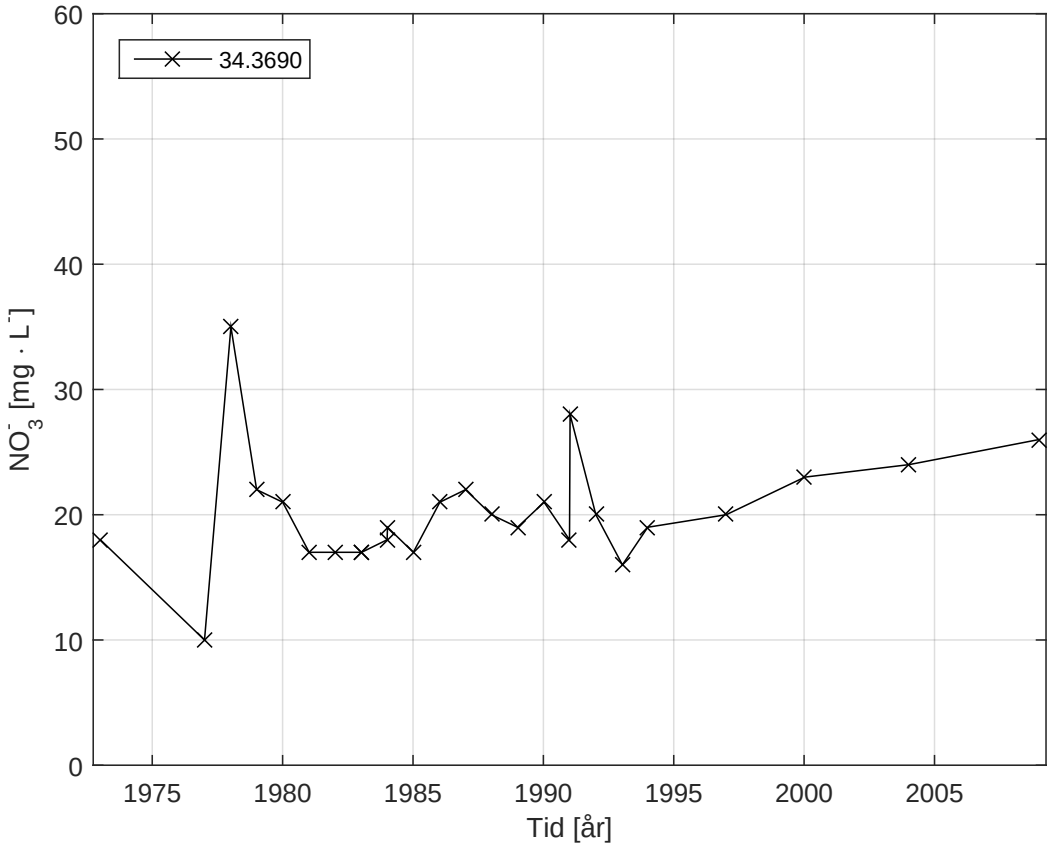
Figur A.8. Nitratkoncentration i aktive vandforsyningsboringer leverende til Godthåb Vandværk. [GEUS, 2015]



Figur A.9. Nitratkoncentration i aktive vandforsyningsboringer leverende til Øster Hornum Vandværk. [GEUS, 2015]



Figur A.10. Nitratkoncentration i aktive vandforsyningsboringer leverende til Sønderholm Vandværk. [GEUS, 2015]



Figur A.11. Nitratkoncentration i aktive vandforsyningsboringer leverende til Drastrup Vandværk. [GEUS, 2015]

Appendiks B

Dokumentation af UZ-Model

Følgende kapitel vil fungere som supplement til kapitlet 6 på side 33. Kapitlet vil indeholde en undersøgelse af kontinuitetsprincippet for udvalgte beregningsceller, en strukturel undersøgelse af modelopsætningen og afslutningsvis en fastlæggelse af modelinputs.

Opsætningen af UZ-Modellen, der beskriver vand- og stoftransporten gennem den umættede zone, kræver dokumentation og bekræftelse af at kontinuitetsprincippet er overholdt. Desuden er det essentielt at undersøge, hvilken effekt den strukturelle sammensætning af den umættede zone har for resultatet. Det betyder, at der for UZ-Modellen eftervises modelrespons ved forskellige scenarier, der samlet skal evaluere model performancen og øge forståelsen for de tilknyttede modelelementer og usikkerheder. Der opstilles et parametersæt, som gennemgående anvendes og fastholdes til undersøgelsen. Parametersættet forefindes i tabel B.1.

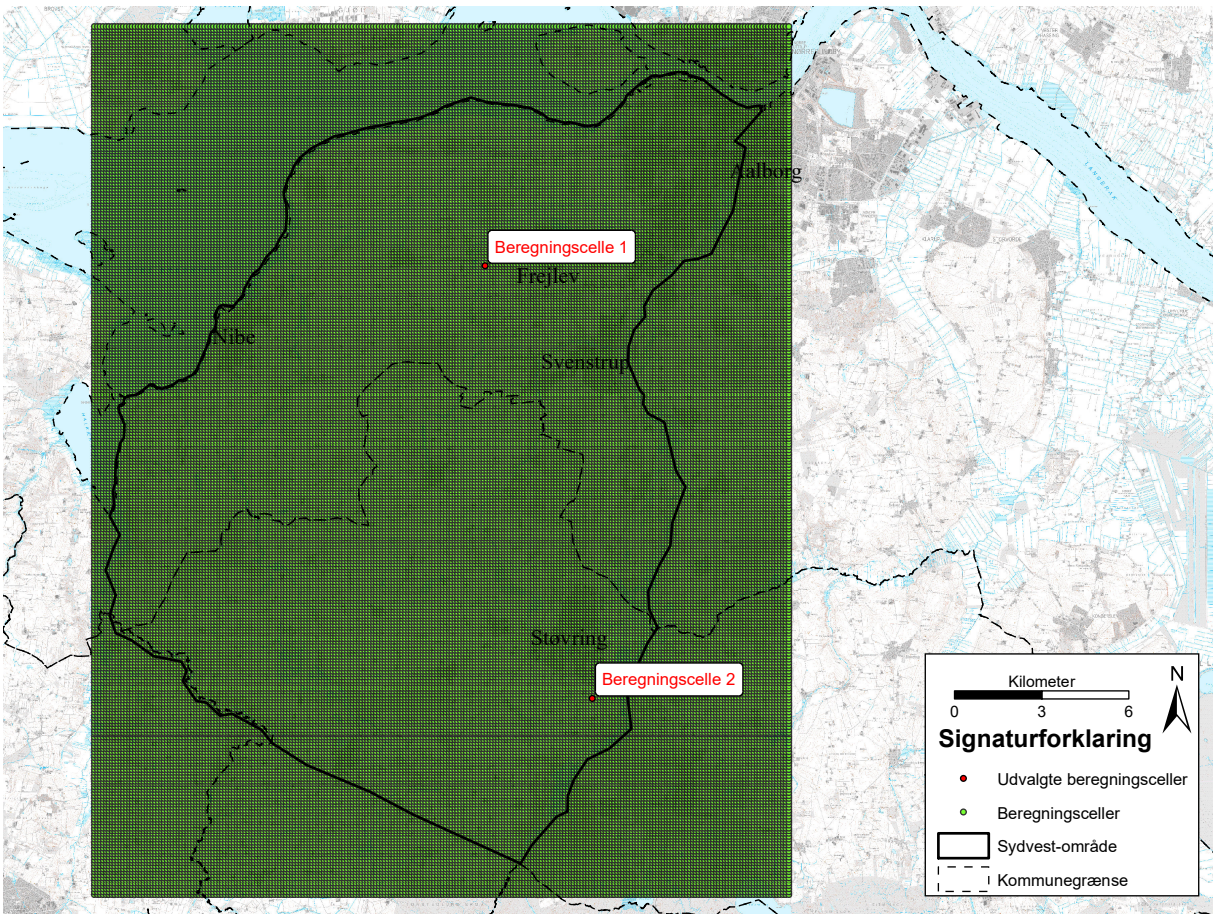
Tabel B.1. Parametersæt af dokumentation til UZ-Model.

Parameter	Enhed	Værdi
c_0	$[\mathrm{m} \cdot \mathrm{d}^{-1}]$	0,0001
s_1	$[-]$	1,0
s_2	$[-]$	0,5
s_3	$[-]$	0,1
$\theta_{eff,1}$	$[\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{m}^{-3}]$	0,15
$\theta_{eff,2}$	$[\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{m}^{-3}]$	0,05
$\theta_{eff,3}$	$[\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{m}^{-3}]$	0,04
θ_1	$[\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{m}^{-3}]$	0,20
θ_2	$[\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{m}^{-3}]$	0,30
θ_3	$[\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{m}^{-3}]$	0,40
f	$[-]$	0,8

Index 1, 2 og 3 i tabel B.1 henviser til hhv. sand, ler og kalk. Ved fastholdelse af ét parametersæt er det muligt, at bibeholde et sammenligningsgrundlag. Indledningsvis dokumenteres det at der forekommer kontinuitet i vand- og stoftransporten.

B.1 Kontinuitetsprincippet

Til undersøgelse og bekræftelse af kontinuitetsprincippets overholdelse udvælges to beregningsceller i Sydvest-området. Figur B.1 illustrerer de udvalgte beregningsceller.



Figur B.1. Placering af udvalgte beregningsceller i modelområdet.

De udvalgte beregningsceller adskiller sig både geografisk og geologisk, hvor beregningscelle 1 har beliggende vest for Frejlev, og beregningscelle 2 har beliggenhed sydøst for Støvring. Med udgangspunkt i den geologiske model beskrevet i 3.3 på side 16 udvælges specifikt to beregningsceller, hvorimellem den geologiske sammensætning af den umættede zone er særligt forskellig. Denne udvælgelse skal potentielt klarlægge, at der sker en udjævning af afstrømning afhængig af tykkelsen af den umættede zone samt den geologiske sammensætning. Tabel B.2 illustrerer den geologiske sammensætning samt tykkelsen af den umættede zone for beregningscelle 1 og 2.

Tabel B.2. Geologiske sammensætning fra terræn til grundvandspejl samt samlet tykkelse af umættet zone for beregningscelle 1 og 2.

Lag nr.	**Transportforhold**	**Beregningscelle 1** [m]	**Beregningscelle 2** [m]
1	Sand	0,50	0,50
2	Ler	0,50	0,50
3	Ler	5,59	3,26
4	Sand	6,09	9,18
5	Ler	0,50	3,66
6	Sand	0,50	0,50
7	Ler	0,50	0,50
8	Sand	0,50	0,50
9	Ler	0,50	0,50
10	Kalk	0,50	0,50
11	Kalk	0,50	27,80
	Samlet	16,18	47,40

Dokumentationen af den strukturelle analyse opdeles i afsnit for hhv. vand- og stoftransporten. Det følgende afsnit vil omhandle dokumentationen af vandbalancen i UZ-Modellen.

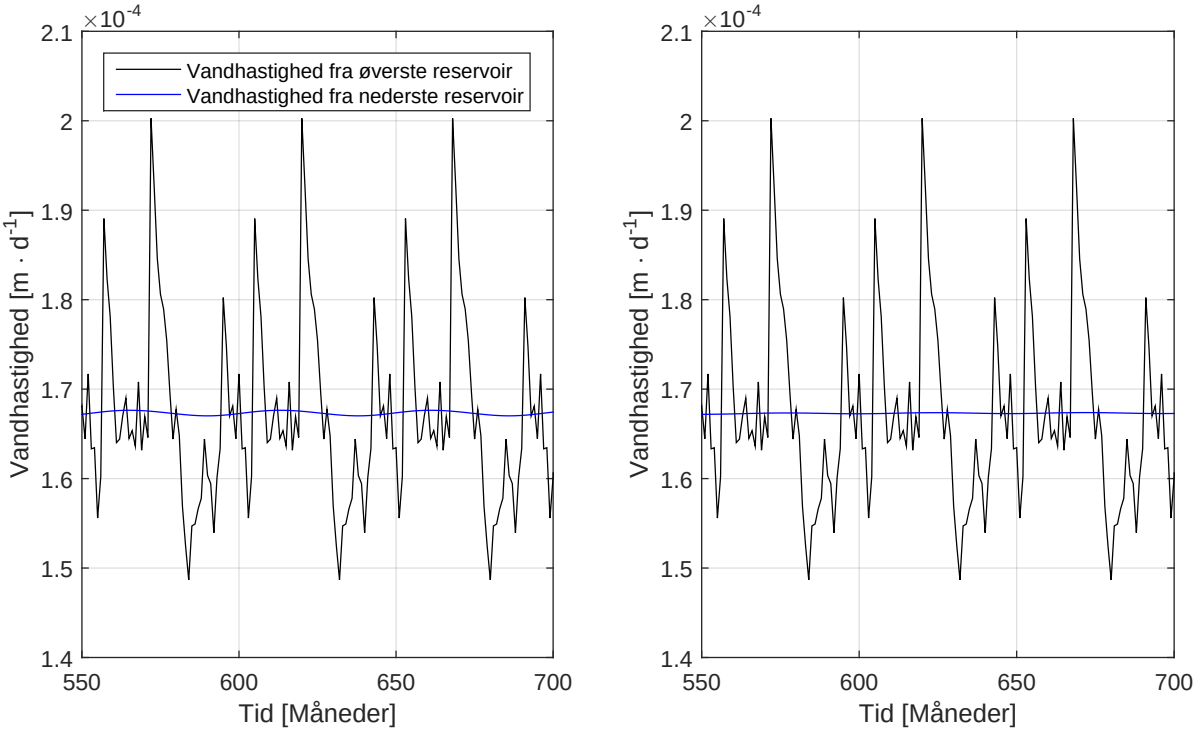
B.1.1 Vandtransport

Det er essentielt for vandtransporten at kunne dokumentere, at der ikke kunstigt opmagasineres eller fjernes vand i UZ-Modellen, hvorfor vandtransporten skal være i overensstemmelse med kontinuitetsprincippet. Det kontrolleres derfor hvorvidt det infiltrerende vand er i balance med det grundvandsbidragende vand. Undersøgelsen beregnes med modelinput, som vist i tabel B.3.

Tabel B.3. Modelinput til test af kontinuitetsprincippet for vandtransporten.

	Infiltration $[\mathrm{m}\cdot\mathrm{d}^{-1}]$	**Nitratudvaskning** $[\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}]$
Type	Tidsserie	Intet input

Infiltrationen for begge beregningsceller er en vilkårlig valgt tidsserie til bekræftelse af kontinuitetsprincippet, hvor vandbalancen er gældende. Ved anvendelse af samme infiltration for begge beregningsceller øges sammenligningsgrundlaget. Vandbalancen kontrolleres ved midling af vandhastigheden fra øverste reservoir over en udvalgt periode og sammenligne med vandhastigheden fra nederste reservoir, over samme periode. Figur B.2 viser vandhastigheden fra hhv. øverste og nederste reservoir for beregningscelle 1 og 2.



Figur B.2. Vandhastigheden fra hhv. øverste og nederste reservoir for beregningscelle 1 (venstre) og 2 (højre).

Det bemærkes af figur B.2, hvorledes der for det øverste reservoir forekommer relativt store, forventelige fluktuationer sammenlignet med nederste reservoir for både beregningscelle 1 og 2. Det bemærkes ligeledes, at der for beregningscelle 1 ikke sker samme grad af udjævning af vandhastigheden som for beregningscelle 2. Dette skyldes den markante forskel i tykkelsen af den umættede zone de to beregningsceller imellem. Det er bevist, at der sker en udjævning af afstrømningshydrografen igennem den umættede zone.

Den procentvise afvigelse i den gennemsnitslig vandhastighed fra øverste og nederste reservoir er hhv. 0,01 % og 0,62 % for beregningscelle 1 og 2. Årsagen til afvigelsen skyldes forsinkelsen af infiltrationen igennem den umættede zone. Den procentvise afvigelse i vandbalancen vil aftage og gå mod nul, når den udvalgte simuleringsperiode går mod uendeligt, indtil enkelte regnhændelser ikke har betydning for den gennemsnitlige vandhastighed.
På baggrund af den beregnede afvigelse, vurderes det at vandbalancen i UZ-Modellen er opretholdt, hvilket underbygger, at der ikke forekommer opmagasinering eller forsvinding af vand gennem den umættede zone for vandtransporten. Det følgende afsnit vil omhandle en undersøgelse af om kontinuitetsbetragtningen er overholdt for stoftransporten.

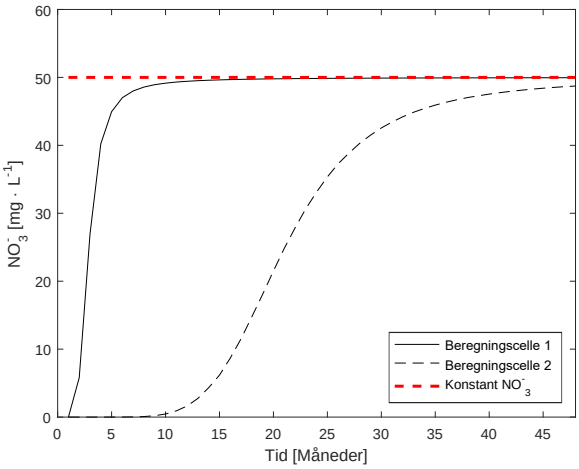
B.1.2 Stoftransport

Det er formålet med undersøgelsen at kontrollerer at kontinuitetsprincippet overholdes for stoftransporten således massen er nitrat bevares. I praksis er det forventeligt, at en umættet zone af en signifikant størrelse relativt til en tynd umættet zone, vil have større responstid og dermed en længere transportid af nitrat. Det undersøges hvordan tykkelsen af den umættede zone har betydning for tiden, hvormed koncentrationen er stabil ved konstant input med og uden stop af tilførsel af nitrat. Undersøgelsen beregnes med modelinput, som vist i tabel B.4.

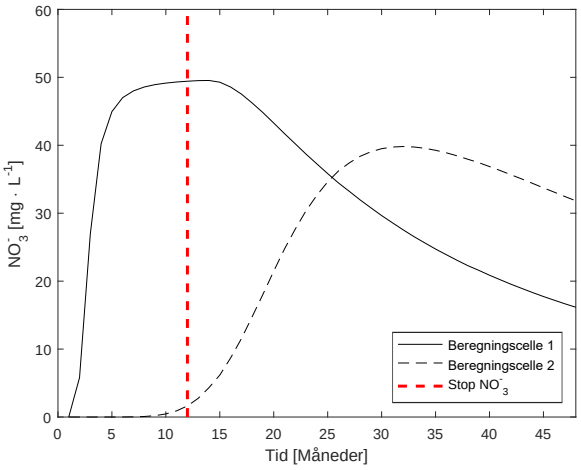
Tabel B.4. Modelinput til test af kontinuitetsprincippet for stoftransporten.

	Infiltration $[\mathrm{m}\cdot\mathrm{d}^{-1}]$	**Nitratudvaskning** $[\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}]$
Type	Konstant	Konstant (med og uden stop)

Infiltrationen fastsættes til en størrelsesorden af en forventelig nettonedbør på $300\,\mathrm{mm}\cdot\mathrm{år}^{-1}$. Dagvariationer i infiltrationen i nærværende undersøgelse vurderes irrelevant og til ulempe for gennemskueligheden. De to udvalgte beregningsceller i Sydvest-området anvendes, og danner grundlag for analysens illustrationer. I undersøgelse 1 tilføres der konstant $50\,\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}$ nitrat i en periode over 48 måneder, hvor begyndelseskoncentration i alle reservoir er $0\,\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}$. Undersøgelse 2 er tilsvarende undersøgelse 1 med et indlagt tilførselsstop af nitrat efter 12 måneder.



Figur B.3. Undersøgelse 1: Konstant nitrattilførsel på $50\,\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}$.



Figur B.4. Undersøgelse 2: Indlagt abrupt tilførselsstop ved 12 måneder.

Af figur B.3 og B.4 bemærkes, hvorledes der kommer signifikante forskelle i koncentrationsforløbet, hvilket udelukkende kan tilskrives den geologiske difference både for undersøgelse 1 og 2.
Det bemærkes af figur B.3 for undersøgelse 1, hvorledes tiden til indstilling af koncentrationen på $50\,\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}$ i det nederste reservoir for beregningscelle 2 er markant højere end for beregningscelle 1. Det sker altså, jf. undersøgelse 1, som forventet, at den vandrette asymptote optræder afhængigt af tykkelsen af den umættede zone. Da stoftransporten som nævnt er baseret på kontinuitetsprincippet, vil et scenarie med en koncentration højere end den tilførte være umulig bekræftes. Det kan herved vurderes, at der ikke internt forsvinder eller opstår masse i form af nitrat ved transporten af stof i UZ-Modellen, hvilket entydigt betyder at massen er bevaret og kontinuitetsprincippet er gældende.
Ved undersøgelse 2 kontrolleres outputresponsen ved abrupte ændringer. Undersøgelse 2 opsættes præcist som undersøgelse 1, hvor eneste ændring er et tilførselsstop af nitrat efter 12 måneder. Konstant infiltrationen på $300\,\mathrm{mm}\cdot\mathrm{år}^{-1}$ og ingen tilførsel af nitrat vil medføre fortynding. De dertilhørende resultater er illustreret på figur B.4. Af figuren er det forventeligt, at respons for ændringer i modelinput sker med relativt større forsinkelse, når tykkelsen af den umættede zone er stigende.
For at intensivere modelforståelse, forkastes den geologiske model for øjeblikket og erstattes i det følgende af et forsimplet geologisk system til en yderligere strukturel analyse af stoftransporten.

B.2 Undersøgelse af reservoirtykkelse

En relevant strukturel undersøgelse af stoftransporten er, hvorvidt en stigende tykkelse af reservoiret medfører en lineær stigning af transporthastigheden. Det forventes at en umættet zone af, eksempelvis, dobbelt magnitude vil medføre en fordoblet transporttid, hvorved selve transporthastigheden er uændret. Undersøgelsen beregnes med modelinput, som vist i tabel B.5.

Tabel B.5. Modelinput til undersøgelse af reservoirtykkelse.

	Infiltration $[\mathrm{m}\cdot\mathrm{d}^{-1}]$	**Nitratudvaskning** $[\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1}]$
Type	Konstant	Enhedsinput

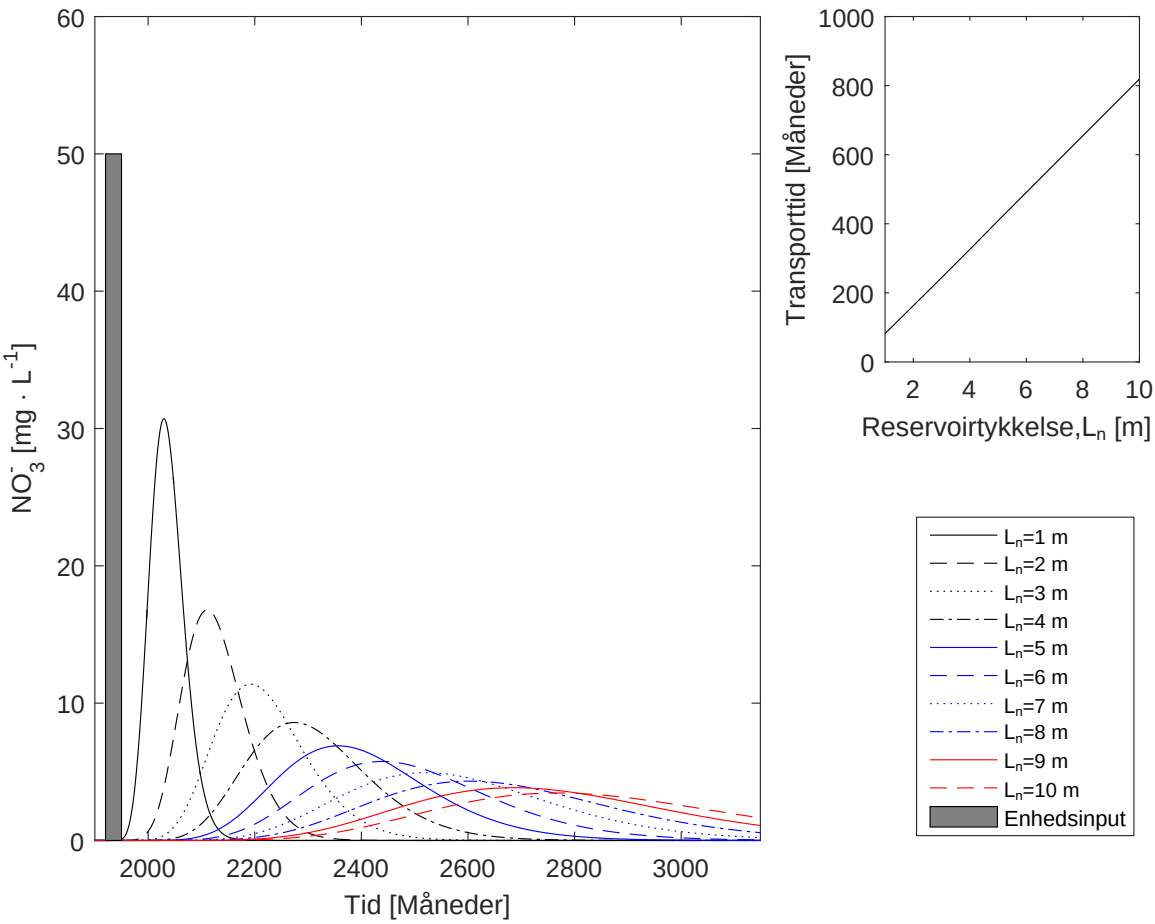
For undersøgelsens gennemskuelighed opstilles et tænkt scenarie med ensartet geologi, der beregnes som sand og antallet af reservoir til at beskrive den umættede zone fastsættes til 10. Varieres tykkelsen af hvert reservoir, L_n, mens antallet af reservoir fastholdes, muliggøres det at undersøge strukturelt, hvorvidt transporttiden for nitrat gennem den umættede zone er lineært proportional med reservoirtykkelsen. For at have en entydig fastlæggelse af transporttiden, opstilles et simpelt udtryk for beregningen, se formel (B.1).

$$t_{Transporttid} = t_{Respons} - t_{Enhedsinput} \tag{B.1}$$

hvor:

$t_{Transporttid}$	Transporttid, NO_3^-	[måneder]
$t_{Respons}$	Massemidtpunkt, output	[måneder]
$t_{Enhedsinput}$	Massemidtpunkt, input	[måneder]

Transporttiden angiver den tid hvormed nitrat transporteres gennem den samlede umættede zone fra et enhedsinput indsættes ved øverste reservoir til massemidtpunktet registreres ved nederste reservoir som respons. Parametrene fastsættes som angivet i tabel B.1 på side A7 og figur B.5 viser resultaterne af undersøgelsen.



Figur B.5. Gennembrudskurver for nitrat i den umættede zone ved forskellige reservoirtykkelser (venstre), samt illustration af sammenhængen mellem transporttid og reservoirtykkelse (højre).

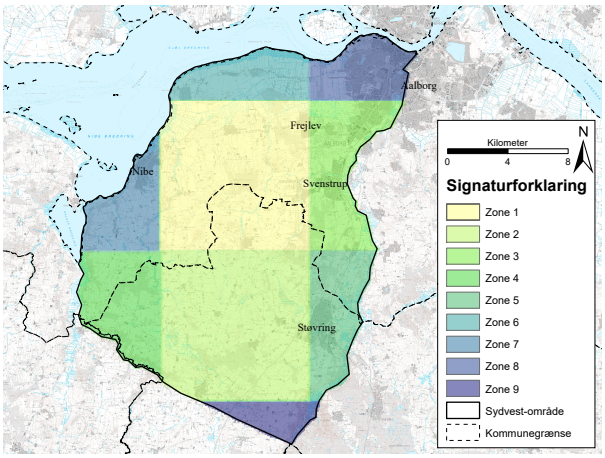
Af figur B.5 bemærkes, hvorledes der forekommer en perfekt lineær proportionalitet mellem reservoirtykkelse og transporttid når tykkelsen, L_n, øges. Det kan heraf konkluderes, at når reservoirtykkelsen stiger, så øges transporttiden af nitrat gennem den umættede zone lineært proportionalt med reservoirtykkelsen Følgende afsnit omhandler en fastlæggelse af modelinputs til UZ-Model.

B.3 Analyse af input til UZ-Model

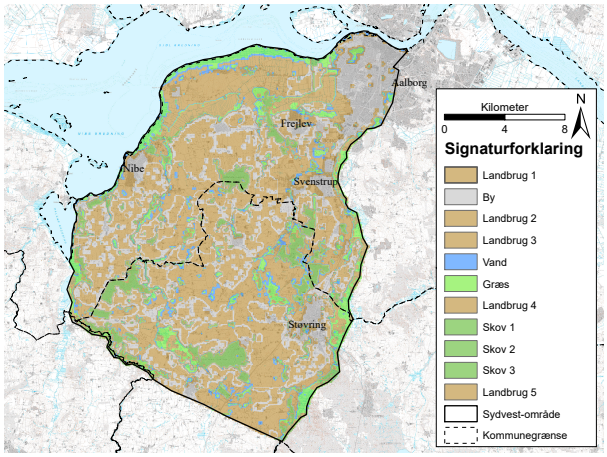
Følgende afsnit vil indeholde en fastlæggelse af infiltrationen og nitratudvaskningen hvilke udgør modelinputs til UZ-Modellen.

B.3.1 Infiltration

Til beregning af infiltrationen forudsættes klarlægning af bruttonedbøren og fordampningen fra overflader i Sydvest-området. Evaporationen og transpirationen beregnes på baggrund af et jordartskort over Sydvest-området, der angiver de forskellige typer af vegetation samt, hvilke områder der er befæstede. For områder der er befæstede er der en tilhørende afløbskoefficient. Bruttonedbøren er beregnet på baggrund af SVK regnmålere, og er inddelt i forskellige nedbørszoner for Sydvest-området. Figur B.6 og B.7 illustrerer hhv. bruttonedbørszonerne og jordartskort for Sydvest-området.



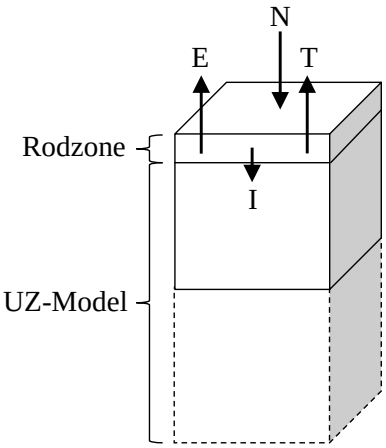
Figur B.6. Bruttonedbørszoner for Sydvest-området. [NIRAS, 2015]



Figur B.7. Jordartskort for Sydvest-området. [NIRAS, 2015]

Den aktuelle infiltration for Sydvest-området beregnes på baggrund af bruttonedbøren, evaporationen, og transpirationen. Andelen af, hvor meget vand der fordamper ved evaporation og transpiration er beregnet i MIKE SHE [NIRAS, 2015].

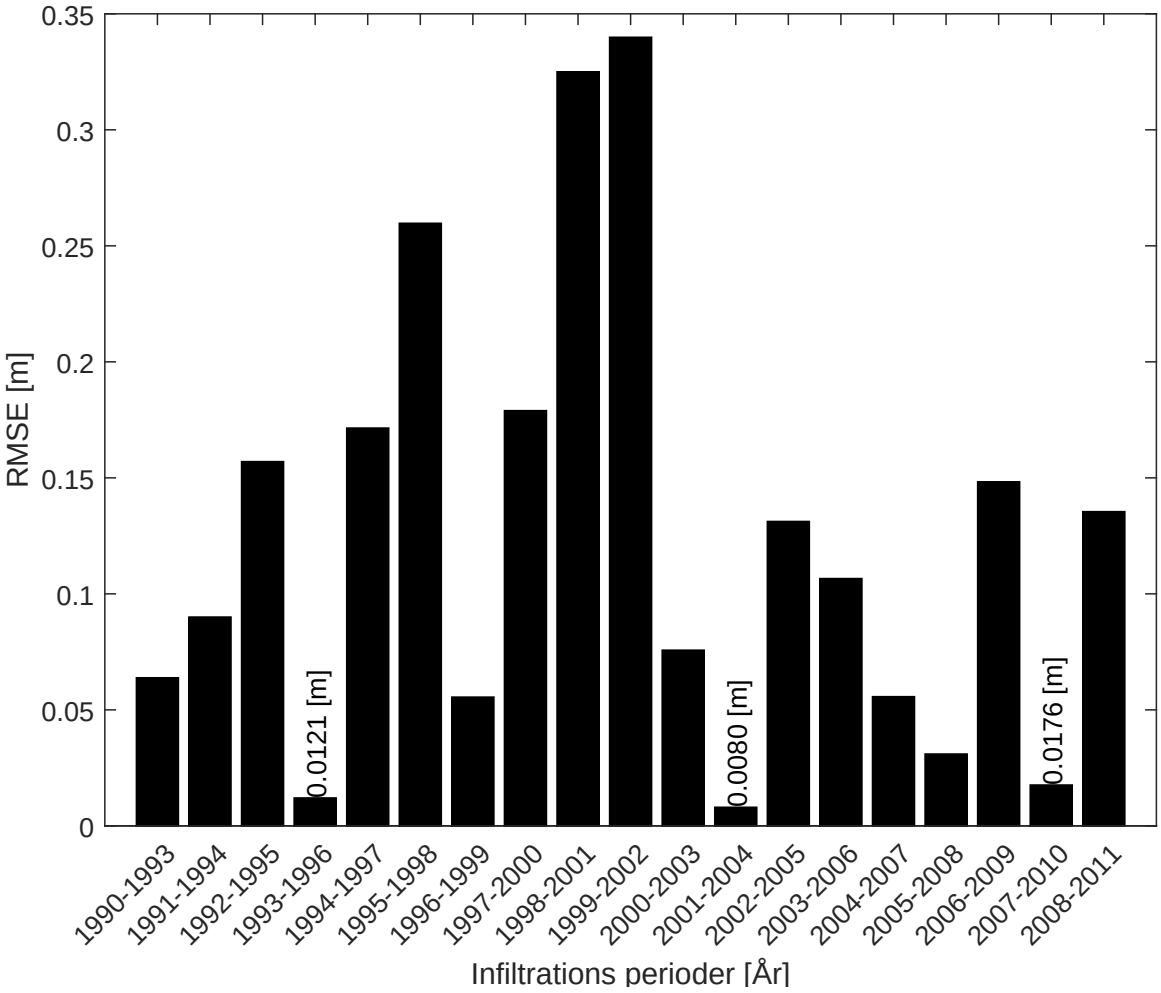
Bruttonedbøren er den totale mængde nedbør der falder i Sydvest-området, hvor evaporationen både er fordampningen fra frie vandoverflader og vand der ligger på jord- eller planteoverflader. Transpirationen udgøres af fordampningen fra planter og træers overjordiske dele [Jensen og Lindegaard, 2014]. Infiltrationen til den umættede zone beregnes ved at subtrahere evaporation og transpiration fra bruttonedbøren. En principskitse af beregningen er illustreret på figur B.8. Bemærk at rodzonen ikke indgår i UZ-Modellen, men udelukkende illustrerer, hvor infiltrationsberegningen er foretaget. For den beregnede infiltration, til den umættede zone, udvælges der en infiltrationsperiode på fire år. En fireårs infiltrationsperiode er til gunst for UZ-Modellen i forhold belastningen på simuleringscomputerens hukommelse og beregningstiden pr. modelkørsel. En infiltrationsperiode er bestående af en tidsserie på dagsbasis, der indeholder mængden, som infiltrere til den umættede zone.



Figur B.8. Principskitse for beregning af infiltration til den umættede zone. Forkortelserne på figuren er somfølgende: N=bruttonedbør, E=evaporation, T=transpiration og I=infiltration.

Der udvælges en fireårs infiltrationsperiode ved anvendelse RMSE-metoden, jf. Spitz og Moreno [1996]. RMSE er et mål for afvigelse mellem dataset, hvorfor denne metode er ideel til formålet. RMSE-værdien beregnes som afvigelsen fra den den gennemsnitlige infiltration over de udvalgte 4 år sammenlignet med

infiltrationen over hele dataperioden fra 01-01-1990 til d. 31-12-2011. Den samlede dataperiode består af i alt 19 infiltrationsperioder på 4 år, hvorfor der beregnes et tilsvarende antal RMSE-værdier. Figur B.9 illustrerer beregnet RMSE-værdi.



Figur B.9. Beregnet RMSE-værdi for hver fireårs infiltrationsperiode, der i alt viser 19 udvalgte perioder.

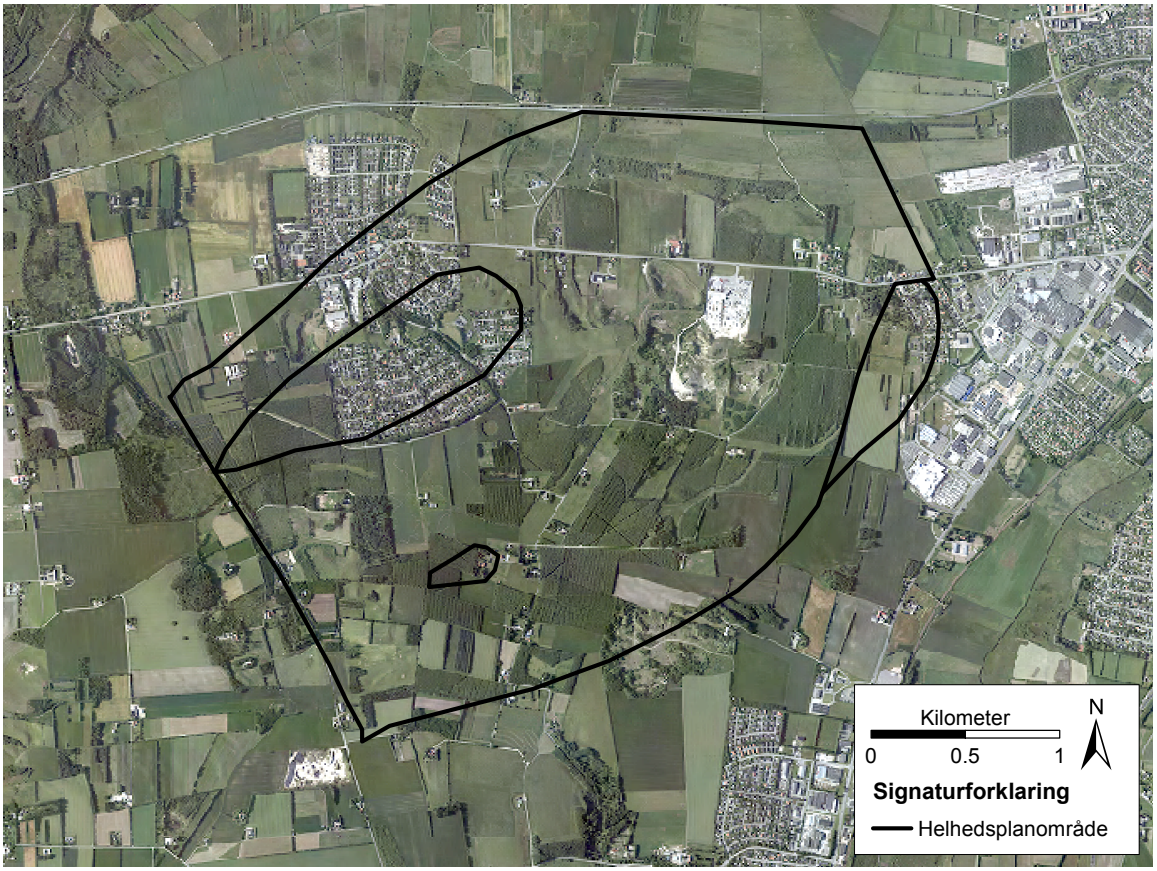
Det bemærkes af figur B.9 at særligt for tre infiltrationsperioder hhv. 1993-1996, 2001-2004 og 2007-2010 beregnes tilnærmelsesvis samme lave RMSE-værdi. Perioden fra og med 2001 til og med 2004 har den laveste beregnede RMSE-værdi, hvorfor denne infiltrationsperiode anvendes som fastlagt modelinput til UZ-Modellen.

B.3.2 Nitratudvaskning

Nitratudvaskningen til UZ-Modellen ændres fra natur til landbrug for indsatsområdet i primo år 2000. Året for ændringen vurderes på baggrund af luftfotos og igangsættelse af grundvandsbeskyttende tiltag for indsatsområdet.

Figur B.10 viser et ortofoto af området ved Frejlev og Drastrup fra 1992 samt placering af helhedsplanområdet. Ortofotos er skaleret ved benyttelse af *Georeferencing* i ArcMap. Som figuren viser er området sydsydøst til øst for Frejlev domineret af landbrug, og naturarealerne er begrænsede. Figur B.11 viser det samme område, men er fra 2011, hvor helhedsplanområdet i højere grad er domineret af natur. Naturområderne indeholder ikke kun skov, men også vedvarende græsarealer som kan forveksles med dyrkede landbrugsarealer ved en visuelt betragtning.

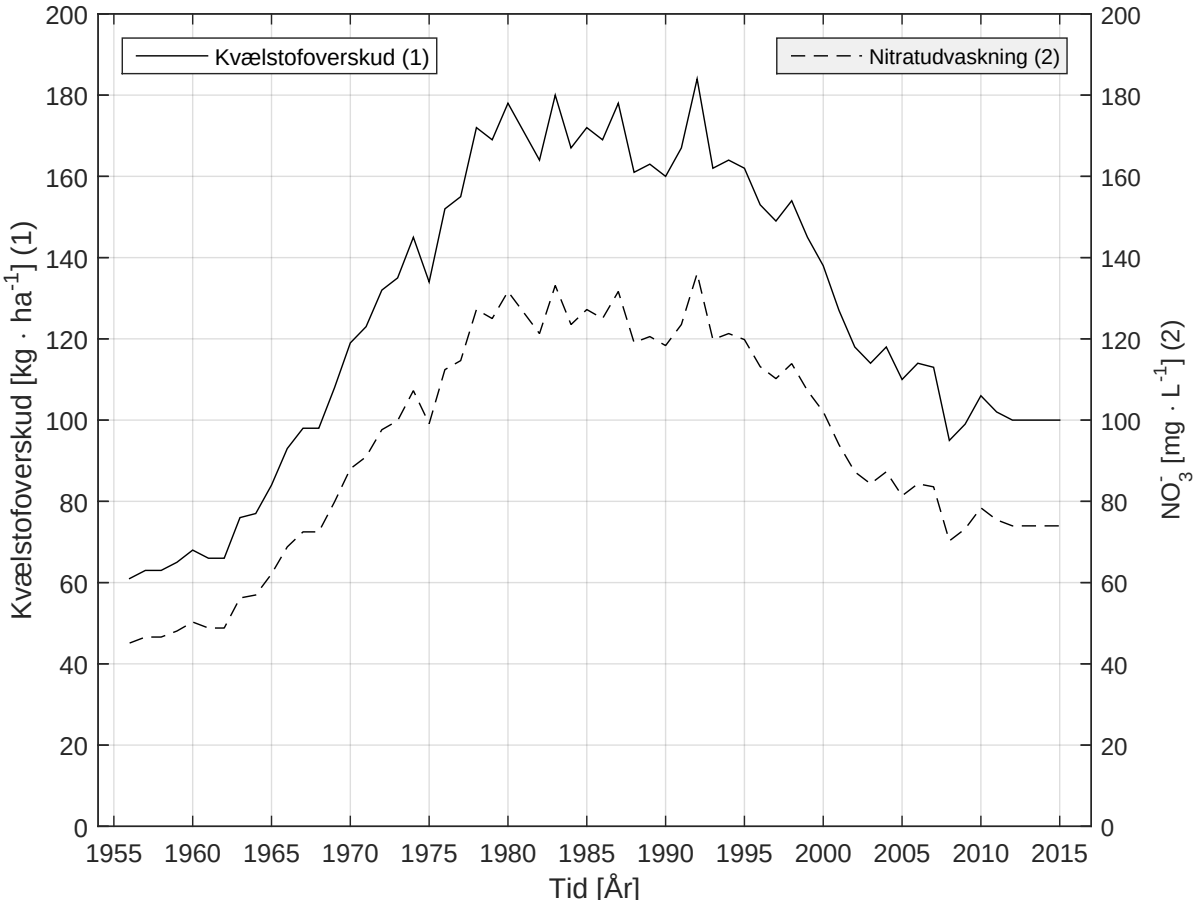
Figur B.10. Ortofoto af området ved Frejlev og Drastrup fra 1992 samt placering af helhedsplanområdet. [Det Kongelige Bibliotek, 2015a]#



Figur B.11. Ortofoto af området ved Frejlev og Drastrup fra 2011 samt placering af helhedsplanområdet. [Det Kongelige Bibliotek, 2015b]#

På baggrund af begge luftfotos kan det konkluderes, at ændringen fra landbrug til natur sker på et tidspunkt mellem 1992 og 2011. Jf. [Grønvald, 2015] startede grundvandsbeskyttende tiltag i området fra år 1997. Uden yderligere undersøgelse antagens år 2000 at udgøre et repræsentativt år for arealomlægningen fra landbrug til natur for indsatsområdet.

B.3.3 Omregning fra kvælstofoverskud til nitratudvaskning



Figur B.12. Figuren illustrerer det landsdækkende kvælstofoverskud fra år 1956 til år 2015 samt nitratudvaskningen for samme periode. Det landsdækkende kvælstofoverskud er baseret på [Kyllingsbæk, 2008] og [Vinther og Olsen, 2014].

Appendiks C

Partikeltracking

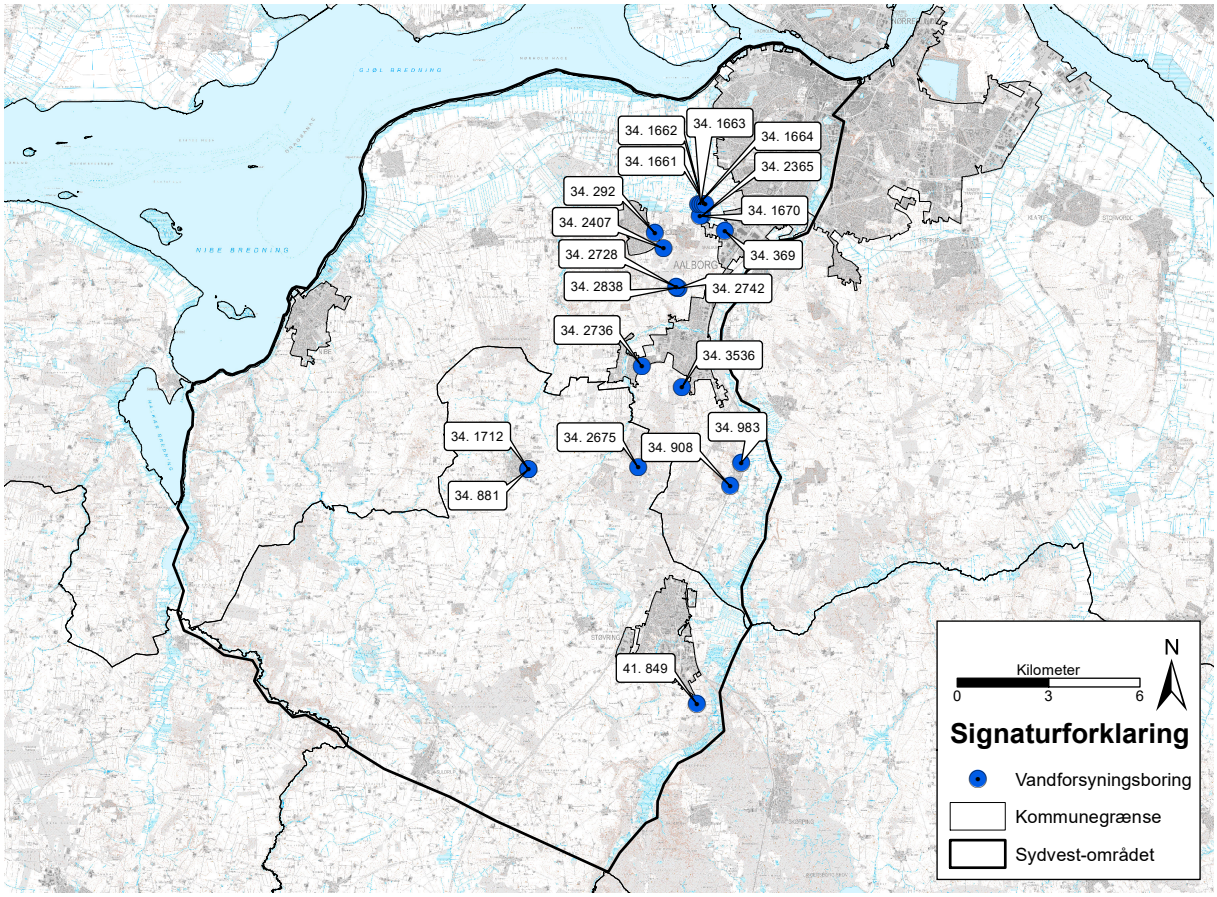
Følgende kapitel vil fungere som supplement til kapitel 7 på side 55

C.1 Undersøgelse af tilstrækkeligt partikelantal

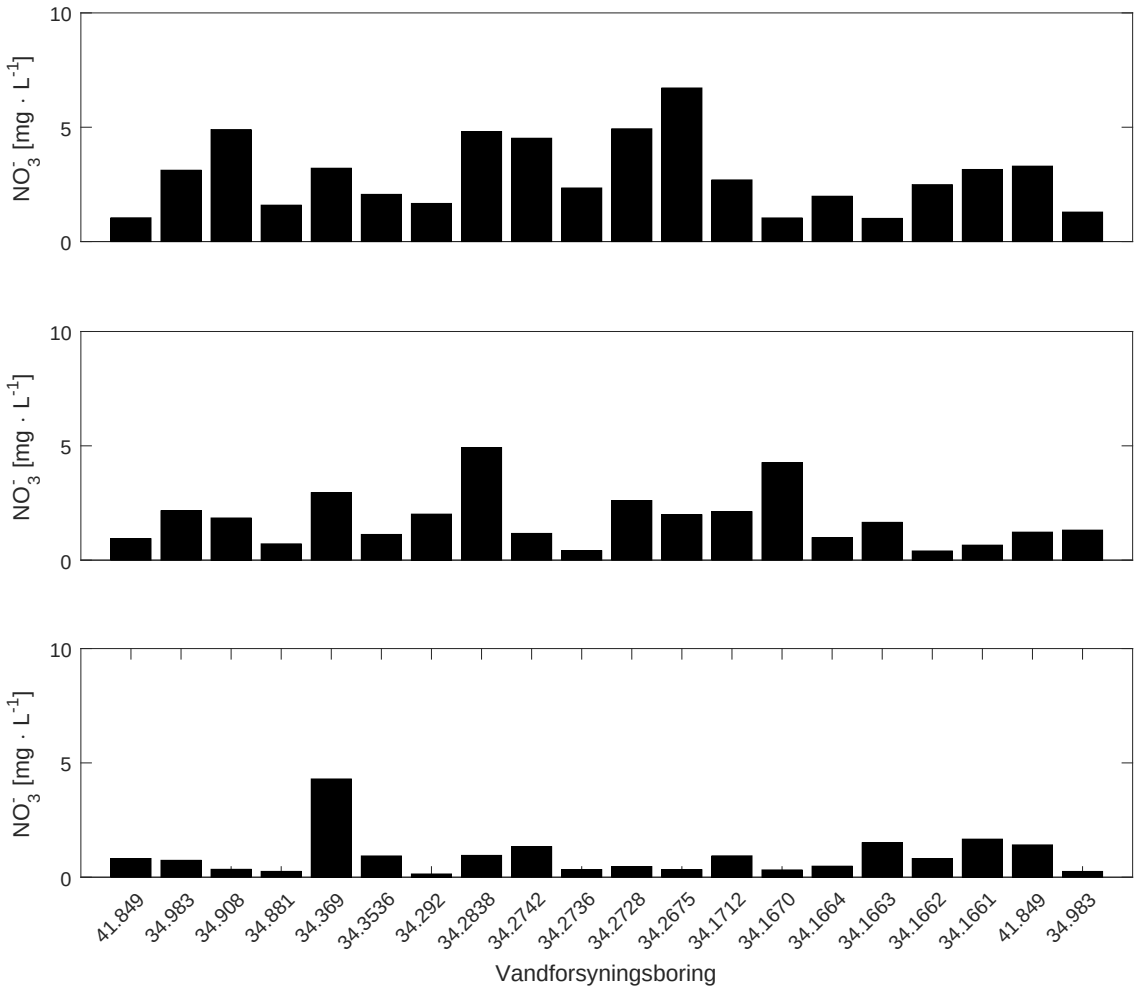
Det er essentielt at undersøge, hvorledes det grundvandsbidragende opland er afdækket af det antal partikler der indsættes pr. beregningscelle. Denne undersøgelse baseres på, hvordan koncentrationerne afviger på større skala for flere vandforsyningsboringer ved indsættelse af et forskelligt antal partikler pr. beregningscelle. Undersøgelsen baseres på RMSE-metoden, som tidligere er beskrevet i B.3.1 på side A14. De oplistede vandforsyningsboringer i tabel C.1 anvendes til RMSE undersøgelsen. Resultaterne for RMSE undersøgelsen for de 20 vandforsyningsboringer findes på figur C.2, mens placering er vist på figur C.1.

Tabel C.1. Liste med vandforsyningsboringer til strukturel analyse af partikeltracking. Alle vandforsyningsboringer er placeret i Sydvest-området.

	DGU nr.		DGU nr.		DGU nr.		DGU nr.		DGU nr.
1.	41.849	5.	34.369	9.	34.2742	13.	34.2407	17.	34.1664
2.	34.983	6.	34.3536	10.	34.2736	14.	34.2365	18.	34.1663
3.	34.908	7.	34.292	11.	34.2728	15.	34.1712	19.	34.1662
4.	34.881	8.	34.2838	12.	34.2675	16.	34.1670	20.	34.1661



Figur C.1. Placering af vandforsyningsboringer til undersøgelse af antal partikler pr. beregningscelle.



Figur C.2. RMSE for de 20 udvalgte vandforsyningsboringer med afvigelse ved indsættelse af hhv. 1, 2 og 5 partikler i forhold til referencen på 10 partikler pr. celle.

Af figur C.2 bemærkes det, hvorledes der forekommer en klar tendens i afvigelserne ved de 20 vandforsyningsboringer. Tendensen viser at 5 partikler pr. celle generelt viser mindre afvigelse fra referencen med 10 partikler pr. celle.

C.2 Single vs. Double

I programmet MATLAB® skelnes mellem to forskellige metoder til definering af precision for decimaltal. Alle parametre er standart for 64-bits versionen defineret som *double*. Da det er muligt at redefinere til *single*, svarende til 32-bit data, kan der altså spares intern hukommelse ved at gå på kompromis med nøjagtigheden af decimaltal. Særligt UZ-Modellen er relativ hukommelseskrævende, hvorfor det potentielt er tidsbesparende, at anvende singles. For at sikre, at der ikke sker en indvirkning på de endelige resultater, etableres en RMSE undersøgelse.
Det samlede Modelkompleks sættes op således alle parametre og inputs holdes uændrede på nær variabeldefinitionen af singles og doubles. Dette medfører at det er muligt, at undersøge indvirkning af simplificeringen på resultaterne, samtidigt med den tidsbesparende effekt kan dokumenteres. Simuleringstiden sættes til 40 år.

Der forekommer en afvigelse ved simplificering af parameter precision ved brug af singles kontra doubles i størrelsesordenen $1 \cdot 10^{-3} \mathrm{mg} \cdot \mathrm{L}^{-1}$, hvilket antages ubetydeligt i forhold til den samlede modelusikkerhed.

Afslutningsvis dokumenteres besparelsen for tidsmæssige CPU-beregningstid ved definering af singles-variable for føromtalte 40 års simuleringstid. Et overblik over resultaterne forefindes i tabel C.2.

		Double	**Single**
Tid	[s]	434	345
Besparelse	[%]	26	

Tabel C.2. Besparelse på CPU-beregningstid ved definering af parametre som singles i MATLAB® for en 40 års simuleringsperiode.

Det vælges, jf. tabel C.2, med fordel at anvende variable med single-precision i Modelkomplekset.

Appendiks D

Elektronisk bilag

Følgende elektroniske bilag findes på vedlagt CD med understående titler.

D.1 Dokumenter til litteraturlisten

D.2 Boreprofiler

D.3 Modelkompleks

D.4 Beregning af nitratudvaskning

D.5 Partikeltracking