

Bilag 9. Simulering af udvaskning med MACRO

GEUS: Peter van der Keur, Marlene Ullum

I projektet anvendes en hydrologisk stoftransportmodel (MACRO v.4.3) til beregning af pesticidtransport gennem den umættede zone ned til grundvandet. Modellen spiller en samlende rolle i projektet, idet den benytter de mange tilvejebragte data som modelinput til beregning af pesticidudvaskningen. Feltdata fra fuldprofil undersøgelserne med oplysninger om jordegenskaber og geokemi samt laboratoriemålinger af stofs specifikke egenskaber benyttes i modelopsætninger for geografisk spredte (sandede) jordprofiler.

For at forøge det statistiske grundlag med hensyn til sammenhængen mellem geografisk spredte lokaliteter med forskellige jordsammensætninger (tekstur) og simuleret udvaskning er datasættet udvidet til også at omfatte sandjordsprofilerne fra kvadratnets databasen (Madsen et al., 1996).

Flere spørgsmål skal besvares, herunder hvilke parametre der er vigtige for at kunne forudsige pesticidtransport gennem jordens øverste lag, påvirkningen på udvaskning forårsaget af parametrenes rumlige variation, samt betydningen af beliggenhed af grundvandspejlet og indflydelsen af klima, specielt nedbør. Et af værktøjerne til at besvare disse spørgsmål er modellen.

Oversigt over simuleringerne

Tabel 9.1 er en oversigt over udførte modelsimuleringer: deres formål, anvendte profiler og resultater. Dette bilag tager udgangspunkt i tabellen for en beskrivelse af de forskellige analyser, hvor modellering er anvendt. En nærmere beskrivelse af modelopsætning, analysemetode og resultater er givet efterfølgende. Simuleringsarbejdet har både skullet belyse hvilke modelparametre variationen i simuleret udvaskning er følsomme overfor, og hvilke jordtyper repræsenteret ved fuldprofiler og kvadratnetprofiler, der er potentielt sårbare for pesticidudvaskning.

Det store antal simuleringer der er nødvendig for den samlede analyse, sammenholdt med at den type model der er brugt (MACRO 4.3) kræver lang regnetid, har betydet, at der skulle findes en balance mellem regnetid og det antal simuleringer, der er nødvendig for at udføre analysen. Her er der hentet hjælp fra den internationale litteratur, hvor lignende projekter og modeller er beskrevet, se nedenfor.

Tabel 9.1. Oversigt over simuleringer

Sim	Formål	Prof.ID	Antal kørsler	Metode	Resultat
1 ^{a,b}	Identificering af vigtige modelparametre	Fuldprofiler	12 x 250 ¹	Følsomhedsanalyse vha. Latin Hypercube Sampling (Monte-Carlo) ²	sorption og nedbrydning er mest følsomme parametre ³
2 ^{a,b}	Kvantificering af aktuel udvaskning (ingen kalibrering ⁴)	Fuldprofiler	3 stoffer x 24 prof.	Deterministiske kørsler med målte/estimerede Data ⁵	MTB udvaskes ⁶ , MCPA, MTA og Glyphosat ikke
3 ^b	Som 2	Fuldprofiler	3 x 24	Som 2, men med fastholdt nedbrydning ⁷	som 2
4 ^{a,b}	Som 1	Kvadratnet profiler ⁸	175 x 100 ⁹	som 1	som 1
5 ^b	Identificering af sårbare jord for kK _r -kombinationer	Kvadratnet profiler	9 kombinationer x 175 prof.	9 forskellige kombinationer af nedbrydning og sorption simuleret for kvadratnettet	Geografisk placering af sårbare jord for diverse stoffer
6 ^b	Kvantificering af indflydelse af A-horisonten på udvaskning	Udvalgte fuldprofiler ¹⁰	10 profiler x 10 tykkelser	Metribuzin simulering med 10 forskellige model opsætninger for 10 A-horisont tykkelser	Identificering af FP med høj følsomhed for A-horisontens tykkelse.

a: Profil dybde er 10 m for at bevare muligheden for at inkludere modeldata fra dybereliggende lag.

b: Profil dybde er 2 m: Tillader finere model opsætning (diskretisering) og mere nøjagtige resultater. Dette tilgodeser, at de vigtigste processer sker i de øverste 2 m.

1: Oprindelig 24x250=6000 kørsler, men pga. tilgængelig regnekraftkapacitet reduceret til det halve.

2: Latin Hypercube Sampling (LHS), der er en effektiv Monte-Carlo metode anvendes (Helton & Davis, 2003).

3: Variationen i simuleret pesticidudvaskning er mest følsom overfor nedbrydning og sorption hhv. DT50 og K_r. Dette resultat bekræftes af lignende engelsk undersøgelse for sand (Dubus & Brown, 2002).

4: Ingen data for modelkalibrering er tilgængelig.

5: Hydrauliske data er estimeret fra tekstur data, stofs specifikke modelparametre fra laboriemålinger.

6: På grund af (meget) lav nedbrydning og sorption.

7: Stor usikkerhed på små k (nedbrydning) resulterer i usikre modelresultater. I stedet er der valgt en 80% fraktile laveste k ('worst case') værdi ud fra alle målte k værdier.

8: 175 profiler med sandet karakter: kvadratnet profiler udgør regulært net med indbyrdes afstand på 7 km.

9: Antal LHS (se 2) kørsler mindsket til 100 per profil for at reducere regnetiden.

10: Der er valgt fuldprofiler fra Yoldia, Hedeslette, Bakkeø og Weichsel sandområder. Indenfor disse områder er der valgt jordprofiler, der repræsenterer såvel lav som høj udvaskning.

Modelopsætning

Der er anvendt en hydrologisk stoftransportmodel MACRO4.3 (Jarvis et al., 2002) til 1) simulering af pesticidudvaskningen fra de 24 undersøgte profiler (fuld-profiler), hvor der er gennemført fuldt undersøgelsesprogram, 2) følsomhedsanalyser af udvaskning, samt 3) simulering af pesticidudvaskningen fra 175 kvadratnet profiler. Idet der skulle være mulighed for anvendelse af målte data i dybereliggende lag, er modellen i første omgang opsat til at repræsentere 10 m jordsøjle for 12 ud af de 24 fulde profiler. Følsomhedsanalysen mht. udvaskning fra jordprofilen er også baseret på 10 m jordsøjle. Under projektets forløb blev det efterhånden mere og mere klart, at det er de øverste 2 m i de undersøgte danske jordtyper, der spiller den største rolle mht. sorption og nedbrydning af pesticider. Dette er i overensstemmelse med, hvad der ellers findes for lignende jordtyper i litteraturen (f.eks. Dubus & Brown (2002), hvor indflydelsen af de dybere lag dog ikke er velbeskrevet). Modelopsætningen blev herefter ændret til kun

at repræsentere de øverste 2 m af jordsøjlen. MACRO4.3 modellen er udviklet til profildybder af denne størrelsesorden, og 2 m simuleringer er derfor mere nøjagtige.

Klimadata til alle profilsimuleringerne er fra Tylstrup stationen og målt på daglig basis. Tylstrup er valgt, dels pga. at den repræsenterer et dansk gennemsnitsklima, dels er der lange pålidelige tidsserier tilgængelige som er kvalitetssikrede i forbindelse med Varslingssystemet for udvaskning af Pesticider (Kjær et al., 2003). En periode fra 1. januar 1990 til 30. juni 2001 er valgt til simuleringerne. Den akkumulerede nedbør over hele perioden er 9843 mm. For at kunne vurdere indflydelsen af klima, primært nedbør, på udvaskningen af pesticider er relevante simuleringer også udført med klima målt i Estrup, som repræsenterer et klima med højere nedbør (11831 mm) for samme periode.

Til vurdering af indflydelsen af beliggenheden af grundvandspejlet er valgt en nedre randbetingungelse for alle simulerede jordprofiler, der tillader et fastholdt trykniveau, dvs. en konstant dybde til grundvandet. Dette niveau kan ændres til at kunne repræsentere forskellige dybder.

For hver af de 4 pesticider, som undersøges i projektet, er konstrueret et scenarie, hvor et karakteristisk sædskifte (egnet til undersøgelsen) kombineres med en realistisk pesticid anvendelse. For hver af de undersøgte profiler gennemføres to serier af simuleringer pr. stof: én simulering med udbringning (sprøjtning med pesticid) på lige år, og én simulering med udbringning på ulige år. Herved forskydes sædskiftet et år mellem simuleringerne og det sikres, at alle de 12 års klimavariationer (især nedbørsvariationer over tid) bliver taget i betragtning. Imidlertid resulterede kun simulering af metribuzin (og i meget mindre grad MCPA) i en udvaskning i en størrelsesorden som kunne anvendes i efterfølgende analyser.

Følsomhedsanalyser (simulering 1 i tabel 9.1). Det undersøges, hvordan pesticidudvaskningen fra fuldprofilerne er bestemt af input-parametrene til modellen. Herefter klassificeres parametrenes betydning for udvaskningen.

Den rumlige variabilitet indenfor landskabselementerne undersøges gennem gentagne simuleringer (max. 250 såkaldte Monte-Carlo type simuleringer) for hver mark på grundlag af de undersøgte profiler. Dette sker ved, at de eksperimentelt målte variationer af input-parametrene anvendes i modellens kørsler. Input-parametrene grupperer sig især som hydrauliske-, sorptions- eller nedbrydningsparametre. Outputvariablenes variation (så som variationen i udvaskning) og følsomhed med hensyn til ændringer af deres værdi kvantificeres herefter i forhold til modellens input-parametre. På baggrund af det store antal simuleringer vurderes det, hvilke kombinationer af input-parametre, der giver den største pesticidudvaskning. Herefter følger dels en rangordning af input-parametrene efter deres betydning for simuleret udvaskning, dels parametrenes relative bidrag til variationen i udvaskningen.

Fuldprofil simuleringer (simulering 2 og 3 i tabel 9.1). Formålet med deterministiske kørsler for hvert enkelt fuldprofil er dels at belyse hvilke jordprofiler, der relativt udvasker mere for et bestemt stof og sædskifte, dels at korrelere simuleret udvaskning til 'simple' jordegenskaber til zoneringsformål (beskrevet nærmere i hovedteksten). Til dette er de faktisk målte gennemsnits parameterværdier i profilerne anvendt direkte som input, uden at der er knyttet målte variationer til værdierne. Der er foretaget kørsler for alle 24 fuldprofiler med udbringning af pesticiderne MTB, MTA og MCPA som beskrevet ovenfor. Profilerne er i modellen opsat som 2 meter dybe med grundvandet defineret i 3 eller 5 meter under jordoverfladen.

Variationer i de meget usikkert bestemte – især små - DT50 (k) værdier forårsager store variationer i simuleret udvaskning fra profilerne. For at undgå at denne usikkerhed overskygger og umuliggør en undersøgelse af betydningen af hydraulikkens og sorptionens effekt på udvaskning i profilerne, udførtes også simuleringer med fuldprofiler, hvor DT50 værdien for alle profi-

ler blev fastholdt på 80% fraktilen (FOCUS, 2000) af de målte DT50 (k) værdier. De nye fastholdte nedbrydnings værdier benyttes i de 2 øvre horisonter i profilerne. Valget af 80% fraktilen betyder, at de nye kørsler repræsenterer en "worst-case" med hensyn til DT50 (k), og samlet set er den simulerede udvaskning større ved disse kørsler end ved kørslerne med de målte DT50 (k) værdier.

Kvadratnet profil simuleringer (simulering 4 i tabel 9.1). For at forøge det statistiske grundlag for sammenhængen mellem geografisk spredte lokaliteter med forskellige jordsammensætninger (tekstur) og simuleret udvaskning (simulering 1 ovenfor) er datasættet udvidet til også at omfatte kvadratnet profilerne (i sandjorde). MACRO modellen er opsat til 175 kvadratnet profiler, hvor simuleringerne svarer til fuldprofil simuleringerne beskrevet under simulering 1.

Da sorptionen (K_f) ikke er målt for kvadratnet profilerne, benyttes værdier beregnet ved hjælp af korrelationsmodeller ud fra simple jordegenskaber som tekstur og pH (se kapitel 4.3 i hovedteksten), idet disse er kendte i profilerne. Udover K_f er de hydrauliske parametre heller ikke direkte målt for kvadratnet profilerne. Disse parameterværdier optimeres derimod til modelformålet ved hjælp af neurale netværk (se kapitel 4.4 i hovedtekst). DT50 (k) værdierne sættes også i dette tilfælde til 80% fraktilen af de målte DT50 (k) værdier for fuldprofilerne. For kvadratnet profilerne gælder således, at der ikke benyttes direkte målte parametre i simuleringerne.

I første omgang er kvadratnet profilerne opsat til 10 meters dybde, idet det oprindeligt var tænkt at benytte kvadratnet-data i de øvre lag og Jupiter-data i de dybere lag (dvs. under rodzonen). For at gøre fuldprofil og kvadratnet profil simuleringerne direkte sammenlignelige er kvadratnet profilerne senere blevet omdiskretiseret, dvs. de har fået tildelt en anden numerisk inddeling af jordprofilen, således at de også er blevet 2 meter dybde, med grundvandsspejlet fastholdt i 5 meters dybde. Der er foretaget kørsler for alle 175 profiler med udbringning af pesticiderne MTB, MTA og MCPA som beskrevet ovenfor.

For at undersøge og kvantificere betydningen af beliggenheden af grundvandsspejlet for udvaskningen, er der tillige lavet simuleringer med kvadratnet profilerne, hvor den nedre randbetjelse, grundvandsspejlets dybde, varieres.

Simuleringer med forskellige kombinationer af DT50(k) og K_f (simulering 5 i tabel 9.1). Formålet med disse simuleringer er at identificere, hvilke profiler der er sårbare mht. de hydrauliske egenskaber. Dette undersøges ved at anvende forskellige kombinationer af DT50 (k) og K_f på de 175 kvadratnet profiler og analysere, om sårbarheds-rangordninger af profilerne er ens for alle kombinationerne, eller om hydraulisk relaterede egenskaber (der er det eneste som varierer imellem profilerne) påvirker udvaskningen forskelligt alt afhængig af kombinationen af DT50 (k) og K_f .

Intervallerne for DT50 (k) og K_f værdierne er bestemt således, at der i simuleringerne forventes at være en udvaskning, der både er forskellig og af en sådan størrelse, at der opnås en simuleret udvaskning ikke lig nul. Der er udført en mindre pilot simulering for at finde de rette intervaller, der sikrer en vis udvaskning. Intervallerne er for DT50 (k): $0-10^{-2} [d^{-1}]$ og for K_f : $0-5 [cm^3 g^{-1}]$. 9 forskellige kombinationer af DT50 (k) og K_f i A- og B-horisonten er kørt på alle de 175 kvadratnet profiler (tabel 9.2).

Tabel 9.2. Input værdier for de 9 kombinationer af DT50(k) og K_f

k K_f -kombination	k (øvre)	k (nedre)	K_f (øvre)	K_f (nedre)
	[d-1]	[d-1]	[cm ³ g ⁻¹]	[cm ³ g ⁻¹]
1	1.10 ⁻³	0	5	1
2	1.10 ⁻³	1.10 ⁻³	5	0
3	1.10 ⁻³	0	5	0
4	1.10 ⁻²	0	1	1
5	1.10 ⁻²	1.10 ⁻³	1	0
6	1.10 ⁻²	0	1	0
7	1.10 ⁻³	0	1	1
8	1.10 ⁻³	1.10 ⁻³	1	0
9	1.10 ⁻³	0	1	0

De ni kombinationer af DT50 (k) og K_f kan ikke betragtes som (reelle) stoffer, idet der ikke er nogen sammenhæng mellem DT50 (k) og K_f og de simple jordegenskaber for de 175 profiler, som det er tilfældet for fx. MTB (se kapitel 4.4 i hovedteksten). Det vil med andre ord sige, at de 9 forskellige kombinationer repræsenterer 9 stoffer på ét profil og 9 andre stoffer på et andet profil.

Gennem de mange kørsler (1800) undersøges det også, om det er muligt at finde en sammenhæng mellem simuleret udvaskning og de to parametre DT50 (k) og K_f . Der forventes en sammenhæng da resultaterne fra Monte-Carlo type simuleringerne (se Resultater af modelleringen, herunder) har vist, at netop K_f og DT50 (k) har den største betydning for udvaskningen.

For at undersøge og kvantificere klimaets betydning for udvaskningen, er der tillige lavet simuleringer med kvadratnet profilerne, hvor den øvre randbetingelse, klimaforholdene, varieres.

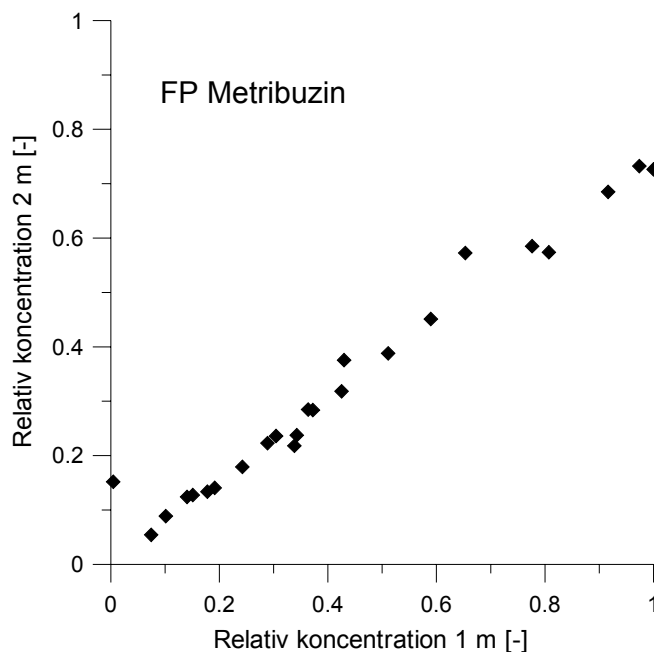
Kvantificering af A-horisontens tykkelses indflydelse på stof udvaskningen (simulering 6 i tabel 9.1). Processer af relevans for nedbrydningen og sorption af et pesticid er sædvanligvis særlig udpræget i den øverste del af et jordprofil (A-horisonten). Derfor er tykkelsen af A-horisonten vigtig i zoneringsammenhæng. For at kvantificere betydningen af A-horisontens tykkelse på udvaskningen fra en 2 meter dyb profil, er tykkelsen i modellen varieret for 10 udvalgte fuldprofiler, der repræsenterer forskellige landskabselementtyper. I valg af profiler er der taget hensyn til, om en profil med den målte A-horisont har lav eller høj udvaskning for standard opsætningen. I tabel 9.3 er angivet profil nummeret, landskabselementtypen, den målte A-horisont tykkelse og den maksimale tykkelse af A-horisonten, der bliver varieret i modellen. At den maksimale tykkelse ikke er ens har ikke betydning for tolkningen af analysen, idet der her fokuseres på de øverste 70 cm for alle profiler.

Tabel 9.3. Tykkelse af A-horisont og max tykkelse for de 10 udvalgte fuldprofiler

Profilnummer	Landskabelement	A-horisont Målt tykkelse [cm]	A-horisont Max tykkelse [cm]
1	Yoldia	30	65
2	Yoldia	30	70
4	Hedeslette	30	100
5	Hedeslette	30	60
9	Hedeslette	30	100
13	Bakkeø	30	100
14	Bakkeø	30	70
19	Weichsel	30	60
20	Weichsel	30	60
24	Weichsel	30	100

Resultater af modelleringen

I det følgende er der gjort rede for de vigtigste modelresultater. Modellerne i projektet er ikke kalibreret, da der ikke forefindes faktiske udvaskningsobservationer at kalibrere mod. Derfor er alle resultater relative, og udvaskningsresultaterne præsenteres som normaliserede værdier. Det er ligeledes valgt at beregne koncentrationen i 2 m dybde ud fra den totale mængde udvasket stof og perkoleret vand der forlader det 2 m dybe profil. Denne koncentration i 2 m er lineær proportional med koncentrationen i 1 m (og vises for Metribuzin for 24 fuldprofiler i figur 9.1) der sædvanligvis anvendes i godkendelsesproceduren, og derfor kan koncentrationen i 2 m anvendes i de følgende analyser af simuleringresultater.



Figur 9.1. Simuleret relativ koncentration i 1 og 2 m dybde for 24 fuldprofiler og Metribuzin.

Resultater fra følsomhedsanalyse af modelparametre mht. total udvaskning (simulering 1 i tabel 9.1). De mest betydende parametre for udvaskningen fra de forskellige profiler er beregnet på grundlag af det store antal modelkørsler (Monte-Carlo-type kørsler) som beskrevet ovenfor.

Resultaterne for MTA og MCPA-modelkørslerne er dog ikke inkluderet i følsomhedsanalysen, idet de af modellen beregnede udvaskningstal er for små til analysen.

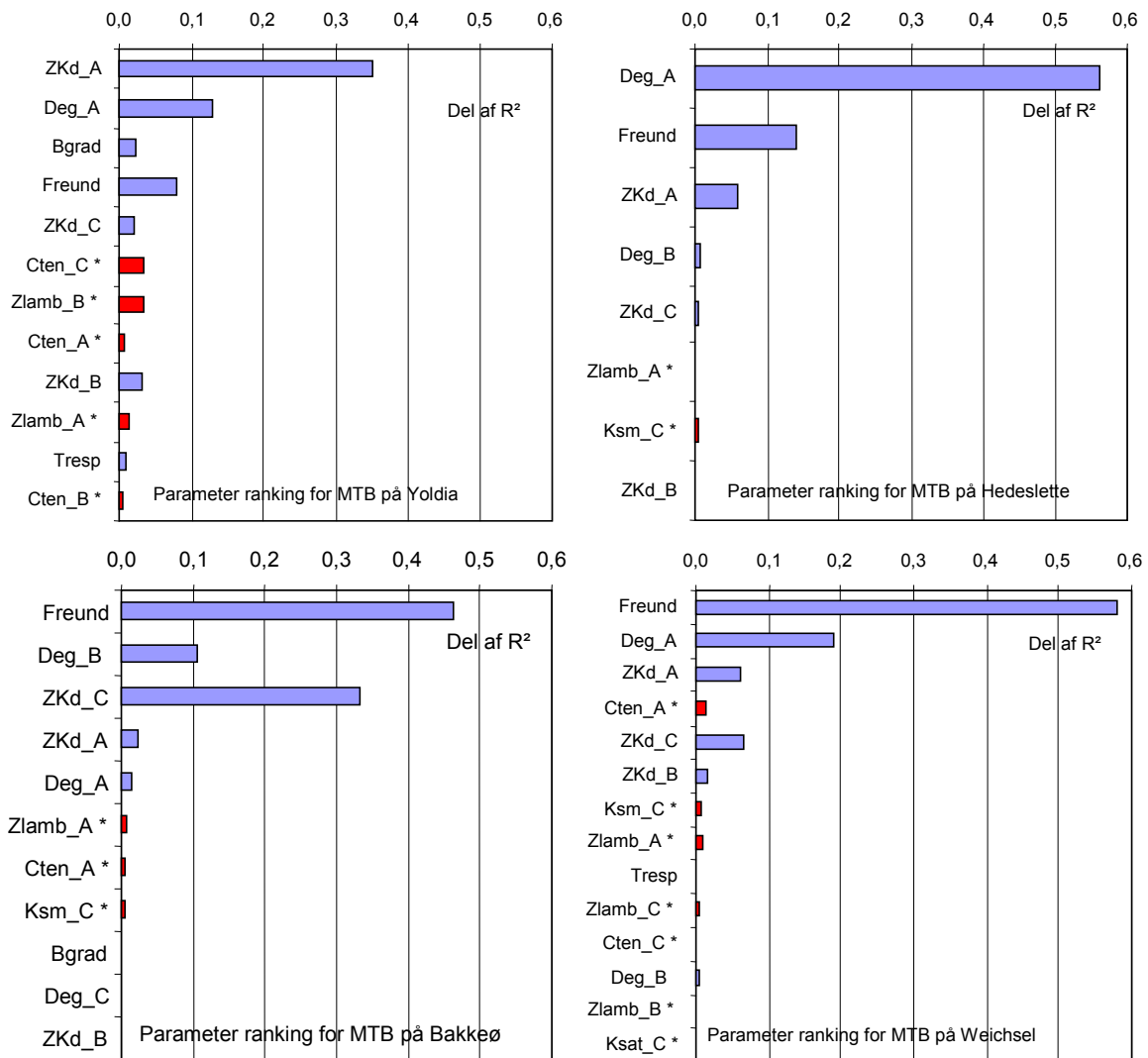
Modelparametrene, der er varieret gennem Monte-Carlo type kørslerne, er korrelerede til modelresultaterne for den totale udvaskning (gennem 12 år og som følge af 6 udbringninger) ved hjælp af en statistisk metode: rank transformeret og standardiseret regression (SRRRC). Dette er gjort for at mindske de meget ulineære sammenhænge (som følge af ulineære vand- og stoftransport processer repræsenteret i MACRO modellen), der er mellem input-parametre og output-variablen (udvaskningen) og for at nå frem til en lineær regression. Regressionen mellem input-parametre og den totale udvaskning bruges til at rangordne input-parametrene efter deres betydning for udvaskningen. Rangordningen bestemmes ud fra hvor godt den fundne regression passer for hver enkelt input-parameter.

Simuleringerne viser, at den simulerede udvaskning for Metribuzin (MTB) fra hele profilet er mest følsom overfor de stofs specifikke input-parametre, dvs. sorptions- og nedbrydningsegenskaber i form af parametrene Freund (Freundlich exponent i isotermen), Deg (nedbrydningskoefficient, beregnet fra DT50) og ZKd (sorption). Dette bekræftes også af en engelsk undersøgelse (Dubus & Brown, 2002) for lignende jordtyper. På figur 9.2 er rangordningen af de mest betydende parametre for MTB-udvaskningen vist i søjlediagrammer for 4 landskabselementtyper.

Den totale udvaskning for MCPA er betydelig mindre end for MTB og ofte så lille, at den ligger udenfor modellens præcision. Derfor er der valgt en anden type følsomhedsanalyse for dette stof. I stedet for at lave regression mellem input-parametre og total udvaskning er der lavet en regression mellem input-parametre og procent pesticid, der forsvinder længere ned i profilet end A-horisonten. Efterfølgende er der lavet en følsomhedsanalyse og rangordning af input-parametrene for den procentvise mængde forsvundet pesticid. Til beregning af procent forsvundet pesticid, benyttes forholdet mellem udvaskningen fra A-horisonten (dvs. den mængde pesticid der tilstrømmer B-horisonten) og udvaskningen fra de forskellige dybere lag. Dette vil sige, at der beregnes dimensionsløse forholdstal, der knytter sig til forskellige dybdeintervaller (fx procent pesticid der er forsvundet fra 30 cm og ned til 1 meter). Resultaterne viser, at MCPAs udvaskning mellem 0.3 - 1 m's dybde er styret af sorption og nedbrydning i B-horisonten. De hydrauliske egenskaber spiller en mindre men dog signifikant rolle for den procent pesticid, der forsvinder i de dybereliggende lag.

Metoden er ligeledes benyttet for MTB. De mest betydende parametre for procent forsvundet MTB i dybdeintervallet mellem 30 cm og 1 m dybde er som for MCPA nedbrydning og sorption i B-horisonten. Også her spiller de hydrauliske egenskaber en mindre men dog signifikant rolle for den procent pesticid, der forsvinder i de dybereliggende lag. Generelt ses det, at den procent MCPA der forsvinder i dybereliggende lag er langt større end for MTB. Med andre ord forsvinder størstedelen af det MCPA der udvaskes fra A-horisonten, når det kommer ned i de dybereliggende lag.

Udfaldsrummet for den simulerede totale udvaskning for MTB fra Monte-Carlo kørslerne er undersøgt i en Kruskal-Wallis ikke parametriske test for ikke normalfordelte data med ulige populationsstørrelser. Denne viser, at output fordelingerne for den totale udvaskning, de forskellige landskabselementtyper imellem, ikke er signifikant forskellige ($P < 0.001$). Det vil sige, at der ikke er en signifikant forskel mellem de forskellige landskabselementtypers udvaskning og derfor ikke mulighed for at zonere alene på baggrund af landskabselementtyper.



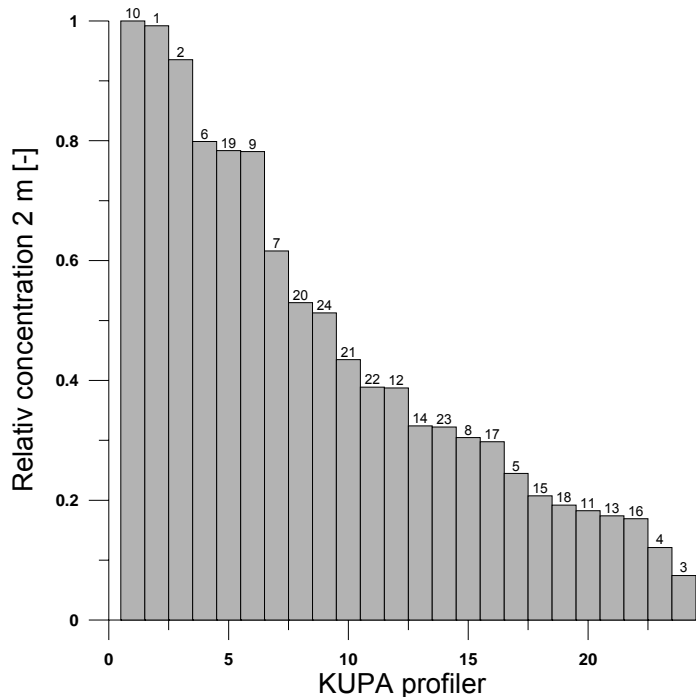
Figur 9.2. Rangordning af de mest betydende parametre for MTB udvaskning på landskabselementtyper. De angivne parametre har alle en signifikant betydning for variationen i den simulerede udvaskning fra det totale profil. Parametre markeret med * er hydraulisk relaterede parametre. Søjlerne angiver hvor stor en del af variationen i udvaskning den pågældende parameter forklarer

Resultater fra fuldprofil simuleringer (simulering 2 og 3 i tabel 9.1). De første kørsler for hvert enkelt fuldprofil, hvor der benyttes de faktisk målte DT50 (k) værdier, giver en stor variation i simuleret udvaskning. Dette var som forventet primært forårsaget af store variationer i de målte k værdier, som for MTBs vedkommende er meget lave, og derfor usikkert bestemt.

I fuldprofil simuleringer benyttes også en 80% fraktile af de målte DT50 (k) værdier, og simuleringerne repræsenterer således "worst-case" med hensyn til nedbrydningen. Der simuleredes ingen udvaskning af stofferne MCPA og MTA, hvorfor disse ikke er præsenteret i nedenstående resultatafsnit.

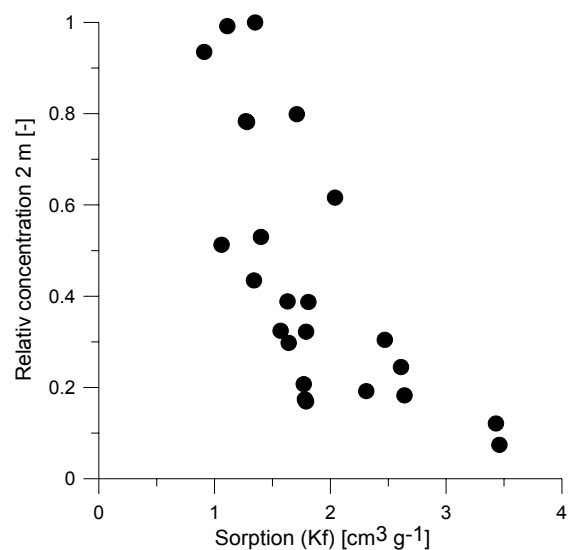
De 24 profilers simulerede udvaskning er i figur 9.3 blevet normaliseret og rangordnet med faldende MTB koncentration i 2 meters dybde beregnet som den totale mængde stof [mg] udvasket over den simulerede periode fra 1990 til 2001 divideret med den totale mængde

perkoleret vand [m^3]. På figuren er det muligt at se, hvilke af fuldprofilerne der er mere sårbare end andre og derved undersøge, hvad der adskiller disse mere sårbare profiler fra de øvrige profiler. I de fleste tilfælde skyldes forskellen de stofs specifikke parametre, det vil sige en lavere sorption og en mindre nedbrydning af stofferne. Da både sorption og nedbrydning afhænger af simple jordegenskaber kan forskellene genfindes i disse.



Figur 9.3. Rangordning af de 24 fuldprofilers simulerede relative koncentration af MTB i to meters dybde. Til simuleringerne er for nedbrydningsparametre benyttet 80% fraktilen af de målte DT50 (k) værdier. Grundvandsspejlet er i 5 meters dybde.

Den målte sorption K_f er plottet mod den relative koncentration af udvasket MTB i 2 meters dybde (figur 9.4). Der er en stor spredning på den målte sorption de forskellige profiler imellem, men typisk viser plottet en tendens, der indikerer, at jo lavere sorption, jo højere udvaskning, hvilket også er at forvente.



Figur 9.4. MTBs relative koncentration i 2 meters dybde som funktion af MTBs sorption i A-horisonten.

Forsvinding af MTB gennem de forskellige horisonter er beregnet, således at det er muligt at se, hvor meget stof der enten binder eller nedbrydes i hver af de tre horisonter A, B eller C. Dette er gjort ved at beregne forskellen mellem, hvad der strømmer ind i hver horisont, og hvad der strømmer ud. Resultaterne viser som forventet, at det meste MTB fjernes i A-horisonten. Der forsvinder stort set en faktor 10 mere stof i A-horisonten end i B og C horisonterne.

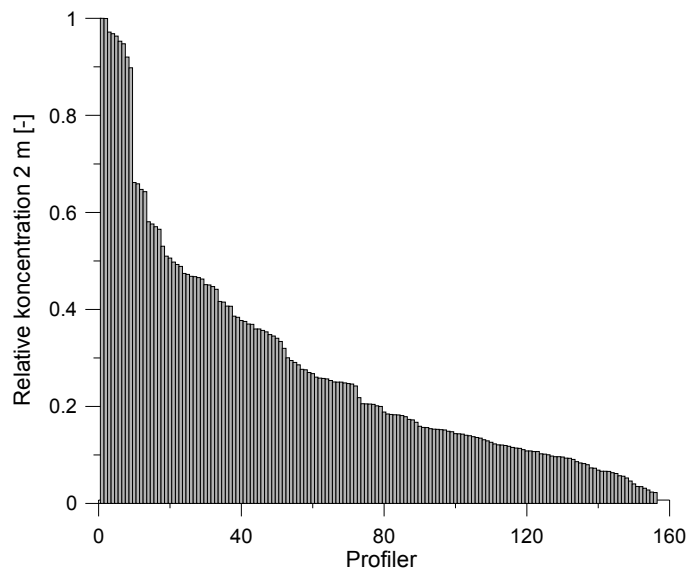
Resultater fra kvadratnet profil simuleringer (simulering 4 i tabel 9.1). Kvadratnet simuleringerne er gennemført for at få et større antal profiler at arbejde med, af statistiske grunde. Resultaterne for MTA og MCPA-modelkørslerne er dog ikke inkluderet i følsomhedsanalysen, idet de af modellen beregnede udvaskningstal er for små.

Simuleringerne viser, som for simulering 1 ovenfor, at den simulerede udvaskning for MTB fra hele profilet er mest følsom overfor de stofs specifikke input-parametre, dvs. sorptions- og nedbrydningsegenskaber i form af parametrene Freund (Freundlich exponent i isotermeren), Deg (nedbrydningskoefficient, beregnet fra DT50) og ZKd (sorption).

Det er testet om resultatet af de to typer simuleringer, kvadratnet og fuldprofil simuleringer, tilhører den samme fordeling. Dette er gjort med en Mann-Whitney Rank Sum Test. Testen viser, at der ingen signifikant forskel er på resultaterne fra de to typer simuleringer, hvilket betyder, at fuldprofil simuleringerne er repræsentative for kvadratnet profilerne med hensyn til simuleret stofkoncentration i 1 meters dybde.

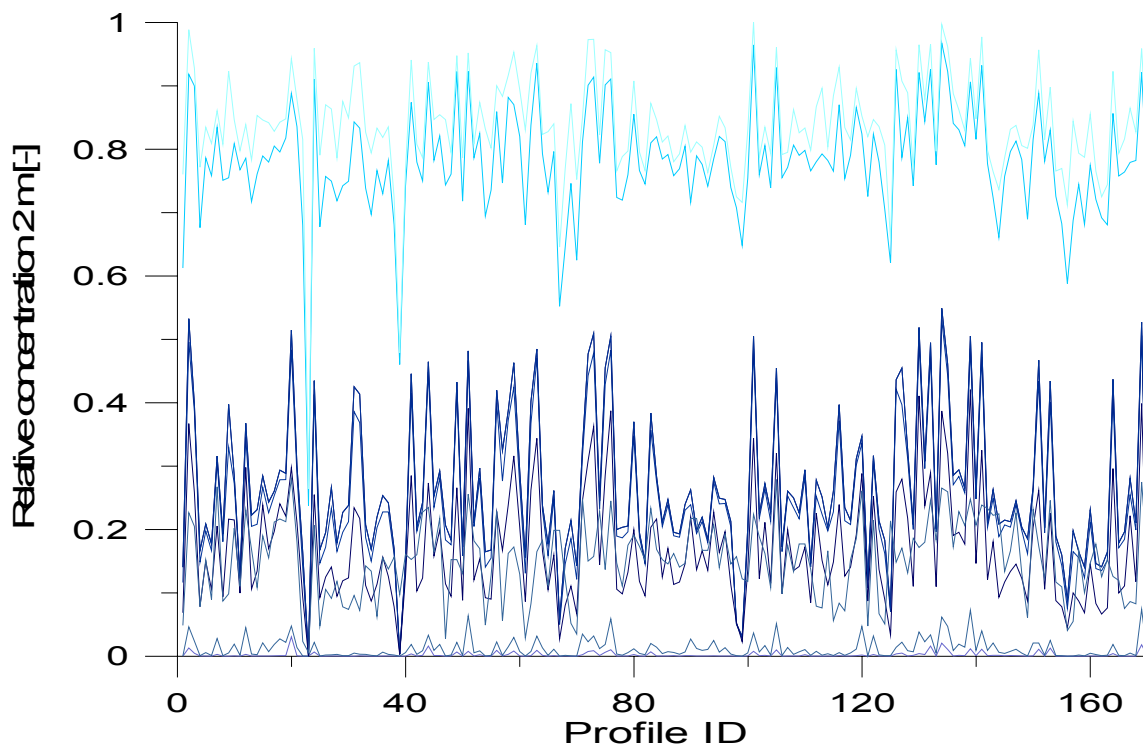
For at kunne sammenligne de her opnåede resultater med de tilsvarende for fuldprofilerne, viser Figur 9.5 rangordningen af kvadratnet profiler efter simuleret pesticid koncentration i 2 m dybde. I simuleringerne er anvendt en nedre randbetingelse, hvor grundvandspejlet er beliggende i 3 eller 5 m dybde. Rangordningen af profiler, som vist i figur 9.5, er ikke påvirket af denne forskel i randbetingelse, hvilket vil sige, at grundvandets beliggenhed indenfor det testede interval ingen indflydelse har på simuleret udvaskning for de benyttede profiler.

Figur 9.5. *Relativ koncentration af MTB i 2 meters dybde rangordnet efter udvaskning.*



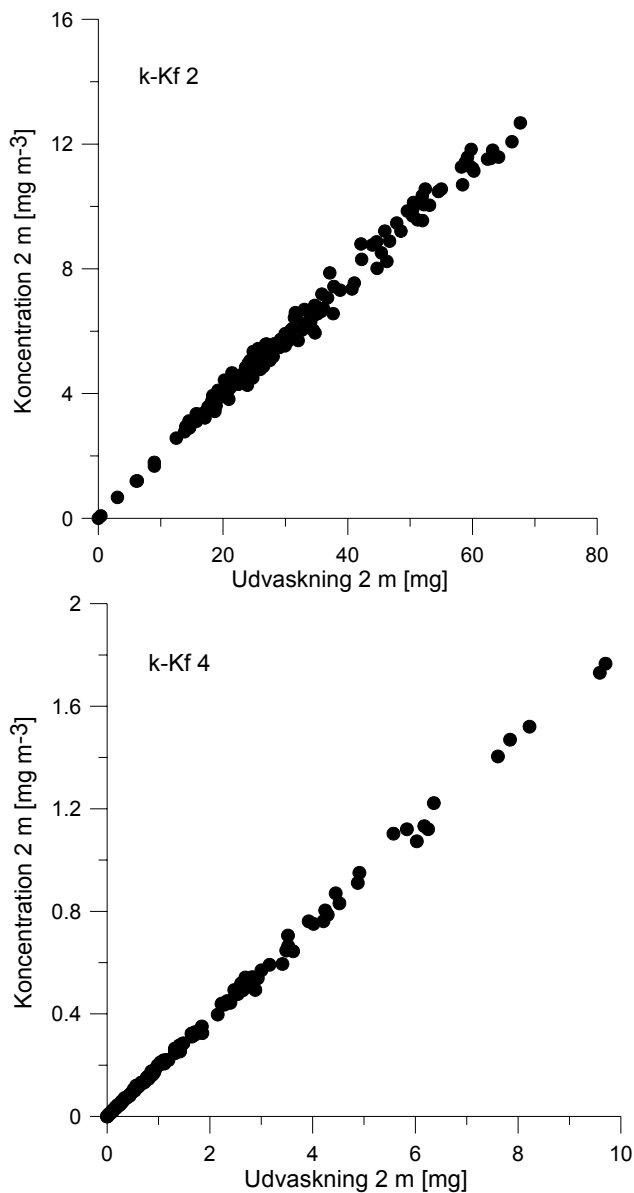
Resultater fra simuleringer med k - K_f kombinationer (simulering 5 i tabel 9.1). Der er simuleret 9 forskellige kombinationer af værdier for sorption (K_f) og nedbrydning (k) som er vist i tabel 9.2. Output variable af interesse er total akkumuleret udvaskning fra de simulerede kvadratnet profiler, samt stofkoncentrationen i vandet der forlader profilen i 2 m's dybde. Akkumuleret udvaskning er beregnet som den totale mængde stof [mg] udvasket over den simulerede periode fra 1990 til 2001 divideret med den totale mængde perkoleret vand [m^3], hvilket resulterer i en koncentration [$mg\ m^{-3}$]. Der anvendes Tylstrup klima. For en vurdering af klimaets betydning for de simulerede resultater anvendes også Estrup klima som øvre randbetingelse.

I figur 9.6 vises, at de 9 forskellige kK_f -kombinationer resulterer i en udvaskning, hvis absolutte niveau afhænger af den valgte kK_f -kombination, og hvor det kan ses, at høje og lave værdier for hvert niveau følger de samme profiler. Det vil sige, at for hver kK_f -kombination identificeres de samme mindre eller mere sårbare jordprofiler afhængig af forskelle i hydrauliske egenskaber.



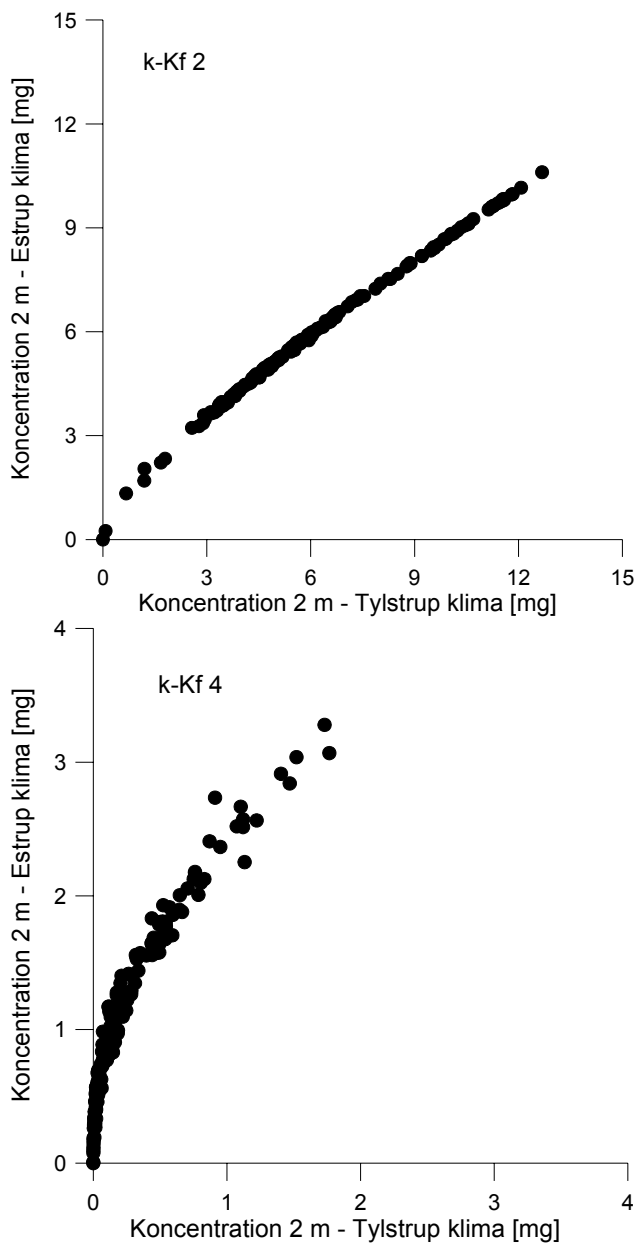
Figur 9.6. Relativ koncentration i 2 m for 9 kK_f -kombinationer. Værdierne er normaliserede i forhold til den højeste udvaskning for kK_f -kombination nr. 9.

Som repræsentative eksempler bruges kK_f -kombination nr. 2 og 4 til at illustrere modelresultaterne. I nedenstående figur 9.7 ses som forventet, at en stigende akkumuleret udvaskning medfører en øget koncentration i 2 m. Dog er det klart, at både stofmængden og koncentrationen kan variere med en størrelsesorden mellem forskellige kombinationer. Kombination nr. 2 i figur 9.7 har således en udvaskning der er ca. 10 gange højere end kombination nr. 4. Det samme gælder koncentrationen. Lignende grafer kan stilles op for de andre kK_f -kombinationer.

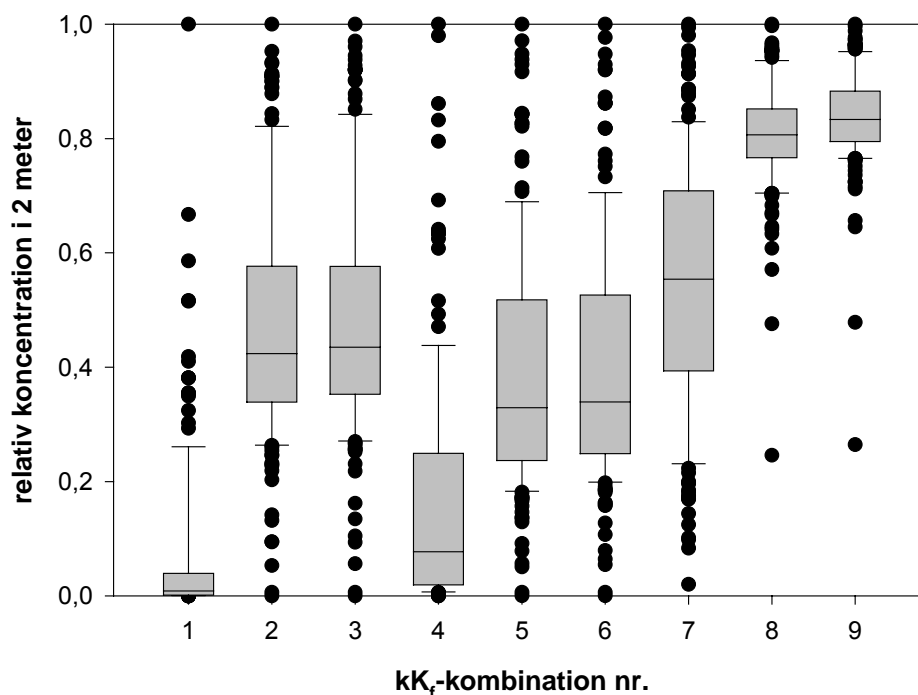


Figur 9.7. Udvaskning og koncentration i 2 m for kK_f -kombination nr. 2 og 4.

Figur 9.8 viser hvordan forskellige klimatyper har indflydelse på både total akkumuleret mængde stof og koncentrationen. Generelt er resultatet for kombination nr. 2 og 8 af de 9 kombinationer som forventet: ved en øget mængde nedbør (Estrup 11831 mm mod Tylstrup 9843 mm for hele perioden) udvaskes der mere mængdemæssigt, hvorimod koncentrationen falder pga. fortyndingen af stoffet i den større mængde perkoleret vand. For kombination 4 observeres en modsat tendens: både udvasket mængde og koncentrationen i 2 m stiger ved den højere nedbør.



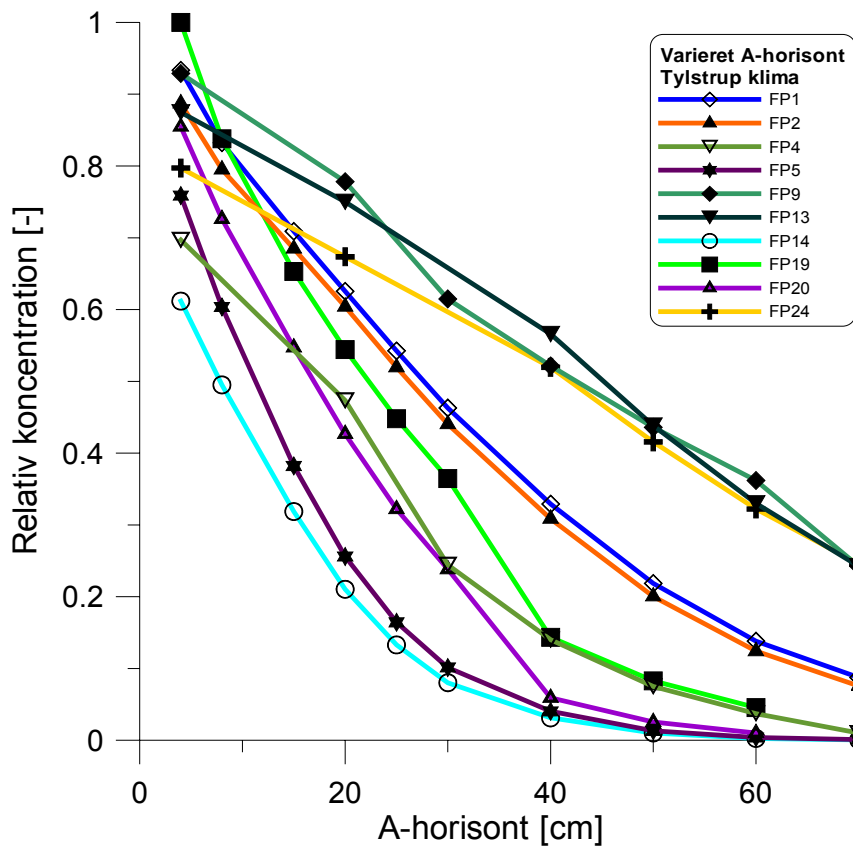
Figur 9.8. Koncentration i 2m for kK_f -kombination nr. 2 og 4 for 2 klimatyper.



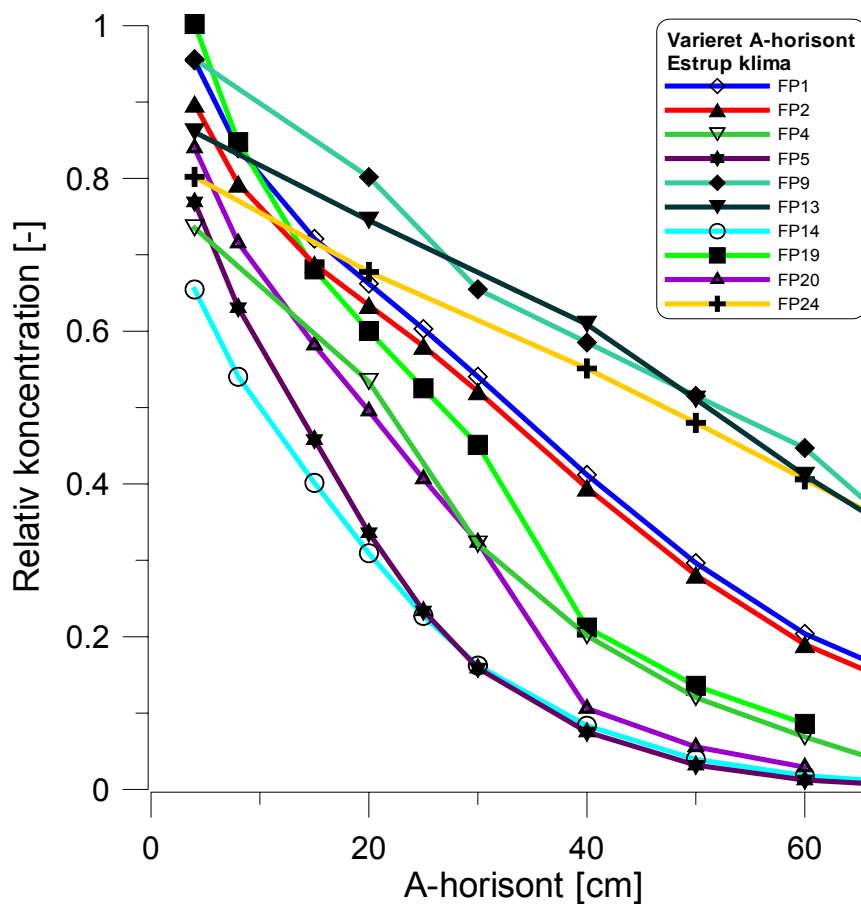
Figur 9.9. Den relative koncentration i 2 meter af de ni kK_f -kombinationer for 170 profiler fra kvadratnettet. Box plots viser median værdien, 25-75% interval (grå boks), 10-90% interval (linier) og outliers udenfor 10-90% interval.

Figur 9.9 viser et box plot med de relative koncentrationer af de ni kK_f -kombinationer. Figuren indikerer, at med de valgte værdier for DT50 (k) og K_f (tabel 9.2) er det ændringer i sorptionen, der har størst betydning for den simulerede udvaskning. Kombination nr. 1, 2 og 3 kan sammenlignes indbyrdes. Kombination nr. 1 har højere K_f i underjord end 2 og 3, mens 2 har højere nedbrydning i underjord end 1 og 3. Sammenlignes de relative koncentrationer ses det at kombination nr. 1 har den laveste udvaskning i forhold til 2 og 3. Det samme billede er gældende for hhv. 4, 5, 6 og 7, 8, 9 som også er indbyrdes sammenlignelige.

Indflydelse af A-horisont tykkelsen for udvalgte fulde profiler (simulering 6 i tabel 9.1). Nedenstående figurer 9.10 og 9.11 viser, hvordan den relative koncentration i 2 m dybde afhænger af A-horisontens tykkelse. Det ses, at jo tykkere en A-horisont des lavere relativ koncentration. Stejle kurveforløb for typiske værdier af A-horisontens tykkelse (20-40 cm) indikerer større følsomhed. Nærmere inspektion af Figur 9.9 og 9.10 viser, at følsomheden ikke er synlig afhængig af klimatypen.



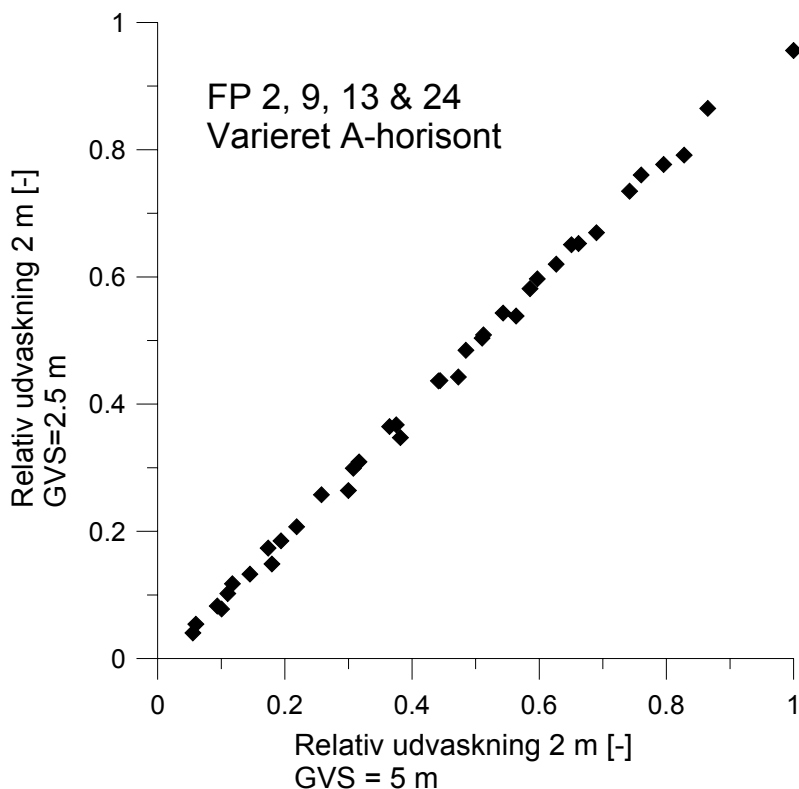
Figur 9.10. Relativ koncentration som funktion af A-horisontens tykkelse for 10 fuldprofiler simuleret med Tylstrup klima.



Figur 9.11. Relativ koncentration som funktion af A-horisontens tykkelse for 10 fuldprofiler simuleret med Estrup klima.

Indflydelse af nedre randbetingelse på udvaskning

Dybden til grundvandet er valgt som nedre randbetingelse, idet det i zoneringsammenhæng er relevant at vurdere indflydelse af denne randbetingelse på simuleret udvaskning for de undersøgte jordprofiler. De fleste simuleringer er kørt med en dybde til grundvandet på 5 m, 3m og 2.5 m og det er fundet at denne nedre randbetingelse for disse sandede jordprofiler ikke har en indflydelse af betydning på modelresultater hvilket illustreres i figur 9.12, hvor simuleringer med varierende A-horisont tykkelser er analyseret for en dybde til grundvandet på 5 og 2.5 m, dvs. hhv. 3 og 0.5 m under de 2 m dybe fuldprofil. Her benyttes jordprofil nummer 2, 9, 13 og 14 som eksempler.



Figur 9.12. Relativ udvaskning i 2 m for fuldprofil 2, 9, 13 og 24 med varierende A-horisont tykkelse og 2 forskellige nedre randbetingelser.

Referencer

Dubus I.G. & Brown C.D. (2002). Sensitivity and first-step uncertainty analyses for the preferential flow model MACRO. *Journal of Environmental Quality*, 31:227-240.

FOCUS (2000). FOCUS groundwater scenarios in the EU pesticide registration process. Report of the FOCUS Groundwater Scenarios Working Group, EC document.

Helton, J.C. & Davis, F.J. (2003). Latin Hypercube Sampling and the propagation of uncertainty in analyses of complex systems. *Reliability Engineering & System Safety* 81: 23-69

Jarvis, N. (2002). The MACRO Model (Version 4.3). Technical Description. Available at: <http://www.mv.slu.se/bgf/Macrohtm/info.htm>

Kjær, J., M. Ullum, P. Olsen, P. Sjelborg, A. Helweg, B. Mogensen, F. Plauborg, R. Grant, I.S. Fomsgaard, and W. Brusch. 2003. The Danish Pesticide Leaching Assessment Programme: Monitoring results May 1999 – June 2002. Third report. Geological Survey of Denmark and Greenland, ISBN 87-7871-115-0. Available at <http://www.pesticidvarsling.dk>.

Madsen, H.B. and Jensen, N.H. (1996) Soil map of Denmark according to the revised FAO legend 1990. *Dan. Jour. of Geogr.* (96), pp. 51-59.