Koncept for Udpegning af Pesticidfølsomme Arealer, KUPA

# Særligt pesticidfølsomme sandområder: Forudsætninger og metoder for zonering



Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelse
Miljøministeriet
Danmarks JordbrugsForskning
Ministeriet for Fødevarer, Landbrug og Fiskeri



*Redaktion*: Erik Nygaard *Omslag*: Kristian Rasmussen *Forsidefotos*: Vibeke Ernstsen *Oplag*: 100 *Udgivelsesår*: 2004

ISBN 87-7871-143-8

© Miljøministeriet

Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelse, GEUS Øster Voldgade 10, DK-1350 København K Telefon: 38 14 20 00 Telefax: 38 14 20 50 E-post: geus@geus.dk Internet: www.geus.dk Koncept for Udpegning af Pesticidfølsomme Arealer, KUPA

Særligt pesticidfølsomme sandområder: Forudsætninger og metoder for zonering



Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelse Miljøministeriet Danmarks JordbrugsForskning Ministeriet for Fødevarer, Landbrug og Fiskeri



# Indholdsfortegnelse

	Side
Forord	3
Konklusion	7
1. Indledning	9
1.1. Kategorier af følsomhed	10
1.2. Projektafgrænsning	10
1.3. Processer i jorden med betydning for udvaskning	12
1.4. Sprogbrug	14
2. Dataindsamling	15
2.1. Modelstoffer	17
2.2. Stofgrupper	18
2.3. Laboratorieanalyser.	19
3. Fremgangsmåde ved fortolkning af data	21
3.1 Sammenlignende undersøgelser	21
3.2 Rammer for simuleringer	21
3.3. Simulering at pesticidudvaskning	23
3.4. Korrelationsanalyser	26
4. Resultater	29
4.1 Repræsentativitet	29
4.2 Variabilitet	33
4.3. Kendle sammennænge mellem jordegenskaber	42
4.4. Valuels optiolusilu	43 50
4.5. Diffuling Florible III stoffernes opholdstid	56
4.7 Følsomhed for randhetingelser	60
4.8. Gruppering af pesticider	64
4.9 Kriterier for identifikation af særlig pesticidfølsomhed	69
5. Diskussion	77
5.1. Grundlag for zonering.	77
5.2. Strategi for zonering	83
5.3. Usikkerhed	91
5.4. Verifikation	91
6. Referencer	93

# Bilag

1. Geologi og pedologi	1
2. Kornstørrelsesfordeling og organisk stof	19
3A. Variabilitet, geostatistik og mikrobiologi	25
3B Variabilitet baseret på humus, silt og ler	45
4. Geokemi og teksturparametre	73
5. Hydrauliske parametre	89
6. Nedbrydning af pesticid	95
7. Sammenhænge i simple jordegenskaber	97
8. Omregning af Kd til Kf	115
<ol><li>Simulering af udvaskning med MACRO</li></ol>	121
10. Korrelationsmetoder og resultater	139
11. Stofgruppering	171
<ol><li>Kd afhængighed af pH for modelstoffer</li></ol>	175
13. Udspænding af mineraliering og nedbrydning for modelstoffer	179
14. Verifikation	181
<ol><li>Eksempel på beslutningsstøttesystem</li></ol>	209
16. Referee bemærkninger.	221

# Forord

I forbindelse med gennemførelsen af Vandmiljøplan II og Drikkevandsudvalgets betænkning fra 1997 fik amterne ved L 56 26/6 1998 om ændring af lov om vandforsyning m.v., samt lov om miljøbeskyttelse og lov om planlægning, til opgave at udpege de områder, som er særligt følsomme for bestemte typer af forurening samt at prioritere den indsats, der skal gennemføres i disse områder for at beskytte vandressourcen. Dette skal ske på baggrund af en detailkortlægning, som amterne skal gennemføre.

I Drikkevandsudvalgets betænkning blev det vurderet, at der ikke forelå et tilstrækkeligt videngrundlag til at gennemføre en sådan kortlægning af følsomheden overfor udvaskning af pesticid, og at arbejdet med at udarbejde en vejledning om kortlægningen baseret på faglige, geologiske kriterier skulle gives høj prioritet.

På denne baggrund søgte og fik Miljø- og Energiministeriet, 22. februar 2000, Finansudvalgets tilslutning til at disponere midler i årene 2000-2003 til at etablere det nødvendige videngrundlag vedrørende risikoen for udvaskning af pesticider på sandede jorde og muligheden for at zonere på dette grundlag, samt til at afklare om det metodisk vil være muligt at etablere et analogt videngrundlag og kortlægningsmulighed for lerjorde. Opgaven med at etablere dette videngrundlag blev givet til Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelse (GEUS) og Danmarks JordbrugsForskning (DJF) i fællesskab. Den praktiske løsning af opgaven er gennemført af en projektgruppe og en række undergrupper (delprojekter) ved de deltagende institutioner og under en styregruppe med både eksterne og interne medlemmer. Professor Kim Esbensen, Ålborg Universitet, har været tilknyttet som konsulent vedrørende data analyse og bearbejdning, og som referee på resultaterne. Professor Jens Christian Refsgaard, GEUS, har været referee på rapporten, med udgangspunkt i den første version (bilag 16).

Resultaterne vedrørende afklaringen af, at der foreligger et fagligt grundlag for at zonere sandede områder, forelægges hermed for opdragsgiverne, sammen med en teknisk redegørelse for den nærmere faglige baggrund, samt dokumentation og en beskrivelse af en mulig praktisk fremgangsmåde.

Rapporten er udarbejdet med baggrund og udgangspunkt i et omfattende prøveindsamlings- og analysearbejde, som er udført af et stort antal medarbejdere, forfattere såvel som øvrige bidragydere, på institutionerne. Arbejdet er tilrettelagt af Projektgruppen og de overordnede retningslinjer udstukket af Styregruppen.

Opgaven er således gennemført med udgangspunkt i et omfattende nyetableret datasæt, beregnet til at kunne afklare betydningen af de forskellige processer i jorden. Hele datagrundlaget er vurderet, og der er gennem en iterativ process blevet fokuseret på netop de data, der bidrager til den løsning, som har vist sig mulig. Nogle datatyper, som fx. mikrobiologiske data, har derfor ikke kunnet indgå direkte som støtte til konklusionen, men indgår i forståelsen af problemkomplekset og vil kunne indgå i en videre stofspecifik karakterisering af arealerne.

Styregruppe	Institution	Bemærkning
Alex Sonnenborg	GEUS	I sidste del af projektforløbet
Bo Lindhardt	GEUS	I første del af projektforløbet
Christian Ammitsøe	MST	
Erik Nygaard	GEUS	I sidste del af projektforløbet
Harald Mikkelsen	DJF	I første del af projektforløbet
Heidi Christensen Barlebo	GEUS	I første del af projektforløbet
Jens Bastrup	DANVA	
Jesper Waagepetersen	DJF	
Jørgen Jakobsen	DJF	
Lærke Thorling	Amtsrådsforeningen	
Per Rosenberg	GEUS	I sidste del af projektforløbet
Peter Gravesen	GEUS	
Poul Henning Petersen	Dansk	
	Landbrugsrådgivning,	
	Landscentret	

Forfattere	Har især bidraget vedrørende	Institution
Arne Heiweg		DJF
Bjarne S. Hansen	Grundvandsdybde, Repræsentativitet	DJF
Bo Vangsø Iversen	Integration	DJF
Carsten S. Jacobsen	Projektgruppe og Pesticidspecifikke parametre	GEUS
Christen D. Børgesen	Modellering	DJF
Erik Nygaard	Projektgruppe og Redaktion	GEUS
Finn Pilgaard Vinther	Mikrobiologi	DJF
Henrik Vosgerau	Projektgruppe, Angrebsvinkel og Redaktion	GEUS
Ingelise Møller	Repræsentativitet	GEUS
Jens Aamand	Gruppering af pesticider	GEUS
Jim Rasmussen	Korrelation, Stofklasser, Integration og	GEUS
	Redaktion	
Klavs M. Linde	Litteraturstudie	DJF
Lars Elsgaard	Mikrobiologi	DJF
Maria P. Hag	Modellering	GEUS
Marlene Ullum	Modellering	GEUS
Mogens H. Greve	Integration, Repræsentativitet, Geostatistik	DJF
Ole H. Jacobsen	Projektgruppe og Modellering	DJF
Ole S. Jacobsen	Verifikation	GEUS
Per Rosenberg	Korrelation og Integration	GEUS
Pernille Christensen	Litteratur	DJF
Peter Roll Jakobsen	Feltgeologi	GEUS
Peter van der Keur	Modellering og Integration	GEUS
René K. Juhler	Korrelation og Pesticidspecifikke parametre	GEUS
Stig.T. Rasmussen	Feltarbejde	DJF
Svend Elsnab Olesen	Projektgruppe og Repræsentativitet	DJF
Søren B. Torp	Feltpedologi	DJF
Vibeke Ernstsen	Projektgruppe, Repræsentativitet og Geokemi	GEUS
Ulla C. Brinch	Projektgruppe, Repræsentativitet og Pesticidspecifikke parametre	GEUS

Øvrige medarbejdere	Har især medvirket vedrørende	Institution
Ann Dorrit Steffensen	Laboratorieanalyser	GEUS
Anne Britze	Ressourcestyring	GEUS
Carsten Guvad	Laboratorieanalyser	GEUS
Christina R. Jensen	Feltarbejde og Laboratorieanalyser	GEUS
Ditte Kiel-Düring	Laboratorieanalyser	GEUS
Gitte Hastrup	Laboratorieanalyser	DJF
Heidi C. Barlebo	Koordination og Angrebsvinkel	GEUS
Henrik Nørgaard	Feltarbejde	DJF
Holger Nehmdal	Geofysik	DJF
Hubert de Jonge	Hydraulisk ledningsevne	DJF
Klaus Refslund	Feltarbejde	DJF
Lasse Gudmundsen	Feltarbejde	GEUS
Lisbeth Løvig Nielsen	Laboratorieanalyser	GEUS
Marga Jørgensen	Laboratorieanalyser	GEUS
Marianne Schou	Laboratorieanalyser	GEUS
Martin Hansen	Database	GEUS
Michael Koppelgaard	Hydraulisk ledningsevnemålinger	DJF
Per Jensen	Logging	GEUS
Per Nyegaard	Database	GEUS
Pernille Stockmarr	Laboratorieanalyser	GEUS
Pia Bach Jakobsen	Laboratorieanalyser	GEUS
Rikke W. Riis	Laboratorieanalyser	GEUS
Rune Johnsen	Internet	GEUS
Spire Maja Kiersgaard	Laboratorieanalyser	GEUS
Szymon Kopalski	Laboratorieanalyser	GEUS
Søren Nielsen	Feltarbejde	GEUS
Trine Henriksen	Laboratoriemetodik	GEUS

# Konklusion

Det er muligt at udpege særligt pesticidfølsomme sandjordsarealer mht. udvaskeligheden af pesticider på basis af arealets hydrauliske egenskaber og dets evne til at binde pesticider, idet:

- 1. der er sammenhæng mellem simuleret udvaskning af pesticider og en række almindelige jordegenskaber, som kan kortlægges.
- 2. pesticider generelt (med enkelte undtagelser) udgør én gruppe, hvis udvaskning har samme overordnede afhængighed af jordegenskaber, således at de hovedsagelig vil udvaskes indenfor de samme områder og kortlægningen kan tage udgangspunkt i en fælles karakteristik.

Det er grundlæggende de samme hydrauliske og bindingsmæssige forhold i jorden, som bestemmer de fleste pesticiders udvaskelighed indenfor forskellige sandjorde. Det er derfor for de fleste pesticider overvejende de samme arealer, der er særligt følsomme med henblik på pesticidbelastning af grundvandet (baseret på resultater for de 34 undersøgte pesticider). Der vil dog være en lille gruppe pesticider der har helt andre bindingsmæssige egenskaber, og som derfor skal vurderes separat ud fra deres individuelle egenskaber. Størrelsen af simuleret udvaskning er derimod meget forskellig fra pesticid til pesticid. Derfor bygger resultaterne på relative følsomheder overfor simuleret udvaskelighed, som således kan anvendes til identifikation af særligt pesticidfølsomme sandjordsarealer. Områder der ligger udenfor disse særligt følsomme arealer anses, - afhængig af de valgte kriterier for særlig følsomhed - , at være beskyttet gennem godkendelsespraksis og afprøvning på Varslingssystemet for Pesticider.

Ved den udviklede fremgangsmåde til identifikation af særligt pesticidfølsomme arealer er det således sandjordenes følsomhed der karakteriseres. Godkendelsesprocedurerne og varslingssystemet retter sig derimod mod det enkelte pesticid og dets særlige egenskaber på arealer der er repræsentative for hovedparten af de danske jorde.

Undersøgelserne er her baseret på simulering af såvel konkrete pesticider med konkrete egenskaber som på andre realistiske kombinationer af pesticidegenskaber, for et bredt udsnit af danske sandjorde med standardbetingelser for klima og landbrugsmæssige driftsforhold.

Det foreslås at lade identifikation af særligt pesticidfølsomme arealer tage udgangspunkt i de egenskaber der bestemmer hvor længe pesticiderne opholder sig i den øverste meter af jorden, idet det overvejende er her, der kan foregå nedbrydning og binding af pesticid. Opholdstiden i de øverste jordlag er derfor afgørende for, i hvilken grad en nedbrydningsproces vil kunne forløbe.

Opholdstiden karakteriseres her ved jordens hydrauliske egenskaber og evne til at binde pesticider, som kun forandres langsomt. Særligt følsomme arealer, som er udpeget på dette grundlag, er derfor gyldige i en lang årrække. Det er således valgt at se bort fra, at effekten af nedbrydning varierer geografisk og gennem tiden som følge af aktuel landbrugspraksis.

De fleste pesticider nedbrydes helt eller delvist, således at risikoen indenfor de områder, som er klassificerede på grundlag af opholdstid, vil kunne mindskes, hvis man vælger at zonere for specifikke pesticider og medtage nedbrydningen. Herved kan størrelsen af arealet med særlig følsomhed overfor udvaskning af et givet pesticid reduceres.

Vurdering på basis af opholdstid kan baseres på data, som i betydelig grad findes i databaser, suppleret med nyindsamling. Inddragelse af effekten af nedbrydning kræver at der indsamles nye data i betydeligt omfang (fx. mikrobiologiske data og stofspecifikke

data). Zoneringsprocessen kan således faseopdeles, og projektet har desuden tilvejebragt de værktøjer kan tages i anvendelsen ved en detaljeret indsats.

Zonering vil kunne foregå ved at punktvise udvaskningsberegninger (profiler), på grundlag af afskæringsværdier/kriterier, udbredes til at dække arealer. Det sæt af kriterier som her bruges til at klassificere profiler/arealer efter følsomhed er:

- 3. "Særligt pesticidfølsomme profiler/arealer" har mindre end 17 kg/m<sup>2</sup> humus og samtidigt mindre end 130 kg/m<sup>2</sup> silt + ler vægtet over den øverste meter af jorden.
- 4. For profiler/arealer som "ikke er særligt følsomme" gælder at summen af ler og silt skal være større end en konstant på 350 minus 10 gange humusindholdet.
- 5. Profiler/arealer hvis sammensætning ligger i intervallet mellem de to øvrige kaldes her "potentielt følsomme", idet de udgør en pulje, hvoraf nogle profiler/arealer er følsomme i mellemgrad mens andre vil falde i gruppen "ikke særligt følsomme" ved en uddybende karakteristik.

Afskæringsværdierne for jordegenskaberne humus, og ler og silt er fremkommet ved et valgt (relativt og simuleret) udvaskningskriterie på >0,65 for "særligt følsomme" arealer, hvilket i forhold til profildatabasen svarer til at knapt 10 % af arealerne er særligt følsomme. Udvaskningskriteriet for den lave kategori af "ikke særligt følsomme" arealer er analogt <0,43, svarende til følsomheden af det mest følsomme profil i Varslingssystemet. Resultaterne viser herudover at alternative procedurer til karakterisering af følsomheden vil være mulige. Dette kan fx. bestå i et enkelt afskæringskriterie, på en glidende skala, som inddeler arealerne i en særligt følsom og en ikke særligt følsom kategori. Fastlæggelsen af beskyttelsesstrategien vil i praksis skulle fastsættes politisk, administrativ og økonomisk.

Resultaterne peger på at dybden til grundvandet, hvis det ikke ligger indenfor de øverste par meter, er af mindre betydning for udvaskningens størrelse, idet binding og nedbrydning er forholdsvis beskeden i de større dybder. Effekten af en tyk umættet zone i sandjord, under den øverste meter, er imidlertid, som absolut hovedregel, enten positiv eller neutral, hvorfor en tyk umættet zone med hensigtsmæssige egenskaber i grænsetilfælde vil kunne flytte et areal ned i en mindre pesticidfølsom kategori.

Som en del af undersøgelserne er det vist at de valgte sandjorde og jordtyper er repræsentative for de dominerende forhold i danske sandjordsområder. Denne repræsentativitet indbefatter studier af variabiliteten i forskellige skalaer fra prøve til landskabs niveau og vurderinger af de anvendte metoder. Ved en praktisk zonering med udgangspunkt i resultaterne vil der i kortlægningen skulle tages stilling til at tilpasse afskæringsværdier og -kriterier for kategorierne af følsomhed, så der tages højde for variabilitetsfeltet.

Der er gennemført en verifikation af de samlede resultater, idet de uafhængige oplysninger fra projektets testmarker og sandjordsmarkerne i Varslingssystemet for Pesticider er sammenlignet med den følsomhed, som metoden angiver. Den forudsagte rangfølge af relativ simuleret udvaskning er derefter blevet bekræftet med konkrete udvaskningsdata fra de to uafhængige kilder.

Kortlægning af særligt pesticidfølsomme arealer efter den fremgangsmåde, som foreslås her, kan gennemføres på baggrund af almengyldige kriterier og udvalgte jordegenskaber, som i høj grad vil kunne fremskaffes fra eksisterende kort, databaser eller ved simple undersøgelser.

Et eksempel viser, på et forenklet datagrundlag, en praktisk måde hvorpå en følsomhedskarakteristik af et område teknisk kan gennemføres, primært som en konservativ vurdering på grundlag af eksisterende data.

# 1. Indledning

Sandprojektet er etableret m.h.p. at afklare om det er muligt at udvikle en metode til kortlægning (zonering) af arealer indenfor sandjordsområder som er særligt pesticidfølsomme. I Varslingssystemet for Pesticider vurderes pesticiders udvaskning på 6 typeområder, hvoraf 2 er sandiordsområder. Resultater fra varslingssystemet anvendes til at vurdere udvaskningen af pesticider ved regelret anvendelse. Varslingssystemet tager naturligvis ikke højde for alle geologiske forhold eller utilsigtet anvendelse af pesticider. I dette projekt udarbejdes således en metode til identifikation af arealer som ud fra geologiske kriterier er særligt følsomme overfor udvaskning af pesticider. Begrebet "særligt følsomme arealer" defineres i denne sammenhæng som arealer der er mere følsomme overfor pesticidudvaskning end typiske sandjorde som fastlagt i varslinggssystemet, idet de ikke er dækket af resultaterne af Varslingssystemet for Pesticider (VAP). En afgørende problemstilling, for om det vil være muligt at foretage en sådan zonering, er hvorvidt pesticider kan opdeles i grupper, med udvaskeligheder der har tilnærmelsesvis samme afhængighed af jordens iboende egenskaber, eller om hvert enkelt pesticid må behandles individuelt. Sidstnævnte mulighed ville i praksis medføre en særdeles omfattende og kompleks kortlægning og i praksis gøre det umuligt at gennemføre en identifikation af de særligt pesticifølsomme områder.

I denne rapport undersøges derfor udvaskeligheden og grupperingsmuligheden af forskellige pesticider på basis af de stofspecifikke parametre, som bruges i modelsimuleringer af udvaskning. Videre undersøges det om disse stofspecifikke modelparametre kan knyttes til almindelige jordegenskaber, figur 1.



*Figur 1.* Undersøgelsens delelementer og overordnede sammenhænge. Hydrauliske (Hyd), bindings- (Bind) og nedbrydningsparametre (Nedbry).

Værdier for hydrauliske forhold, binding og nedbrydning er målt på indsamlede jordprøver for udvalgte modelstoffer. Med disse parametre er der modelleret en simuleret pesticidudvaskning for modelstofferne. Herefter er der etableret en direkte korrelationssammenhæng mellem jordegenskaber og simuleret udvaskning med henblik på at identificere simple og umiddelbart målbare kriterier, som kan anvendes til at beskrive pesticidudvaskninigen. Kritiske størrelser af de jordegenskaber, som i denne korrelation betyder mest for beskrivelsen af relativt stor udvaskning, bruges som kriterier til kortlægning af særligt pesticidfølsomme arealer. For at sikre at de særligt følsomme arealer er relevante for mange pesticider er det for et stort antal pesticider undersøgt at de ligner de udvalgte modelstoffer mht. bindings- og nedbrydningsegenskaber. For at gøre det muligt at skaffe oplysninger om hydrauliske, bindings- og nedbrydningsparametre på en ressourceeffektiv måde er der fundet en korrelationssammenhæng til jordegenskaber, som tildels kan udledes af eksisterende kort og databaser.

Med en påvist sammenhæng af denne type vil der samtidig være peget på, hvilke egenskaber sandjord skal have for at der kan være tale om risiko for særlig stor følsomhed for udvaskning af pesticider. Dermed vil det ved en kortlægning af de områder, hvor sandjorden besidder de pågældende jordegenskaber, være muligt at udpege de arealer, hvor der er risiko for særlig følsomhed overfor udvaskning af en given gruppe af pesticider.

Med henblik på afklaring af disse spørgsmål har arbejdet haft følgende elementer:

- indsamling af den eksisterende viden om pesticiders udvaskelighed, som den fremgår af litteraturen,
- etablering af nye data på baggrund af feltundersøgelser, prøveindsamlinger og laboratorieeksperimenter,
- simulering af udvaskning,
- etablering af sammenhænge mellem jordegenskaber og modelparametre, og
- etablering af sammenhænge mellem jordegenskaber og udvaskning.

# 1.1. Kategorier af følsomhed

Der er her arbejdet med en opdeling af profiler/arealer i tre kategorier efter følsomhed overfor udvaskning af pesticid:

- ikke er særligt følsomme
- potentielt særligt følsomme. En del af disse vil være "særligt følsomme"
- særligt følsomme.

Første trin i en praktisk zonering vil tilsvarende kunne bestå i at skille de potentielt følsomme områder fra de områder der ikke er særligt følsomme. Andet trin i en zonering vil bestå i at finde de områder der er særligt følsomme indenfor de potentielt særligt følsomme områder. Dette tilstræbes at kunne gennemføres på baggrund af almengyldige kriterier og udvalgte jordegenskaber, som i høj grad vil kunne fremskaffes fra eksisterende kort, databaser eller simple undersøgelser.

Det vil altid være muligt at gå mere detaljeret til værks under inddragelse af yderligere data og modelberegninger og dermed rafinere resultaterne.

# 1.2. Projektafgrænsning

Den forudsætningsmæssige forventning for projektet er at det i fremtiden vil være muligt at reducere den betydeligste risiko for udvaskning af pesticid til grundvandet gennem restriktioner i pesticidanvendelsen indenfor særligt følsomme områder, hvor resultaterne fra VAP-markerne ikke er dækkende. Det er grundlæggende en kombination af forholdene i jorden og pesticidernes egenskaber der afgør hvor og hvor meget der vil kunne udvaskes. Der er nogle geologiske og pedologiske forhold som anses at være afgørende for følsomheden overfor udvaskning. Vigtigst er sondringen mellem områder, hvor strømning og transport primært foregår gennem matrix og områder hvor den hovedsagelig sker gennem sprækker og andre store porer. Første trin i en samlet afklaring af denne sondring er her taget gennem en undersøgelse til karakteristik af udvaskningsforholdene indenfor sandede områder, hvor strømning gennem selve jordarten (matrix) er dominerende. For lerjordsområder med strømning i større porer (makroporer) er gennemført studier af mulige metoder til indsamling af de nødvendige oplysninger.

Sandede områder dækker over forskellige sandede jordtyper, hvis egenskaber mht. følsomhed overfor udvaskning af pesticid i udgangspunktet forventes at være forskellige. For at afklare den forventede betydningen af disse forskelle er der foretaget ensartede undersøgelser i sandede områder, der repræsenterer forskellige sandede jordtyper.

Der er ikke laver undersøgelser i udstrømningsområder til f.eks. vandløb, hvor der ikke foregår grundvandsdannelse, og i andre lavtliggende områder uden drikkevandsinteresser (postglaciale aflejringer).

Godkendelsesordningen for pesticider sigter på at forhindre at der benyttes pesticider som i gennemsnit kan udvaskes fra den biologisk aktive rodzone til under en meters dybde i gennemsnitlige årlige koncentrationer over grænseværdien på 0,1  $\mu$ g/l. De senere års resultater fra Varslingssystemet viser dog, at restriktioner på baggrund af godkendelsesordningen ikke i alle tilfælde er tilstrækkelige til at hindre pesticidudvaskning, selv ved almindelig landbrugsmæssig brug af pesticider. Dette kan evt. bl.a. skyldes at de sandjorde som benyttes i godkendelsesordningen til at teste pesticiders udvaskelighed, om end de er typiske for mange sandjorde, ikke kan afspejle hele den naturlige variation. I dette projekt undersøges og verificeres udvaskningsrisikoen derfor detaljeret for danske forhold på repræsentative jorde i et bredt udsnit af sandede områder med udgangspunkt i regelret anvendelse af pesticider.

Kun et generelt forbud mod brug af pesticider vil kunne give fuld sikkerhed mod udvaskning til grundvandet. En identifikation af de særligt følsomme områder, hvor resultaterne fra VAP-markerne (og godkendelsesordningen i øvrigt) ikke er dækkende, vil, kombineret med restriktioner i pesticidanvendelsen, friholde disse arealer overfor særlig pesticidudvaskning, men er ikke en garanti for, at der ikke vil kunne forekomme udvaskning af pesticid udenfor de særligt følsomme områder. Det vurderes dog at en sådan pesticidudvaskning udenfor restriktionsbelagte særligt følsomme områder er meget begrænset og hovedsagelig vil være forårsaget af ibrugtagning af pesticider med atypiske egenskaber eller af ikke regelret brug.

Pesticider nedbrydes hovedsagelig under iltrige forhold. I sandjordsområder er der normalt iltrige forhold i jordlagene ned til grundvandsspejlet, selv om grundvandsspejlets beliggenhed og dermed iltindholdet varierer gennem tid. Pesticiders skæbne i den umættede zone fra jordoverfladen til grundvandsspejlet er derfor afgørende for om de udvaskes til grundvandet.

Undersøgelserne af om der kan identificeres kriterier til udpegning af særligt pesticidfølsomme områder, er gennemført for hele den umættede zone og med hovevægt på de øverste 1-2 meter med den største bioaktivitet.

Undersøgelserne af alle undersøgelsesmarker bygger på simuleringer med samme pesticidbelastning, lodret transport gennem jordprofilet og ensartet klima. Herved bliver der skabt et ensartet grundlag til at sammenligne udvaskningen under forskellige geologiske forhold (forskelle i jordprofilernes sammensætning). Sådanne idealiserede ensartede forhold eksisterer i praksis kun som gennemsnit indenfor et område, og vil på grund af bl.a. forskelle i praktisk landbrugsdrift og klima ikke kunne dokumenteres sammenligneligt med målinger af pesticidindholdet i jordvandet. Derfor er der ikke indsamlet grundvandsprøver, idet deres eventuelle pesticidindhold ikke ville kunne føres specifikt tilbage til det enkelte undersøgte profil. Reel udvaskning er derimod undersøgt på andre marker m.h.p. om muligt at verificere den udviklede metodik for udpegning af særligt pesticidfølsomme områder.

For at beskrivelsen af følsomheden overfor simuleret pesticidudvaskning skal være så generelt gyldig og sammenlignelig fra område til område som muligt, er der taget udgangspunkt i de egenskaber ved jordlagene som er uforanderlige eller kun ændrer sig meget langsomt (iboende egenskaber). De forhold som varierer gennem tiden, såsom arealanvendelse, driftsform, vanding og nedbør, som også har stor betydning for pesticidudvaskning, er derfor i udgangspunktet holdt konstant eller ens for alle undersøgte marker. Udvaskningens afhængighed af ændringer i de ikke konstante parametre er dog også undersøgt.

Eventuelle yderligere forudsætninger er nævnt i forbindelse med beskrivelserne af de analyser hvor de er anvendt.

# 1.3. Processer i jorden med betydning for udvaskning

I landbrugsområder er den mulige kilde til pesticidforurening af grundvand de sprøjtemidler, der benyttes til plantebeskyttelse. Ved udsprøjtning vil noget af pesticidet ramme planter og andet vil ende på jorden. En del af det pesticid, der rammer planterne, kan ende på jorden, hvis det for eksempel bliver skyllet af planten.

De vigtigste processer som kan påvirke pesticider i jorden omfatter: fordampning til atmosfæren, transport med jordvæsken, binding til jordens faste bestanddele og nedbrydning ved mikroorganismers, - herunder fuldstændig nedbrydning (mineralisering) samt indbygning i jordens humusfraktion, figur 2.



**Figur 2**. De vigtigste processer for pesticider i jorden. Pesticid i jordvæsken kan bindes til jordens faste bestanddele, nedbrydes af mikroorganismer eller transporteres til dybere jordlag i forbindelse med en nedadgående strømning af vand. Den største binding og nedbrydning foregår for hovedparten af de undersøgte stoffer "generelt" i de øverste 1-2 meter under jordoverfladen og i mindre grad i den dybere del af den umættede zone.

Vandstrømningen i jorden (de hydrauliske egenskaber) afhænger, ud over af nedbørsmængden, af jordens struktur, evne til at binde vandet og plantevæksten: Jordens struktur og evne til at binde vandet afhænger af porøsitetsfordelingen, som især er bestemt af indholdet af organisk kulstof, ler, silt og sand, samt af hvor kompakt jorden er (volumenvægten). Plantevæksten påvirker jordens struktur gennem dannelse af rodkanaler og tilførsel af dødt plantemateriale. Der foregår opadgående vandstrømning i perioder, hvor fordampningen og planternes optag af vand er større end tilførslen gennem nedbør eller vanding, mens en nedadgående vandstømning forekommer i perioder med overskydende nedbør eller vanding. Vandstrømningen i jord er dog meget kompliceret, (f.eks. Grathwohl et al, 2004). I sommerperioden, hvor der typisk er underskud af vand, kan kraftig nedbør for eksempel medføre, at der i lokale lavninger er overskudsnedbør og dermed en nedadgående vandstrømning selv om der som helhed er underskud af vand på markerne.

Det er indholdet af pesticid i den jordvæske, der strømmer til de dybere jordlag, der afgør hvor meget pesticid der kan transporteres til grundvandet. Jordvæskens indhold af pesticid afhænger, ud over af nettonedbøren og hvor meget pesticid der er bragt ud, især af stoffets nedbrydning og bindingen til jordens faste bestanddele. Nedbrydningen og bindingen kan være meget forskellig for forskellige pesticider og for forskellige jorde. Nogle pesticider nedbrydes fuldstændigt (d.v.s. mineraliseres til kuldioxid, vand og uorganiske næringssalte) af mikrosvampe og især bakterier. Andre pesticider nedbrydes kun delvist til metabolitter (nedbrydningsprodukter), som evt. kan have andre egenskaber i forhold til binding og nedbrydning end det oprindelige pesticid. Nedbrydningen af pesticid sker hovedsagelig i A-horisonten og evt. Bh-horisonten (muldlaget og den evt. humusholdige del af underjorden) hvor den biologiske aktivitet er størst, fordi der er et forholdsvis højt indhold af organisk materiale, som mikroorganismerne kan leve af. Binding af pesticid til jorden sker særligt til det organiske stof (humus) og lermineraler. Bindingen påvirkes bl.a. af jordens surhedsgrad (pH), som både har betydning for jordens bindingspotentiale og for hvor reaktionsvilligt pesticidet er. Pesticid der bindes til jorden kan i et vist omfang frigives igen, i modsætning til pesticid der nedbrydes og dermed forsvinder permanent.

For de fleste pesticider gælder at jo længere tid pesticidet opholder sig i A-horisonten og den evt. Bh-horisont, jo bedre er muligheden for at det kan blive nedbrudt eller sammenbygget med humus (eller lermineraler). Omvendt kan områder hvor der foregår ringe nedbrydning, og hvor opholdstiden er kort, anses for de mest følsomme overfor udvaskning.

Begrebet "pesticidets opholdstid" er derfor benyttet i denne rapport som et samlende beskrivende udtryk for at pesticidet befinder sig i de øverste jordlag i en periode inden det udvaskes. Hvis bindingen er stor kan denne periode være meget lang. Lang opholdstid fremmer muligheden for at der kan ske nedbrydning således at opholdstiden ved fuld nedbrydning kan siges at være uendelig lang, idet der ikke udvaskes pesticid. Opholdstiden afhænger af nedbørsmængden, jordens hydrauliske egenskaber, graden af binding (og evt. senere genfrigivelse) og nedbrydningen af pesticidet, og er derfor et modstykke til "udvaskningen".

På grund af ovenstående har undersøgelsen af følsomhed overfor pesticidudvaskning derfor 4 elementer:

- hydrauliske egenskaber
- stoffets opholdstid i de biologisk aktive lag
- stoffets nedbrydning (forsvinding og mineralisering)
- samspil mellem de enkelte elementer (gennem modellering og korrelationsanalyse).

# 1.4. Sprogbrug

- Model, Parameter og Modelstof. I rapporten er en del af den faglige sprogbrug standardiseret for at mindske behovet for indføjede forklaringer. Dette gælder betegnelserne for delundersøgelserne og især ift. brugen af ordene "model" og "parameter":De fire pesticider som illustrerer spændet i nedbrydnings- og bindingsegenskaber for anvendte pesticider kaldes "modelstoffer"
- "Opholdstid" er benyttet som et samlende beskrivende udtryk for at pesticidet befinder sig i de øverste jordlag i en periode inden det udvaskes. Hvis bindingen er stor kan denne periode være meget lang. Lang opholdstid fremmer muligheden for at der kan ske nedbrydning. Hvis der foregår fuld nedbrydning kan opholdstiden således siges at være uendelig lang, idet der ikke udvaskes pesticid. Opholdstiden afhænger af nedbørsmængden, jordens hydrauliske egenskaber, graden af binding (og evt. senere genfrigivelse) og nedbrydningen af pesticidet, og er derfor et modstykke til "udvaskningen".
- Stofgrupper. Undersøgelserne af om 25 pesticider har fællestræk i udvaskelighed kaldes "stofgruppe undersøgelser" og stofferne for "stofgruppe stoffer".
- Parametre. Kørslerne og resultaterne af kørslerne med MACRO modellen kaldes "simuleringer" og "simuleringsresultater", mens de data som benyttes i denne sammenhæng kaldes "model parametre" eller blot "parametre".
- Jordegenskaber. Andre data som karakteriserer jordmediet kaldes "jordegenskaber".
- Korrelationer. De mange korrelationsmodeller (fx. PLS-modeller) kaldes "korrelationer".
- Hydrauliske egenskaber. I modelkørslerne benyttes der et antal afledte hydrauliske parametre. Den mættede hydrauliske ledningsevne betegnes Ks.
- Binding. Udtrykket "binding" er anvendt frem for "sorption". Bindingsmålingerne betegnes Kd og bindingsraten Kf.
- Forsvinding. En betydelig del af det pesticid som kommer ned i jorden forsvinder af en eller anden grund (mineralisering, binding, nedbrydning til metabolitter, fordampning...). Denne effekt er målt som værdien DT50 (den tid det tager før kun halvdelen af stoffet kan findes målt efter en standardiseret ekstraktions- og analysemetode) og betegnes "forsvinding". Den rate hvormed forsvindingen foregår betegnes "k".
- Mineralisering. Den process hvorved pesticidet nedbrydes til sine grundbestanddele (kuldioxid, vand ...) betegnes fx. M64 (den del af stoffet som er tilbage efter 64 dage i jorden) og betegnes "mineralisering".
- "Nedbrydning" er benyttet som en deskriptiv samlebetegnelse for forsvinding og mineralisering.
- Fuldprofil, FP. En del af undersøgelserne er foretaget i udgravninger kombineret med boringer sådan at der fremkommer data for et fuldt jordprofil i den umættede zone. Disse profiler kaldes "fuldprofiler".
- A-horisont. Muldlag (inkluderer pløjelaget).
- Ap-horisont. Pløjelaget.
- B-horisont. Udfældningslag under A-horisonten.
- C-horisont. Lag med høj grad af oprindelige/naturlige egenskaber under B-horisonten.

# 2. Dataindsamling



*Figur 3.* Jordartskort med angivelse af feltlokaliteter som er undersøgt i forbindelse med etableringen af projektets datagrundlag.

Dataindsamlingen og feltundersøgelserne er foretaget indenfor 6 landskabselementtyper med 8 forskellige sandede geologiske aflejringer af forskellig oprindelse, figur 3 og tabel 1. Undersøgelserne er gennemføret på en måde, så de så vidt muligt afspejler og dokumenterer variationen indenfor og mellem alle de udvalgte landskabselementer, bilag 1 og 2. De konkrete undersøgelser spænder over variationen i et bredt felt af geologiske, pedologiske og biologiske (bilag 2) forhold, som menes at kunne have betydning for og sammenhæng med transport og omsætning af pesticider.

Tabel 1. Undersøgte landskabselementer med tilhørende kvartære jordarter

Landskabselement	Jordart
Yoldiaflade (hævet havbund)	Senglacialt saltvandssand
Alluvialkegle (groft materiale afsat lige uden for isranden)	Ekstramarginalt smeltevandssand og grus (som ikke har været isoverskredet)
Proximal smeltevandsslette (afsat nær isranden)	Ekstramarginalt smeltevandssand (som ikke har været isoverskredet)
Distal smeltevandsslette (afsat fjernt	Ekstramarginalt smeltevandssand
fra isranden)	(som ikke har været isoverskredet)
Bakkeø (fra Saale istiden)	Smeltevandssand og –grus
Bakkeø (fra Saale istiden)	Morænesand
Weichsel moræneflade (Djursland/Himmerland)	Morænesand
Weichsel moræneflade (Nordjylland)	Morænesand



**Figur 4**. Indenfor hver geologisk variant på landskabselementtyperne er tre marker undersøgt med bl.a. boringer og udgravninger. Og der er lagt en profillinie med boringer gennem den ene af markerne. Indenfor markerne og i deres omgivelser er der foretaget geofysiske undersøgelser.

Der er lavet detaljerede undersøgelser på 24 marker, 3 for hver af de 6 landskabselementers 8 geologiske varianter, figur 4.

På hver af markerne er der lavet en udgravning og en boring ned til grundvandsspejlet, sådan at de sammen danner et profil (et "fuldprofil" i projektets terminologi) gennem hele den umættede zone.

Fra fuldprofilerne er der udtaget op til 5 prøver i forskellige dybder. Tre af dem er fra de forskellige overfladenære jordbunds horisonter (A-, B- og øverste del af C-horisonten) og to fra den dybere del af den umættede zone. Der er lavet pedologiske, geologiske og geokemiske undersøgelser af den umættede zone med henblik på at skaffe hydrauliske og stofspecifikke modelparametre, samt af mikrobiologiske og geokemiske egenskaber på de indsamlede prøver.

For 6 af landskabselementernes geologiske varianter er én af markerne undersøgt for, hvor stor lokal variation der er indenfor marken, idet der på én af de tre marker indenfor et landskabselement/geologisk variant er lavet 10 - 51 udgravninger, til højest en meters dybde. Udgravningerne er beskrevet pedologisk og der er foretaget feltundersøgelser og udtaget jordprøver til laboratorieanalyse af tekstur og biologisk aktivitet. Disse oplysninger indgår i en vurdering af heterogeniteten, bilag 3A.

På hver af de marker hvor variationen er undersøgt, er der også lavet en "profillinie undersøgelse" for yderligere at beskrive variationen. En profillinie består af fire boringer placeret langs en flere kilometer lang linie som inkluderer marken medden store profiludgravning. Her er der lavet de samme undersøgelser som i de øvrige boringer. Disse oplysninger tillader tilsvarende en karakteristik af heterogeniteten i skala 100 - 1000 meter eller mere. I linien mellem en del af boringerne i profillinierne er der indsamlet ekstra jordprøver mhp. at forbedre beskrivelsen af heterogeniteten i skala 1 – 100 m.

Endelig er den geologiske og pedologiske variation indenfor de undersøgte marker og landskabselementer undersøgt med geofysiske målinger (EM38 og/eller georadar) for at vurdere i hvilket omfang de detailundersøgte marker evt. også er repræsentative for de videre omgivelser (I. Møller, 2001)

### 2.1. Modelstoffer

De to vigtigste egenskaber i forhold til hvor meget af det tilførte pesticid, der kan transporteres til grundvandet, er binding og nedbrydning. Med baggrund i den eksisterende viden om pesticider, er fire stoffer, som er i brug ved projektstart, og som sammen dækker et så bredt spænd af bindings- og nedbrydningsegenskaber som muligt, indledningsvis udvalgt som modelstoffer til detaljeret undersøgelse, tabel 2. De fire pesticider, som alle anvendes eller har været almindeligt anvendt i landbruget, er: metribuzin (MTB), tribenuron-methyl (et minimiddel), MCPA og glyphosat. Tribenuron-methyl nedbrydes hurtigt til sulfonamid og methyltriazinamin (metabolitter). Derfor er undersøgelserne for dette pesticid (ud fra en forsigtighedsbetragtning) blevet udført for den af de to metabolitter som er sværest nedbrydelig: methyltriazinamin (MTA). Der er ikke oplysninger om nedbrydning og binding af methyltriazinamin i litteraturen, hvorfor vurderingen er baseret på egne undersøgelser.

Nedbrydningen og bindingen af de fire udvalgte pesticider er blevet undersøgt i hovedparten af de udtagne jordprøver.

**Tabel 2**. De undersøgte pesticiders forventede bindingsforhold og biologiske nedbrydelighed.

Binding		
Nedbrydning	Høj	Lav
Høj	Glyphosat	MCPA
Lav	Methyltriazinamin (MTA)	Metribuzin (MTB)

# 2.2. Stofgrupper

Udpegningen af områder hvor pesticider er særligt udvaskelige skal omfatte alle, flertallet, eller grupper af pesticider med lignende bindings og nedbrydningsegenskaber. Med dette formål er det undersøgt om resultaterne vedrørende de fire modelstoffer kan formodes også at dække de cirka 250 pesticider, der er godkendt i Danmark. Derfor er der foretaget undersøgelser med laboratorieforsøg for 26 pesticider og en gennemgang af oplysninger i den eksisterende litteratur for 34 pesticider. I laboratoriet er nedbrydningen undersøgt ved at måle "mineraliseringen", d.v.s. hastigheden i omdannelsen af pesticiderne til kuldioxid.

For at undersøge om pesticider kan grupperes i udvaskningsmæssigt relevante stofgrupper er binding, mineralisering og dannelse af metabolitter i jord fra to dybder, muldlaget (A-horisonten) og underjorden (C-horisonten) indenfor tre marker, undersøgt for de 26 pesticider. Litteraturstudiet omfatter knapt 400 udvalgte publikationer, hvor der er oplysninger om bindingen og nedbrydningen af 34 pesticider, tabel 3, samt tilhørende oplysninger om pH, indhold af organisk stof og kornstørrelsesfraktionerne ler, silt og sand.

Stof	Litt.	Lab.	Stof	Litt.	Lab.
Triaziner og triazinoner			Phenoxysyrer		
Atrazin	Х	Х	Dichlorprop	Х	
Simazin	Х	Х	МСРА	Х	Х
Cyanazin	Х		Mechlorprop	Х	Х
Terbuthylazin	Х	Х	2,4-D	Х	Х
Metamitron	Х	Х	Fluazifop-P-butyl	Х	
Metribuzin	Х	Х			
			Ethylenbisdithyocarbarmater		
Phenylurea forbindelser			Maneb	Х	
Diuron	Х	Х	Mancozeb	Х	<b>X</b> <sup>1</sup>
Linuron	Х	Х	ETU (N)	Х	
Isoproturon	Х	Х			
Mono-desmethyl-isoproturon (N)		Х	Phosphonsyrer		

**Tabel 3**. Pesticider og nedbrydningsprodukter (N), der indgår i henholdsvis litteraturstudiet (litt.) og laboratorieundersøgelserne (lab.) m.h.p. opstilling af stofgrupper

4-isopropylanilin (N)		Х	Glyphosat	Х	Х
			Glyphosat-trimesium	Х	
Sulfonylurea forbindelser			Glufosinat	Х	
Chlorsulfuron	Х	Х			
Metsulfuron-methyl	Х	Х	Organiske		
			phosphorsyreestre		
Thifensulfuron-methyl	Х	Х	Dimethoat	Х	
Tribenuron-methyl	Х	Х	Diazinon	Х	Х
Triazinamin (N)		Х			
Methyltriazinamin (N)		Х	Andre		
			Fenpropimorph	Х	
Benzonitriler			Desmedipham	Х	
Bromoxynil	Х		Phenmedipham	Х	
loxynil	Х		Propiconazol	Х	
			Bentazon	Х	Х
Dinitroaniliner			Dichlobenil		Х
Pendimethalin	Х		BAM (N)		Х

<sup>1)</sup> Indgik kun delvist i laboratorieundersøgelser

For at undersøgelserne skal dække et så bredt spektrum af egenskaber for pesticider som muligt, omfatter litteraturstudiet og laboratorieundersøgelserne vedr. stofgrupper både pesticider som er almideligt anvendt, forbudte stoffer, og stoffer, der ikke er blevet anvendt i dyrkningsmæssig sammenhæng, som for eksempel dichlobenil.

### 2.3. Laboratorieanalyser

Formålet med laboratorieanalyserne, tabel 4, er at opbygge et datasæt, som er tilstrækkeligt som grundlag for simulering af udvaskning (modellering) og afprøvning af de kritiske sammenhænge mellem udvaskelighed af pesticid og jordens egenskaber.

Туре	Egenskab	Betegnelse
Kemi og mineralogi	Kornstørrelsesfordeling <sup>1)</sup>	Ler, finsilt, grovsilt, finsand1,
		finsand2, grovsand1, grovsand2
	Organisk kulstof / humus	C-total / humus (= C-total/0.57)
	pH målt i 0,01 M kalciumklorid	pH <sub>CaCl2</sub>
	pH målt i vand	pH <sub>H2O</sub>
	Ombyttelige baser	Ca <sup>2+</sup> , Mg <sup>2+</sup> , K <sup>+</sup> , Na <sup>+</sup>
	Ombyttelige brintioner	H <sup>+</sup> ombyttelig
	Kationombytningskapacitet	CEC
	Dithionitekstraberbart Fe/Al	Fe <sub>DCB</sub> og Al <sub>DCB</sub>
	Oxalatekstraherbart Fe/Al	Fe <sub>oxalat</sub> og Al <sub>oxalat</sub>
	Specifik overflade	Overflade
Mikrobiologi	Dyrkbare bakterier – TSA agar	CFU <sub>TSA</sub>
	Dyrkbare bakterier – Goulds agar	CFU <sub>Goulds</sub>
	Substrat Induceret Respiration	SIR
	Arylsulfatase Aktivitet	ASA
	Fluorescein diacetat hydrolyse	FDA

Tabel 4. Oversigt over hvad der er målt.

	Basal in situ respiration	IRGA
	Funktionel diversitet	
Hydrauliske aspekter	Volumenvægt	Vol. vægt
	Porøsitet	Porøsitet
	Mættet ledningsevne	Mættet ledningsevne
	Umættet ledningsevne	Umættet ledningsevne
	Retention	Retention
Stofspecifikke parametre	Forsvindning <sup>2)</sup>	Nedbrydning, DT50 eller k (rate)
	Mineraliserng <sup>2)</sup>	MT50 eller M64
	Binding	K <sub>d</sub>

<sup>1)</sup> kornstørrelsesfraktionerne er nærmere beskrevet i Barlebo et al., (2002, Noter: tabel 6.1). <sup>2)</sup> forskellen mellem nedbrydning (forsvinding) og mineralisering er beskrevet

i bilag 6.

# 3. Fremgangsmåde ved fortolkning af data

For at finde de jordegenskaber som rummer de nødvendige oplysninger til udpegning af særligt pesticidfølsomme områder og som kan fremskaffes med den mindste ressource er nogle problemstillinger undersøgt ved flere metoder:

- jordegenskaber der bedst kan beskrive modelparametre
- afklare om relativt dyre modelparametre kan erstattes med lettere tilgængelige jordegenskaber.

Der er fire hovedelementer i fortolkningerne af de indsamlede data:

- Sammenlignende undersøgelser med tilsvarende data af anden oprindelse
- parvis fortolkning (bivariat dataanalyse) m.h.p. dataforståelse
- simulering af udvaskning på basis af værdier for binding, nedbrydning og hydrauliske forhold som er målte eller beregnede (multivariat korrelationsanalyse og neural netværksteknik)
- statistisk undersøgelse af sammenhænge mellem jordegenskaber og både modelparametre og simulerede udvaskninger (multivariat kalibreringsmodellering).

Sammenhænge mellem jordegenskaber er undersøgt gennem parvise sammenligninger (bilag 7) eller ved multivariat korrelationsanalyse mellem jordegenskaber, som pH og kornstørrelsefordeling, og mere komplekse jordegenskaber, som kationombytningskapacitet (CEC) og jordens specifikke overflade. De hydrauliske forhold er vurderet ved hjælp af neural netværksteknik. Valget mellem enten multivariat korrelationsanalyse eller neural netværksteknik er baseret på at neural netværksteknik bruges, hvor de ikke-lineære relationer mellem jordegenskaberne ikke kan lineariseres ved en transformation.

### 3.1 Sammenlignende undersøgelser

undersøgelser dokumentere valate Disse oa analyser skal om de undersøgelseslokaliteters egenskaber til umiddelbare omgivelsers. svarer de landskabselementernes eller sandjordes egenskaber i almindelighed. Undersøgleserne har elementerne:

- repræsentativitet
- variabilitet

Ved repræsentativitetsundersøgelserne sammenlignes de indsamlede data for jordegenskaber og marker, som projektet har produceret, med oplysninger i forskellige baser og kort. Sammenligningerne er foregået ved at plotte projektets kornstørrelsesdata i trekantsdiagrammer sammen med eksisterende data for de enkelte landskabselementer. Der er især lagt vægt på oplysninger fra geologiske jordartskort, teksturdatabasen og profildatabasen.

Den skalamæssige variabilitet af de jordegenskaber og inddata for jordegenskaber, fra de undersøgte marker, som projektet har produceret, er dels undersøgt ved hjælp af variogrammer, dels gjort sammenlignelige ved box-plot for de enkelte marker og typer af parametre. Ud over de konkret undersøgte jordegenskaber er også resultaterne af de geoelektriske målinger (EM38) undersøgt og Georadar profilerne vurderet.

### 3.2 Rammer for simuleringer

Resultaterne af undersøgelserne er baseret på simulering af udvaskning og korrelation mellem parametre og jordegenskaber. Dette kræver i et vist omfang omregning mellem forskellige datatyper og sammenlægning af lag i de undersøgte jordprofiler.

#### Binding omregnet fra K<sub>d</sub> til K<sub>f</sub> (Freudlich isotermen)

Bindingen af pesticiderne er bestemt ved fordelingskoefficienten  $K_d$ . Til brug for simulering af udvaskning (her med MACRO modellen) beskrives bindingen med Freundlich isotermen, som indeholder koefficienten  $K_f$ , der fortæller om størrelsen af bindingen, og eksponenten  $n_f$ , som beskriver i hvor høj grad bindingen stiger konstant ved stigende koncentration af pesticid.

Bindingen (målt som  $K_d$ ) er blevet omregnet til en  $K_f$ -værdi for stofferne MCPA, MTA og MTB. Omregningen er sket ved hjælp af Freundlich eksponenter bestemt for henholdsvis over- og underjord fra tre af projektets lokaliteter for hver af de tre stoffer. Freundlich isotermerne og forudsætningerne for omregningen er beskrevet i bilag 8.

#### Summering af data indenfor den øverste meter af jordprofilerne

For at kunne give en samlet beskrivelse af forholdene i de øverste jordlag er jordegenskaber blevet summeret med henblik på at korrelere til simuleret pesticidudvaskning til jordlagene under den øverste meter af profilet. Summeringen er foretaget ved at tillægge jordegenskaber en vægt som står i forhold til tykkelsen af det jordlag hvor data er målt. Et eksempel på summeringerne af organisk stof (C-total) og finsand for fuldprofilet på Ulsted marken er vist i tabel 5.

	A-horisont	B-horisont	C-horisont	Sum
Interval	0-30 cm	30-80 cm	80-260 cm	-
Lagtykkelse (meter)	30 cm	50 cm	20 cm	100 cm
C-total (g/100g)>kg/m2	1,19	0,13	0,08	43,8 kg/m2
Finsand1 (%)>kg/m2	34,9	35,8	63,9	411,5 kg/m2
Volumen vægt	1,44	1,48	1,54	-

Tabel 5. Lagtykkelse, finsand1 og C-total for fuldprofilet på Ulsted marken.

Summering af jordegenskaberne i den øverste meter skal sættes i forhold til jordens volumen vægt (v). Dette gøres ved at summere jordmængderne i de enkelte horisonter. Enheden bliver for C-total: (g kulstof/100 g jord) x (cm) x (g jord/cm<sup>3</sup>) = g kulstof / 100 cm<sup>2</sup> eller kg/m<sup>2</sup>.

Summen af C-total i A-horisonten er: 1,19 x 30 x 1,44, hvortil lægges tilsvarende bidrag fra B- og C-horisonterne.

Alternativt kan summen udregnes som gennemsnit af indholdet gennem horisonten, hvor der laves en antagelse af at volumenvægten er relativt ens i den øverste meter. Denne antagelse er afprøvet ved korrelationen til den simulerede udvaskning af MTB, bilag 10.

De summerede jordegenskaber er brugt ved den statistiske sammenligning mellem jordegenskaber og simuleret udvaskning af pesticid, se yderligere i afsnit 3.4.

# 3.3. Simulering af pesticidudvaskning

For at kunne vurdere og sammenligne sårbarheden overfor pesticidudvaskning fra arealer med forskellige egenskaber er der gennemført simuleringer af udvaskning med den hydrologiske stoftransportmodel MACRO4.3, som er den model der anvendes i forbindelse med godkendelsesordningen for pesticider. I modellen simuleres udvaskning af pesticid på baggrund af vandbalancen og stofspecifikke parametre. Som vandbalance scenarier er der brugt to nedbørs tidsserier på 12 eller 24 år (Tylstrup og Estrup), og hydrauliske parametre som er bestemt for de undersøgte profiler. De stofspecifikke modelparametre beskriver bindingen og nedbrydningen af pesticid. Opsætningen af MACRO modellen og simuleringerne er gennemgået i bilag 9.

Udvaskningen er blevet simuleret for tre af de fire modelstoffer pesticider. Det sidste pesticid, glyphosat, er ikke blevet simuleret fordi laboratorieresultaterne viser, at det bindes meget stærkt til jordens faste bestanddele og at der ikke ville kunne simuleres nogen udvaskning med de forudsætninger, som er gjort. For de tre øvrige pesticider er den målte binding (K<sub>d</sub>) blevet omregnet til en K<sub>f</sub>-værdi (beskrevet i afsnit 3.2). For hver af de tre stoffer er det dén Freundlich eksponent (n<sub>f</sub>), som er benyttet til omregning af K<sub>d</sub> til K<sub>f</sub> for prøver fra overjord, der er brugt som inputparameter til modellen (bilag 8).

Simuleringen af udvaskning er gennemført for både de 24 fuldprofiler på sandjord og for 170 sandjordsprofiler fra profildatabasen. For at beskrive sammenhængen mellem modelparametre (hydraulik, binding og nedbrydning) og de mest betydende jordegenskaber er der gennemført tre simuleringer.

- Først er hydraulikkens indflydelse på simuleret udvaskning undersøgt ved at holde binding og nedbrydning konstant.
- Dernæst er bindingen undersøgt i samspil med hydraulikken ved at holde nedbrydningen konstant.
- Endelig er nedbrydningen undersøgt i samspil med både binding og hydraulik.

Herudover er der lavet gentagne simuleringer hvor alle ovenstående parametre er varieret for at undersøge hvilke modelparametre der har størst indflydelse på simuleret udvaskning (Monte Carlo type simuleringer), bilag 9.

Udvaskningens følsomhed overfor variationer i tykkelsen af pløjelaget, nedbørsmængden (nettonedbøren) og dybden til grundvandsspejlet er også blevet undersøgt ved simulering med MACRO modellen.

# Hydraulik

Til simulering af udvaskning med MACRO modellen er der behov for hydrauliske inputparametre. Derfor er der beregnet hydrauliske modelparametre til simulering af modelstoffernes udvaskning på baggrund af målinger af retentionskurver og korrelation med neural netværksteknik, bilag 5.

For (isoleret betragtet) at afklare de hydrauliske forholds betydning for udvaskning af pesticid er der simuleret med 9 faste kombinationer af binding (K<sub>f</sub>) og nedbrydning (k) for 170 sandjordsprofiler fra profildatabasen. Værdierne af de 9 kombinationer af binding og nedbrydning for muldlaget (A-horisonten) og de dybere jordlag er fastlagt med udgangspunkt i resultaterne af målte og simulerede værdier for MTB. Værdierne og kombinationerne af værdier er valgt så de medfører at de simulerede udvaskninger dækker intervallet fra det ganske lave til det meget høje udvaskningsniveau, tabel 6.

kK <sub>f</sub> -kombination	k (øvre)	k (nedre)	K <sub>f</sub> (øvre)	K <sub>f</sub> (nedre)
	[d-1]	[d-1]	[cm <sup>3</sup> g <sup>-1</sup> ]	[cm <sup>3</sup> g <sup>-1</sup> ]
1	1.10 <sup>-3</sup>	0	5	1
2	1.10 <sup>-3</sup>	1.10 <sup>-3</sup>	5	0
3	1.10 <sup>-3</sup>	0	5	0
4	1.10 <sup>-2</sup>	0	1	1
5	1.10 <sup>-2</sup>	1.10 <sup>-3</sup>	1	0
6	1.10 <sup>-2</sup>	0	1	0
7	1.10 <sup>-3</sup>	0	1	1
8	1.10 <sup>-3</sup>	1.10 <sup>-3</sup>	1	0
9	1.10 <sup>-3</sup>	0	1	0

Tabel 6. Input værdier for de 9 kombinationer af k og K<sub>f</sub>

### Binding

Udvaskningen af MTB er blevet simuleret med de målte hydrauliske egenskaber og bindingsværdier, men med fast nedbrydningsværdi for de 24 fuldprofiler. Formålet er at undersøge bindingens betydning for udvaskning. Nedbrydningen er i disse simuleringer fastsat til 80% fraktilen af de forsvindinger som er målt i de 24 fuldprofiler mhp. at tage udgangspunkt i relativt dårlige nedbrydningsforhold.

Med udgangspunkt i MCPA's egenskaber, hvor bindingen er blevet mindsket således at det vil medføre gradueret simuleret udvaskning, det vil sige at der kan opnås sikre værdier

for udvaskning både i det høje område og i det lave område, er udvaskningen simuleret med de målte hydrauliske egenskaber og fast nedbrydningsværdi for knapt 170 af profildatabasens sandjordsprofiler. Bindingsværdierne er målt for fuldprofilerne og tillagt profildatabaseprofilerne ved korrelation ud fra disses målte egenskaber. Formålet er at isolere effekten af binding på simuleret udvaskning.

#### Nedbrydning

Nedbrydningens (forsvindingens) betydning for simuleret udvaskning er undersøgt for de aktuelle hydrauliske parametre, og de målte værdier for binding og nedbrydning af MTB, MTA og MCPA på de 24 fuldprofiler.

#### Betydningen af A-horisontens tykkelse

A-horisonten (herunder især Ap-horisonten, pløjelaget, med det i reglen højeste indhold af humus) er den horisont i den umættede zone hvor der, for langt de fleste pesticider, sker den største binding (og dermed nedbrydnig). Dette er vist gennem at hovedparten af de undersøgte pesticider viser størst bindingsevne overfor jorde med højt humusindhold. Derfor må pesticider normalt forventes at have længere opholdstid i denne horisont jo tykkere den er. Der er gennemført simuleringer af udvaskning for 10 udvalgte profiler for at finde en kritisk tykkelse af A-horisonten, og opnå viden om den nøjagtighed, hvormed denne tykkelse skal fastlægges.

De 10 profiler repræsenterer de fire landskabstyper: Yoldiaflade, Hedeslette, Bakkeø og Weichsel moræneflade. Samtidig dækker de 10 profiler hele variationsområdet i simuleret udvasket koncentration i 2 meters dybde. For de 10 profiler varieres tykkelsen af Ahorisonten beregningsmæssigt fra 5cm til 80 cm og kompenseres ved at ændre Bhorisontens tykkelse modsvarende. Den beregningsmæssige variation i tykkelsen af Ahorisonten strækker sig ind i ekstreme værdier som er urealistiske i praksis. Dette er gjort for at tydeliggøre effekten af variationer i tykkelsen. Disse simuleringer er udført med aktuelle hydrauliske modelparametre og målte værdier for binding af MTB, mens nedbrydningen er holdt konstant.

#### Betydningen af nedbørsmængden (nettonedbøren)

De fleste simuleringer er foretaget med udgangspunkt i klimaet i Tylstrup som har en gennemsnitlig årsnedbør for Danmark. For at undersøge betydningen af variationer i nedbørsmængden er der også simuleret med udgangspunkt i nedbørsforholdene med høj årlig nedbør i Estrup for de omtalte 9 kombinationer af k og K<sub>f</sub> i 170 af profildatabasens sandjordsprofiler. Estrup og Tylstrup klima er beskrevet i bilag 9.

#### Betydningen af dybden til grundvandet

For at vurdere betydningen af grundvandsspejlets beliggenhed for udvaskningen er der, på basis af målte trykniveauer i sandområder, udført simuleringer med fastholdt grundvandsspejl. Grundvandspejlet varieres fra 5 m, som er den fastholdte standarddybde, til 3 m, 2.5 m og 2.1 m (dvs. hhv. 3 m, 1 m, 0.5 m og 0.10 m under bunden af de 2 m dybe modelprofiler. Derfor ligger grundvandsspejlet altid under det 2 m profil/modeldybde hvorfra modellens output tages. For de undersøgte sandjorde har denne variation kun medført beskedne ændringer i simuleret udvaskning, hvorfor der ikke i de videre undersøgelser er taget højde for variationer i grundvandsspejlet, bilag 9.

# 3.4. Korrelationsanalyser

To vigtige problemstillinger som søges afklaret er om der kan etableres en sammenhæng mellem modelparametre med betydning for udvaskning og simple jordegenskaber, som allerede er tilgængelige eller relativt let kan fremskaffes (kortlægges), og i hvilken grad resultaterne gælder for alle pesticider, incl. de der vil blive anvendt i fremtiden. Sammenhængen mellem jordegenskaber og stofspecifikke modelparametre er undersøgt med multivariat statistik (korrelation), bilag 10, mens sammenhængen mellem jordegenskaber og hydrauliske modelparametre er beskrevet ved brug af neural netværksteknik, bilag 5.

I korrelationsanalysen til binding og nedbrydning er der brugt målte værdier for jordegenskaber mens der til multivariat korrelationsanalyse til udvaskningsresultaterne er brugt summerede jordegenskaber for den øverste meter af hvert profil (afsnit 3.2). Ved tolkning af variablenes betydning i korrelationsanalysen, må man være opmærksom på at nogle data udgør såkaldte lukkede datasæt. Lukkede datasæt er f.eks. tekstur data, hvor variablene (de enkelte kornstørrelser) er normerede til 100%. Ved tolkning af sådanne data er der altid en indbygget tendens til indbyrdes negativ korrelation for variable som indgår i relativt mindre (men betydningsfulde) koncentrationer. Dette betyder at hvis korrelationsanalysen peger på at en variabel har stor positiv betydning, kan dette evt. alternativt afspejle at en anden eller andre af variablene indenfor det lukkede datasæt, har en stor negativ betydning. Det vil defor være vanskeligt i praksis at afgøre i et lukket datasæt om fx. en udvaskning stiger med faldende andel af fine bestanddele (ler og silt), eller om den stiger som funktion af stigende andel af grove bestanddele (sand og grus). Dette forhold har kun betydning for forståelsen af sammenhængene og er uden kortlægningsmæssig betydning.

Korrelationerne er foretaget til simuleret udvaskning i 2 meters dybde frem for intervallet ned til 1 meter, hvorfra data stammer. Dette skyldes at et enkelt simuleret udvaskningsresultat fra MACRO modellen i 1 meters dybde er tvivlsomt, om end der generelt er god overensstemmelse mellem de beregnede udvaskninger i 1 og 2 meters dybde (Bilag 9).

Alle de målte jordegenskaber indgår i korrelationen mellem jordegenskaber og modelparametre for at afklare hvilke jordegenskaber, der er de mest betydende. Et væsentligt udkomme af korrelationsanalysen er at afgøre hvilke egenskaber der er vigtige og hvilke der er uden eller af ringe betydning, og altså ikke behøver at blive målt. Derfor er korrelationen mellem jordegenskaber og simuleret udvaskning foretaget med de jordegenskaber som har vist sig at være mest betydende ved korrelationen til modelparametrene, netop for at demonstrere, netop for at demonstrere, hvordan få datatyper kan anvendes til prædiktion af en relativt kompliceret størrelse: den simulerede udvaskning.

### Validering og outliers

Ved den regressions metode som er anvendt her (Partial Least Squares Regression, forkortet: PLS-R eller blot PLS) optimeres udvælgelsen af "latente variable", sådan at de bedst muligt beskriver både den variabet der skal prædikteres, og det datasæt der skal bruges til prædiktionen (i dette tilfælde de iboende jordegenskaber). Det betyder at korrelationerne ofte kommer til at bestå af færre latente variable end ved andre metoder og dermed bliver enklere og lettere at fortolke. Det betyder også at der ikke stilles krav til de variable der indgår, fx. Om de er indbyrdes uafhængige eller normalfordelte, som det kan være tilfældet ved andre multivariate metoder, så som multibel lineær korrelation. De latente variable kaldes ved denne metode "PLS-komponenter" (analogt med "principal komponenter" ved principal component regression og -analyse).

Regressionerne er blevet krydsvalideret enten efter "leave one out" eller "segment" principperne. Validerings principperne går alle ud på, iterativt og ved forskellige udvælgelses metoder at fjerne objekter fra korrelationen. Herefter laves en ny korrelation og virkningen af udeladelsen undersøges. Krydsvalidering anvendes når det ikke er muligt eller er for dyrt at tilrettelægge undersøgelserne, således at der kan etableres både et læredatasæt og et valideringsdatasæt.

Outliers kan identificeres som prøver, der har stor indflydelse på korrelationen, men som dårligt lader sig prædiktere ved hjælp af korrelationen. Andre former for outliers kan være prøver, hvis egenskaber ligger udenfor det interval hvor flertallet af prøver befinder sig, eller prøver der har unormale egenskaber. Outliers kan være opstået som følge af bl.a. målefejl, og det er vigtigt altid at undersøge, hvorvidt outlierne tilhører en gruppe man netop vil finde (fx. prøver med ekstrem lav bindingsevne). Outliers fjernes fra korrelationen for at forbedre prædiktionsevnen. Ved prædiktion af "ukendte" prøver gennemføres en test for om prøverne udviser "normal" adfærd eller tilhører gruppen af outliers, således at prædiktionen ikke kan anvendes på disse. Identifikation af outliers er sket ved at vurdere den enkelte prøves indflydelse (leverage) på korrelationen i sammenhæng med korrelationens (manglende) evne til at prædiktere værdien for prøven (Y residual, fejl på de enkelte y prædiktioner), bilag 10. Figur 5 viser et plot af "leverage mod Y residual" hvor prøve 14 er en outlier. Prøve 14 udviser en relativ stor fejl på prædiktionen af prøvens værdi samtidig med at prøven har høj indflydelse på korrelationen (leverage). Prøve 3 derimod er ikke en outlier, idet prøven på trods af den dårlige prædiktion (høj Y residual) ikke har indflydelse på korrelationen. I sidstnævnte tilfælde ville det være forkert at fierne prøven, idet denne er med til at beskrive usikkerheden på korrelationens prædiktioner.



**Figur 5.** Prøvernes indflydelse (Leverage) på korrelationen mod fejlen ved korrelationens prædiktion af prøvens værdi (Y Residual). Plottet bruges ved udpegning af outliers i forbindelse med en PLS korrelationsanalyse.

Outliers opstår sædvanligvis ved at nogle prøver udviser en unormal "adfærd" for eller imellem de variable der har betydning for korrelationen. Hvis det fx. var sædvanligt at prøver med højt c-total indhold også havde et højt lerindhold, og har disse to variable stor betydning i korrelationen, vil prøver med f.eks. højt indhold af c-total og lavt lerindhold typisk være outliers. Outliers kan også opstå hvis data ligger i yderkanten af den variationsbredde der er defineret for korrelationen, dvs. hvis det er en eller få prøver der giver en ekstra udstrækning af variationsbredden for korrelationen. Endelig kan outliers opstå ved analysefejl eller prøveudtagningsfejl. I sidstnævnte tilfælde skal outliers fjernes helt fra datasættet. Det er meget væsentligt at outliers i én korrelation, ikke nødvendigvis er outliers i en ánden. De enkelte korrelationer vil udvise forskellig afhængighed af de samme variable, og en "skæv" variationsbredde i én model vil måske slet ikke slå igennem i en ánden.

Selv om man naturligvis, på grundlag af rådata (fx. bilag 4), kan få ideer til hvad der er årsagen til at de pågældende prøver er outliers, kan dette let medføre fejlslutninger, idet det er meget vanskeligt at overskue mere end to variable på en gang. I stedet kan man projicere outliers ind på korrelationsresultatet, se hvordan de plotter i forhold til de øvrige prøver i korrelationen, samt forsøge at tolke deres egenskaber i det reducerede variabel rum ved hjælp af en forståelse af de latente variables betydning, se figur 10.1, 10.8 og figur 10.9 i bilag 10.

# 4. Resultater

Det er vurderet hvor godt de undersøgte lokaliteter og data afspejler de områder, hvor de er beliggende, og tilsvarende hvor variable jordegenskaberne er i undersøgelsesområderne.

Der gives også et overblik over hvilke jordegenskaber der er nødvendige for at kunne identificere særligt pesticidfølsomme områder, hvilke jordegenskaber der kan undværes i denne sammenhæng, samt hvor godt de fire modelstoffer repræsenterer pesticider som helhed. Et væsentligt aspekt i vurderingen af pesticiders skæbne i jorden er de bindingsog nedbrydningsprocesser der påvirker indholdet af pesticid i jordvæsken. Da disse processer mere eller mindre udpræget virker over tid er effekten af dem grundlæggende afhængig af hvor lang tid pesticidet opholder sig i de øverste jordlag, hvor hovedparten af bindingen og nedbrydningen normalt foregår. Derfor er disse processers afhængighed af pesticidets opholdstid og opholdstidens afhængighed af lagenes hydrauliske egenskaber undersøgt. De sammenhænge der er fundet i data, som forklarer afhængigheder mellem binding, nedbrydning og hydrauliske egenskaber, og jordegenskaber, gennemgås en efter en, idet de ses i perspektiv af "opholdstid", med MTB og MCPA som eksempler på analyserne.

# 4.1 Repræsentativitet

En sammenligning på tværs af landskabselementtyperne af udgravningerne viser, at de, med undtagelse af morænesandet inden for Bakkeøerne og Weichselmorænefladerne, er forskellige med hensyn til typen og fordelingen af sedimentære facies (figur 6).

Morænesandet består af strukturløse, sandede blandingsbjergarter. Klassifikationssystemet for sandede blandingsbjergarter er dog mindre detaljeret end for vandtransporterede sorterede sedimenter. Klassifikationen afspejler således ikke de konstaterede variationer i ler- og siltindhold, og tilstedeværelsen af sandlinser og konstateret i udgravningerne indenfor sprækker. der er Bakkeøerne po Weichselmorænefladerne.

Det er fundet at blandingsbjergarterne er mere finkornede i udgravningerne på morænefladerne i Vendsyssel end indenfor de to øvrige landskabselementer med morænesand. Da der på "morænesandslokaliteterne" også forekommer smeltevandssand og flyvesand, er den geologiske variabilitet, med udgangspunkt i udgravningerne, større inden for bakkeøerne og Weichselmorænefladerne end inden for de øvrige typer af landskabselementer.

Andelen af grovkornede sedimenter falder fra alluvialkeglen over den proximale til den distale smeltevandsslette, figur 2.1 i bilag 2.

Samlet vurderes de undersøgte lokaliteter at afspejle både karakteristika og variation inden for de respektive landskabselementtyper.



**Figur 6**: Udbredelse af facies i opmålte profilvægge i udgravninger inden for syv undersøgte geologiske varianterindenfor de 6 landskabselementtyper. Fordelingen baserer sig på en opmåling (i m<sup>2</sup>) af de sedimentære facies fra C-horisonten og i nogle tilfælde også fra B-horisonten. Faciesfordelingerne og deres variationsbredde er karakteristisk for landskabselementtyperne. Dmh: homogen, matrix-understøttet diamikt; Gd: homogen eller dårligt lagdelt grus; Gt: trugskrålejret grus; Sh: homogen sand; Sp: planar skrålejret sand; St: trugskrålejret sand; SI: lavvinklet skrålejret sand; Sv: vandret lamineret sand; Sr: krydslamineret sand; s: sand hvori primære strukturer ikke kan erkendes på grund af jordbundsudvikling eller lignende; Fv: vandret lamineret ler og silt; Fh: homogen ler og silt.

### Georadar

Georadarundersøgelserne viser, i overensstemmelse med de geologiske observationer i boringer og udgravninger, at den geologiske variabilitet er lille inden for alluvialkeglen, og de proximale og distale dele af smeltevandssletten. Variabiliteten er moderat til stor inden for Yoldiafladen, for morænesand og smeltevandssand på bakkeøerne, og for Weichselmorænefladen.

Fuldprofilerne og variabilitetsmarkerne er ud fra en samlet georadarmæssig og geologisk vurdering repræsentative for store dele af profillinierne inden for Yoldiafladen, alluvialkeglen og de proximale og distale dele af smeltevandssletten.

Fuldprofilerne og variabilitetsmarkerne er derimod ikke repræsentative indenfor de øvrige landskabselementer: Inden for bakkeøerne og morænefladerne består den umættede zone, udover af morænesand, af smeltevandssand, flyvesand, moræneler og (sandsynligvis) ferskvandssand, der lithologisk og dannelsesmæssigt er forskellige fra morænesand. Det muligt at kortlægge disse varierende jordarter med en kombination af georadar og boringer på bakkeøerne og morænefladerne og dermed at underinddele bakkeøen og morænefladerne i særegne områder med hensyn til den geologiske sammensætning i den umættede zone. Men for disse landskabselementtyper er variabilitetsmarkerne og fuldprofilerne kun eksempler.

### Jordbunden

På Yoldiafladen er jordbunden udviklet meget varierende afhængig af dræningsgraden samt lokaliteternes vegetations- og dyrkningshistorie. Dette er karakteristisk for senglaciale marine aflejringer med højtliggende grundvandsspejl. Hyppigst forekommende er de såkaldte sure brunjorder. Profilbeskrivelserne på de tre undersøgelsesmarker på Yoldiafladen er i kvalitativ overensstemmelse med databaseoplysninger om andre jordbundsprofiler indenfor landskabselementet.

På hedesletten (inkl. alluvialkegle, proximal og distal smeltevandsslette) er der udviklet karakteristiske podsolprofiler med akkumulering af humus og jern- og aluminiumoxider i B-horisonten (se de respektive datarapporter). Profilbeskrivelserne for de seks lokaliteter på Karup hedeslette og de tre på Tinglev hedeslette er i kvalitativ overensstemmelse med databaseoplysninger om andre jordbundsprofiler indenfor de samme landskabselementer. Jordbundprofilernes modenhed og udviklingsdybde varierer en del men svarer til, hvad man erfaringsmæssigt kan forvente af pedologisk variation indenfor hedesletten. Det er med den aktuelle variation ikke muligt at skelne mellem alluvialkeglen og de proximale og distale smeltevandssletter på pedologisk grundlag.

På bakkeøerne Skovbjerg og Esbjerg er der undersøgt pedologiske profiler for både morænesand (MS) og smeltevandssand (DS). Profilerne på morænesand er med deres naturlige lave lerindhold pedologisk karakteristiske ved at være i en moderat fase af podsoludvikling, figur 7. Bakkeøernes store jordbundmæssige og teksturelle variation vurderes at være godt dækket for MS med de aktuelle lokaliteter, jf. tabel 2.1 i bilag 2. Den typiske pedologiske udvikling for DS på bakkeøerne er ligeledes podsolering. De beskrevne lokaliteter er repræsentative for DS, idet jordene har forskellig dræningsgrad og udviklingsdybde.

Weichsel morænesand er undersøgt på marker på moræneflader i Djursland, Himmerland og Vendsyssel. De beskrevne jorde har gennemgået pedologiske udviklinger, hvor forbruning ved forvitring og initial podsolering (brunsol til brunpodsol) er karakteristiske. Der er ikke foregået lernedslemning, og der er ikke naturligt kalk tilbage. Blandt de beskrevne jorde er nogle veldrænede og andre moderat dårligt drænede. På dette grundlag betragtes de undersøgte jorde som karakteristiske for morænesand indenfor dette landskabselement.



Figur 7. Profil i sandjord som viser de karakteristiske rustfarvede udfældningsniveauer.

Sammenfattende er den pedologiske karakteristik og udvikling på de undersøgte lokaliteter således karakteristisk for de enkelte landskabselementtyper.

### Kornstørrelser

Kornstørrelsesmæssigt er den største forskel mellem Yoldia- og hedeslette aflejringerne sandfraktionernes indbyrdes fordeling, figur 2.1 i bilag 2. På Yoldiafladen er der karakteristisk et stort finsandsindhold og sjældent mere end 5% grovsand. På hedesletten er der derimod altid et betydeligt indhold af grovsand, mens finsandsindholdet normalt er under 10%. Begge landskabselementer adskiller sig fra Weichsel moræneflade og Bakkeø, hvor sandfraktionerne er meget dårligt sorterede og har hovedvægt på mellemsand.

Kornstørrelsesfordelingerne (især konstant lerindhold indenfor de enkelte landskabselementer) tyder, lige som de bekræftende geoelektriske målinger, på at hedesletterne og Weichsel morænefladerne er relativt homogene. Yoldiafladen og bakkeøerne er derimod heterogene. Denne heterogenitet skyldes bl.a. at lerindholdet varierer indenfor korte afstande og at der ofte forekommer vekslende lag af ler, silt og sand.

De vestjyske landskabstyper (Bakkeø og Hedeslette) har humusindhold over gennemsnittet for sandjorde. Yoldiafladen ligger tæt på gennemsnittet for de sandede jorde og jordene i det unge moræne landskab har det laveste akkumulerede indhold af humus. Analysen viser også at jordene på hedesletten har det laveste indhold af ler og silt og at det unge morænelandskab har størst indhold af ler og silt. En sammenligning mellem det geologiske kortgrundlag og sandjordsprofilerne i profildatabasen viser relativt

god overensstemmelse mellem indholdet af ler og klassifikationen af den kortlagte jordtypekornstørrelse, tabel 1.3 og 1.4 i bilag 1.

Det vurderes således at sammenligningen mellem forsøgslokaliteternes teksturelle, geologiske og pedologiske egenskaber og oplysningerne i de landsdækkende jordbundsdatabaser viser, at de udvalgte lokaliteter er karakteristiske og repræsentative for de landskabselementer de repræsenterer.

#### 4.2 Variabilitet

De geoelektriske EM38 undersøgelser, som afspejler forhold i de øverste 1 - 2 m u. t., viser at der er en relativ lille variabilitet inden for alluvialkegle, proximale og distale smeltevandssletter samt de konkret undersøgte lokaliteter på Weichsel morænefladen, mens variabiliteten er større inden for Yoldiafladen og på bakkeøer.

Georadarundersøgelser har, sammenholdt med geologiske data fra udgravninger og boringer, vist, at den laterale geologiske variabilitet (i mange tilfælde helt ned til dybder på 10–15 m.u.t.) på alluvialkegle, proximale og distale smeltevandssletter er relativt lille mens den inden for Yoldiafladen, bakkeøer og Weichsel morænen er moderat til relativ stor. Uoverensstemmelsen i vurderingen af variabiliten på Weichsel morænen mellem EM38 og georadarundersøgelserne skyldes antagelig enten, at der er en større variation i underjorden (i dybder under EM38 metodens indtrængningsdybde) og/eller at datagrundlaget for vurderingerne ikke er delvist forskelligt, da der også indgår data fra lokaliteter, hvor der kun er målt med den ene metode. Ved undersøgelser på andre lokaliteter på Weichsel morænefladen (Greve et al. 2003) har også EM38 undersøgelser vist at der kan være stor variation.

En vurdering af teksturdata fra de landdækkende jordbundsdatabaser viser, specielt på basis af lerindholdet, at der inden for alluvialkegle, proximale og distale smeltevandssletter, samt Weichsel morænefladen er en relativ lille variabilitet mens den er større inden for Yoldiafladen og på bakkeøer.

Undersøgelserne viser desuden, at landskabselementerne er karakteristisk forskellige med hensyn til kornstørrelsesfordeling og humusindhold. Fordelingerne på sandfraktionerne er forskellig, idet Yoldia- og hedesletteaflejringerne er velsorterede, mens Weichsel morænefladen og Bakkeøerne har dårligt sorterede sandfraktioner.

Med det indsamlede materiale og analyser fra de seks variationsmarker (1,5–3 ha) er det ikke muligt at vurdere, om der er forskel i variabiliteten markerne imellem med en traditionel variogramanalyse, således at der kan opstilles et kritisk range for observationernes gyldighed. Derfor er data præsenteret i boxplot, som viser at variationen som hovedregel er af samme størrelse på de forskellige marker, og at det i højere grad er det absolutte niveau af den pågældende jordegenskab, der er forskellig fra mark til mark, bilag 3. Kun for EM38 målingerne, hvor der er et meget stort antal punktmålinger, har det været muligt at beskrive variabiliteten og forskelle i variabilitet på mark- og landskabselementtypeniveau med variogrammer, tabel 7.

Tabel 7. Oversigt over geostatistiske parametre fra variogramundersøgelser på 8 geologiske varianter indenfor 6 landskabselementtyper, baseret på måling af elektrisk ledningsevne, EM38.

	Mean	Range	Sill	Nugget	Variationskoef. *
	mS/m	m	(mS/m) <sup>2</sup>	(mS/m) <sup>2</sup>	%
Yoldiaflade (YS)	7	200	14	1,5	53
Alluvialkegle (TS,TG)	4	40 / 200	0,7	0,2	21
Proximal slette (TS; TG)	4	20	0,3	0,2	14
Distal slette (TS, TG)	4	200	1,0	0,7	25
Bakkeø (MS)	10	200	22	2	47
Bakkeø (DS)	8	250	10	1	30
Weichsel Djurs/Him (MS)	6	200 / 50	1,5	1	20
Weichsel Vendsyssel (MS)	6	200 / 50	0,5	1	11

\*) Variationskoefficienten =  $\frac{\sqrt{Sill}}{Mean}$  \*100

Variogramundersøgelserne viser bl.a. at der er kritiske "range" mellem 20 og 250 meter for de forskellige landskabselementer, mens variationskoefficienten varierer fra 11 - 53 %. Hovedreglen er således, at arealer kan tillægges værdier fra punktdata op til en afstand af 200m, idet sikkerheden falder fra 1 i punktet til 0 i 200 meters afstand.

#### Variabilitet relateret kortlægningskriterier for følsomhed

Gennem projektets undersøgelser er det vist, at de jordegenskaber, der bærer det klareste udsagn om den generelle grad af følsomhed overfor udvaskning af pesticid, er indholdene af humus (organisk kulstof / 0,57), silt og ler: de primære zoneringsparametre. Det er disse jordegenskaber, der ligger til grund for de overvejelser og eksempler på karakterisering og zonering af profiler og arealer, som er vist i kapitel 4. Resultaterne viser således, at det er den zonering, som baserer sig på indholdet af humus, silt og ler, der vil kunne foretages som en samlet ensartet indsats.

Derfor er den følgende variabilitetsanalyse netop koncentreret om variationen i indholdet af humus, silt og ler, samt udvaskningen.

Variabilitetsundersøgelserne er gennemført for projektets variationsmarker, hvor der er udtaget og karakteriseret prøver fra jordbundshorisonterne A (muldlaget) og B (udfældningslaget). Der er etableret "variationsmarker" på 6 af de 8 undersøgte landskabselementer.

Humusindholdet og summen af ler- og siltindholdet i den øverste meter er summeret på dette grundlag og justeret i forhold til volumenvægt, hvorefter der er udregnet et gennemsnit for kvadratnetsprofilerne. Dette udgør et fælles grundlag for vurdering af variabiliteten i de samlede profildybder og gør det muligt at give et meget groft estimat af den relative udvaskning ved hjælp af den etablerede korrelation.

For at få et estimat (groft) af udvaskningen er prøver, der passer dårligt til korrelationsmodellen fjernet. Det drejer sig om ca. 15 prøver, og det er ikke undersøgt, hvorfor disse prøver er outliers. Statistisk er det forkert at fjerne disse prøver, men da formålet er at skabe en grov udvaskningsmodel, der kan bruges til at rangordne jordene på variabilitetsmarkerne imod hinanden, vurderes fremgangsmåden at være brugbar og acceptabel. Ved tolkningen skal der imidlertid tages hensyn til dette forhold.
For at gøre det muligt at vurdere heterogeniteten indenfor den enkelte undersøgelsesmark er middelværdi og spredning illustreret, Bilag 3B, både for hvert cluster af dataindsamlingspunkter (5 punkter tæt ved hinanden) og for marken som helhed, for hver samhørende værdi af humus, ler og silt, og modelleret relativ udvaskning. Middelværdi og spredning giver i de fleste tilfælde et acceptabelt estimat af variabiliteten (sammenfald mellem middelværdi og medianværdi), til trods for at værdierne ikke kan forventes at være normalfordelte, fx. figur 8.

Variabiliteten for hver af markerne er vist på et "kort", hvor hvert punkt (dataindsamlingspunkt) er afsat med UTM koordinater, og hvor farvekoden angiver interpolerede værdier. Endelig benyttes der kort med angivelse af EM38 målingerne for de pågældende marker.



*Figur 8.* Den samlede variation i humusindhold på Ulsted marken er større end variationen indenfor de fire clustre af tætliggende målepunkter på marken.

Den korrelerede relative udvaskning har i dette tilfælde en betydelig usikkerhed (mere end 20%), og kan kun anvendes i en grov tolkning af markens variabilitet. Det vil naturligvis altid være mest korrekt at vurdere direkte på grundlag af de målte variable (humus samt ler og silt). Til gengæld vil tendenser, som fremstår <u>til trods</u> for denne usikkerhed, have væsentlig udsagnskraft.

De kort, som er produceret, viser en sammenhæng mellem fordelingerne af udvaskning, humus, og ler og silt. Dette er ikke overraskende, da udvaskningen netop er predikteret ud fra disse værdier. Selv om de sammenhænge, som er illustreret på kortene, således er indbyggede og ikke viser ny viden, kan kortene imidlertid anvendes til at vurdere den indbyrdes betydning af disse variable i forskellige scenarier.

<u>Variation mellem marker.</u> Der er beregnet gennemsnit og 95% konfidensinterval for hhv. humusindhold, indhold af ler og silt, og beregnet udvaskning på de 6 marker:

*Humus*, figur 9. Det gennemsnitlige humus indhold varierer mellem ca. 12 og 22 kg/m<sup>2</sup>. Ulsted marken har det laveste gennemsnitlige humusindhold, men en betydeligt variation, mens Sjørup marken har næsten tilsvarende lavt humusindhold og den mindste variation. Alle marker, undtaget Ulsted, adskiller sig signifikant fra Sjørup. Der er ikke signifikante forskelle mellem de øvrige marker, som har en gennemsnitsværdi på ca. 18 kg/m<sup>2</sup> og en betydelig spredning, ved samlet vurdering af alle data fra markerne.

*Ler og silt*, figur 10. Indholdet af ler og silt varierer fra under 100 kg/m<sup>2</sup> til ca. 350 kg/m<sup>2</sup> i gennemsnit. Stubkær, Simmelkær og Kølvrå har både de laveste indhold og mindste variationer i ler og silt indhold. Sjørup, Astrup og Ulsted adskiller sig signifikant fra Stubkær, Simmelkær og Kølvrå markerne. Der er en betydelig spredning og et relativt lavt

gennemsnitsindhold indenfor Ulsted marken, mens gennemsnitsindholdene i Sjørup og Astrup markerne er højere (og ligeledes med en betydelig spredning).



*Figur 9.* Middelværdi og 95% konfidensinterval for humusindholdet på 6 undersøgelsesmarker.



*Figur 10. Middelværdi og 95% konfidensinterval for ler- og siltindhold på 6 undersøgelsesmarker.* 

Udvaskning, figur 11. Det er Ulsted, Kølvrå og Simmelkær markerne der har de højeste beregnede udvaskninger, hvilket især er sammenfaldende med/afledt af lavt ler og silt indhold. I Ulsted er der den største variation både i humus, og ler og silt indholdet, hvilket tilsammen medfører at Ulsted er den mest følsomme lokalitet. For Kølvrå og Simmelkær er der et lavt og ensartet indhold af ler og silt, mens humus indholdet ligger i mellemområdet.

Sjørup og Astrup markerne har relativt lave gennemsnitlige udvaskninger. I Sjørup er lavt humusindhold kompenseret af de højeste indhold af ler og silt. I Astrup forudskikker både højt humus-, og ler og silt indhold den lave udvaskning.



Figur 11. Middelværdi og 95% konfidensinterval for relativ beregnet udvaskning på 6 undersøgelsesmarker.

Der er en klar tendens til at variationen i relativ udvaskning stiger med gennemsnitsværdien, hvilket betyder at de lokaliteter, som samlet set er mest heterogene, gennemsnitligt er de mest følsomme, hvilket er en meget væsentlig sammenhæng i zoneringsøjemed.

<u>Variabiliteten for de primære kortlægningsparametre på Ulsted marken.</u> Som eksempel på dokumentationen af variabiliteten vises her Ulsted marken, figurerne 8, 12 og 13, som viser de primære zoneringsparametres værdier, gennemsnitsværdier og 95% konfidensintervaller for hhv. de fire clustre (hvor der er kort afstand mellem 5 prøvetagningssteder) og for marken som helhed. Figurerne 14 og 15 illustrer variabiliteten på tematiske kort. Yderligere dokumentation for Ulsted og de øvrige marker findes i bilag 3B.

Ulsted er præget af betydelig heterogenitet for såvel humus som ler og silt. Variationen er på markskala, idet variationen indenfor de enkelte clustre er betydeligt lavere. Generelt er marken præget af et intermediært indhold af ler og silt, men med et lokale indslag omkring cluster 4 af højt ler og silt indhold, og med betydelig variation, figur 12. Humus indholdet varierer betydeligt indenfor marken, men er forholdsvis ensartet indenfor de enkelte clustre.

Samlet set medfører dette en betydelig variation i relativ udvaskning. Cluster 2 har højest udvaskning, figur 13, forårsaget af meget lavt indhold af ler og silt, og lavt humus indhold.



*Figur 12.* Målinger, middelværdi og 95% konfidensinterval for ler- og siltindholdet på Ulsted marken og i de 4 clustre af tætliggende målepunkter.



*Figur 13.* Målinger, middelværdi og 95% konfidensinterval for relativ beregnet udvaskning på Ulsted marken og i de 4 clustre af tætliggende målepunkter.

Også udvaskningen varierer mest, når marken vurderes som helhed, idet der, bortset fra cluster 2, er meget lille variation indenfor clustrene, figur 13. Samlet set varierer udvaskningen mellem 0 og 1.4 baseret på/i forhold til kvadratnetprofilerne, hvilket betyder

at selve marken (marken som helhed) er mere heterogen end sandjordsprofilerne i kvadratnettet.



Figur 14.. Geografisk fordeling af humus- samt ler- og siltindhold på Ulsted marken.



*Figur 15.* Geografisk fordeling af relativ beregnet udvaskning og EM38 målinger på Ulsted marken.

Udvaskningskortet, figur 15 viser et område, som strækker sig fra sydøsthjørnet ind over midten af kortet, med relativ høj udvaskning, medens der de øvrige steder på marken er lav beregnet udvaskning. Området med relativt høj udvaskning afspejles især på humus kortet, figur 14, men også i mindre omfang på ler og silt kortet. Em38 kortet, figur 15, viser en resistivitetsfordeling som nogenlunde svarer til fordelingen af ler og silt, denne fremgår dog ikke klart af kortet for ler og silt, da skala er sat til en fælles skala for alle ler og silt kort. og afspejler ikke forskellene i humusindhold (EM38 er ikke følsom overfor et lavt humusindhold). Lavt humus indhold er sammenfaldende med lavt indhold af ler og silt, hvilket forstærker indslagene med høj udvaskning i figur15.

Den store heterogenitet i udvaskningen på Ulsted marken, der understøttes af EM38 målingerne, medfører at der her er behov for at udtage relativt mange prøver, hvis størrelse og fordeling af sårbarheden skal bedømmes på dette grundlag Imidlertid er det kun et lille antal datapunkter, hvor den beregnede udvaskning er særligt høj, som en

afspejling af variationen i humus-, og ler og silt indhold. Kortlægning af følsomheden indenfor Ulsted-lignende arealer kan derfor foretages på basis af EM38, suppleret med støttepunkter for humusindhold. Variation på EM38 kan i nogen grad, suppleret af kendskab til landskabselementet og variationerne i humusindhold i overjorden, hjælpe til udvælgelsen af disse datapunkter for humusindhold.

<u>I en samlet vurdering er</u> Astrup-, Sjørup- og Stubkærmarkerne er de mindst sårbare af de undersøgte marker, som også udmærker sig ved at variabiliteten er temmelig lav.

Indenfor Ulsted marken er der en betydelig variation i udvaskningen og marken er samlet set den mest følsomme af lokaliteterne. Dette skyldes et delområde på marken med lavt humus-, og ler og silt indhold. Relativt vurderes Ulsted marken at være et særligt følsomt område, indenfor hvilket der er delområder, som relativt er <u>meget</u> følsomme. De lokale <u>meget</u> følsomme områder er sammenhængende, figur 15, hvilket gør dem forholdsvis nemme at identificere/kortlægge.

Også Kølvrå og Simmelkær markerne er relativt følsomme overfor (relativ, simuleret) udvaskning, men har forholdsvis ringe variation i udvaskning og ingen særligt følsomme delområder indenfor markerne.

Med henblik på dokumentation af følsomheden overfor udvaskning (gennem analyse) vil det kun for Ulsted-situationens vedkommende være nødvendigt med en tæt prøvetagning. Kendskab til variationerne i humusindhold i A-horisonten vil, sammen med EM38 målinger, kunne give et fingerpeg om den nødvendige prøveudtagningstæthed.

På grundlag af variabilitetsanalysen af de primære zoneringsprametre er det de områder som er mest heterogene mht. indholdet af især ler og silt, men også humus, som er de mest følsomme overfor udvaskning af pesticid. Dersom et områdes store variabilitet er kendt i forvejen kan det afgrænses og dets særligt følsomme karakter fastlægges på grundlag af en "værst mulig"-karakteristik. Alternativt kan delområder med forskellige grader af følsomhed overfor pesticidudvaskning kortlægges gennem tæt prøvetagning.

Følsomheden overfor udvaskning af pesticid kan, for de øvrige undersøgte lokaliteter, som alle er forholdsvis mindre følsomme end Uldsted marken, karakteriseres ved hjælp af EM38 og relativt få prøver.

De marker, som ikke er særligt følsomme overfor udvaskning af pesticid, er forholdsvis homogene med få outliers i korrelationen af relative udvaskning.

Ud fra undersøgelserne af fuldprofiler og undersøgelsesmarker vurderes det at de mest heterogene områder, især vedr. ler-silt fraktionen (men også vedr. humus), også er de mest følsomme, og at disse kan udvælges enten alene ud fra et kendskab til stor heterogenitet på pågældende landskabstype, eller ved dokumentation gennem en meget tæt prøvetagning. De mere ensartede og mindre følsommearealer kan identificeres ud fra et mere begrænset antal prøver/observationer.

# 4.3. Kendte sammenhænge mellem jordegenskaber

Der er opbygget et stort og sammenhængende datasæt for danske sandjorde. Flere almindeligt kendte sammenhænge mellem jordegenskaber er illustreret med dette datasæt, bilag 7. Disse sammenhænge underbygger datasættets troværdighed og mindsker antallet af kritiske jordegenskaber der i den aktuelle sammenhæng rummer selvstændig information.

# 4.4. Vandets opholdstid

Jordens hydrauliske egenskaber har indflydelse på vandtransporten og hvor længe jordvæsken opholder sig i den umættede zone før den når grundvandet (fx. illustreret ved pF2 i retentionskurver, figur 16). Opholdstiden i muldlaget (A-horisonten) og en evt. humusholdig Bh-horisont er særlig vigtig, idet det især er her pesticid bindes og/eller nedbrydes. I det følgende præsenteres resultater om sammenhæng mellem jordegenskaber og hydrauliske modelparametre, samt om hvilke jordegenskaber der betyder mest for vandets opholdstid i de øverste jordlag.

### Laboratorieanalyser

Jordens evne til at tilbageholde vand (vandretention), porøsitet, volumenvægt, samt den mættede og umættede hydrauliske ledningsevne er bestemt.



*Figur 16.* Middelværdier for vandretentionen (n=3) i Ap- (pløjelaget) og C-horisonterne for 8 geologiske typer profiler indenfor 6 landskabselementer, hvor der er gennemført et fuldt undersøgelsesprogram.

Overordnet er retentionsforløbet i A-horisonten mere ensartet end i C-horisonten for alle landskabselementer (figur 16), idet det indarbejdede indhold af organisk materiale og mekanisk jordbehandling har betydning for vandretentionen i A-horisonten. I C-horisonten er teksturforskellene relativt store og der er generelt en ret dårlig vandholdende evne for de mest sandede lokaliteter (Yoldiafladen, Alluvialkeglen, Proximal og Distal smeltevandsslette, samt sandet Bakkeø). De mere ler- og siltholdige jorde (Bakkeø og Weichsel moræneflade) har bedre vandholdende evne, bilag 5.

#### Jordegenskaber der beskriver de hydrauliske modelparametre

De hydrauliske egenskaber for jorden, som benyttes til simulering af udvaskning, er beskrevet ved de modelparametre i de hydrauliske funktioner, der indgår i MACRO modellen. Disse modelparametre er så korreleret til jordegenskaber ved en "neural netværks"-korrelation. Det neurale netværks evne til at forudsige modelparametrene er vist i figur 17.

De jordegenskaber der benyttes som input til det neurale netværk er: retentionskurver, kornstørrelsesfordeling, volumenvægt, organisk kulstofindhold, dybde og landskabselement.



**Figur 17.** Hydrauliske modelparametre. Parametrene er tolkede (fittede / tilpassede) på basis af projektets målinger af hydrauliske data og afbildet i f.t. hydrauliske modelparametre som er fremkommet med neural netværkskorrelation. A: porestørrelsefordelingskoefficient ( $\lambda$ ); B: reciprokke grænsetension mellem mikro- og makroporer (1/h<sub>b</sub>); C: porøsitet ( $\theta_s$ ); D: vandindhold ved tension h<sub>b</sub> ( $\theta_b$ ); E: residualt vandindhold ( $\theta_r$ ); F: mættet hydraulisk ledningsevne (k<sub>s</sub>); G: hydraulisk ledningsevne ved tension h<sub>b</sub> (k<sub>b</sub>). Data stammer fra 64 horisonter indenfor projektets 24 undersøgte profiler.

For de vigtigste parametre ( $K_s$  og  $K_b$ ) fremkommer der en klar korrelation af de hydrauliske modelparametre med neural netværksteknik, figur 17, idet der er en tydelig lineær relation. Korrelationen af (1/hb) og ( $\theta_r$ ) er derimod ikke god. Disse parametre har imidlertid kun ringe betydning for simuleringen af udvaskning (bilag 9). Variationsintervallet på outputtet fra den neurale netværkskorrelation er mindre end variationen på feltdataene (fittet / tilpasset). Dette er en konsekvens af den "bootstrap" procedure (hvor det neurale netværk gentagne gange er optimeret på tilfældig udvalgte 2/3 af data og testet på den sidste 1/3 af data), som benyttes ved neural netværkskorrelation (Schaap et al., 1998). Imidlertid er der benyttet gennemsnitsværdier for de hydrauliske parametre (beregnet ved neural netværkskorrelation) frem for variationsintervaller i de deterministiske simuleringer, hvorfor det vurderes at forskellen i variationsbredden er af mindre betydning for den simulerede udvaskning. Det anses således for forsvarligt at benytte hydrauliske parametre, som er fremkommet ved neural netværksteknik, i simulering af udvaskning.

De vigtigste jordegenskaber for prædiktionen af de hydrauliske modelparametre med neurale netværk er kornstørrelsesfordeling, volumenvægt og indholdet af organisk kulstof.

#### Simuleret udvaskning for 9 kombinationer af k-K<sub>f</sub> værdier

Udvaskningen er simuleret med fastholdt (konstant) binding og nedbrydning for at finde ud af hvilke jordegenskaber og værdier af jordegenskaber, der med udgangspunkt i de hydrauliske forhold, giver den største simulerede udvaskning. Resultaterne for simulering af udvaskningen af de ni kK<sub>f</sub>-kombinationer (170 sandjordsprofiler fra profildatabasen) er givet i figur 18 og 19.



*Figur 18.* Lineplot af den relative simulerede pesticidkoncentration i 2 meters dybde for de ni  $kK_{r}$ -kombinationer for 170 sandjordsprofiler fra profildatabasen.

Ved simulering af udvaskning for de ni kK<sub>f</sub>-kombinationer er det generelt i de samme profiler der fremkommer hhv. høj og lav udvaskning. Det absolutte niveau af udvaskning er afhængig af hvilken kK<sub>f</sub>-kombination der anvendes i simuleringen, hvorimod variationen ved et bestemt kK<sub>f</sub>-sæt er et udtryk for forskellen i profilernes hydrauliske egenskaber. På figur 18 illustreres dette af at kurverne generelt har samme fluktuation, mens figur 19 yderligere viser, at der for de fleste kK<sub>f</sub>-kombination er tendens til lineær sammenhæng (eksemplificeret i forhold til kombination nr. 2). Også dette afspejler at høj / lav hydraulikbestemt udvaskning overvejende foregår i de samme profiler for alle kK<sub>f</sub>-kombinationer.



**Figur 19**. Krydsplot af den relative simulerede koncentration i 2 meters dybde for otte  $kK_r$ -kombinationer for 170 profiler fra profildatabasen mod  $kK_r$ -kombination 2. Tykkelsen af A-horisonten for de enkelte profiler er angivet med farver jævnfør den angivne skala.

Figur 19 viser at der er lineært sammenfald mellem den simulerede udvaskningsgrad af  $kK_{f}$ -kombination 2 i.f.t. 3, 5, 6, 8 og 9. Dette betyder at det for disse kombinationer af k og  $K_{f}$  er i de samme profiler der er hhv. høj og lav simuleret udvaskning. Tendensen er den

samme for kK<sub>f</sub>-kombination 1, 4 og 7, selvom der er tendens til to grupper i forhold til nr. 4, og meget stor spredning i punkterne for kombinationen af nr. 2 og 7.

#### Vigtigste jordegenskaber for beskrivelsen af de hydrauliske forhold

Ved anvendelse af neurale netværk, er det som tidligere angivet, ikke muligt at få information om hvilke sammenhænge der er i datasættet, og hvilke variable der har hvilken indflydelse på de hydrauliske input parametre. For at få denne information er det forsøgt at lave en multivariat korrelationsanalyse på et at kKf kombinationerne, og der er her valgt nummer 2 der giver en god spredning på udvaskning. Ved at fastholde binding og forsvinding er udvaskningen alene afhængig af de hydrauliske forhold.

Ved at opdele de 111 indgåede profiler fra profildatabasen i tre klasser baseret på højt lerindhold, mellem lerindhold og lavt lerindhold, er det muligt at etablere en god korrelation mellem udvaskningen og kulstof, tekstur og volumenvægt.

Hvis man ser på regressionen for de tre klasser, figur 20, viser det sig at de variable der har den største betydning har nogenlunde samme indflydelse på hydraulikken. Det gælder ler, sil og volumenvægt, der alle har en negativ regression, mens der for humus vedkommen er en klasse hvor denne variabel ikke har betydning, den høje lergruppe, og to hvor der er positiv regression. For de øvrige variable fremstår et mere rodet billede, og ingen af disse har stor betydning for alle klasserne.



**Figur 20**. Den relative betydning af jordegenskaber (regressionsvektorer) for korrelationener af simuleret koncentration i 2 meters dybde for kK<sub>r</sub>-kombination 2 for henholdsvis den høje lergruppe (blå), gruppen med mellemhøjt indhold af ler(grøn) og gruppen med lavt indhold af ler(rød). Variablene er midlet over den øverste meter i profilet.

# 4.5. Binding i forhold til stoffernes opholdstid

Jordens evne til at binde pesticid har lige som de hydrauliske egenskaber betydning for stoffernes opholdstid i de øverste jordlag. I det følgende præsenteres resultater om sammenhæng mellem jordegenskaber og binding af pesticid, og en undersøgelse af hvilke jordegenskaber der i bindingssammenhæng betyder mest for stoffernes opholdstid i de øverste jordlag.

# Laboratorieanalyser

Bindingen (fordelingskoefficienten  $K_d$ ) af de fire modelstoffer er bestemt for mere end 400 jordprøver efter principperne i OECD guidelines. Resultaterne for MTB, MCPA og MTA er vist for fire udvalgte profiler i figur 21



**Figur 21**. Binding ( $K_d$ , l/kg) for MCPA ( $\blacksquare$ ), MTB ( $\bigcirc$ ) og MTA ( $\blacktriangle$ ) mod dybde for fuldprofiler (FP) på markerne Ulsted, Stubkær, Astrup og Sjørup, som repræsenterer landskabselementerne Yoldiaflade, Alluvialkegle, Bakkeø og Weichsel moræneflade. Udenfor intervallerne 0,1-15 (MCPA og MTA) og 0,2-7 (MTB) kan  $K_d$  bestemmelserne ikke vurderes kvantitativt. Bestemmelser udenfor disse intervaller er på figuren angivet med interval grænsernes værdier. Målinger som ligger på eller udenfor intervalgrænseværdier.

Bindingen af MCPA og MTB er størst i overjorden og falder generelt med stigende dybde, figur 21. Bestemmelserne af K<sub>d</sub> for MCPA og MTB er generelt gode, især for A-horisonten, hvor bindingen er størst. K<sub>d</sub> værdier under 0,2 l/kg for MTB kan ikke vurderes kvantitativt, hvorfor bestemmelserne af MTB's ganske svage binding til prøver fra de dybere jordlag er behæftet med stor usikkerhed. Bindingen af MTA har ikke noget entydigt forløb med dybden, men er generelt forholdsvis høj. K<sub>d</sub> værdier for MTA over 15 kan ikke vurderes kvantitativt. Kurverne for MTA viser at det opfører sig atypisk i forhold til MCPA og MTB, der begge viser systematisk afhængighed af dybden.



**Figur 22a**. Binding,  $K_d$  (l/kg), for glyphosat mod pH (målt i forbindelse med  $K_d$  bestemmelserne) på undersøgelsesmarkerne. Blå lodret linie viser glyphosats tredje syrestyrkekonstant (p $K_a$ ) på 5,6. Rød vandret linie markerer grænsen (som med den anvendte metode er på 160 l/kg) hvorover  $K_d$  bestemmelserne ikke kan vurderes kvantitativt.



**Figur 22b**. Værdier af binding og bindingsfunktion ( $K_d$  og  $K_f$ ) for glyphosat mod henholdsvis pH målt i opslæmninger med CaCl<sub>2</sub>, pH<sub>CaCl2</sub> ( $\checkmark$ ), og pH målt i opslæmninger med vand, pH<sub>H2O</sub> ( $\blacktriangle$ ). Data er fra litteraturstudiet /10a/. Figuren viser, i overensstemmelse med figur 22a, en tendens til stærkere binding ved lavt pH, specielt i pH-niveauet omkring den tredje syrestyrekekonstant (5,6).

Bindingen af glyphosat er stor for alle de undersøgte jordprøver. Således ligger langt de fleste  $K_d$ -værdier, som er bestemt i projektet, over den grænse hvor værdierne kan vurderes kvantitativt. Figur 22a og 22b illustrer hvordan bindingen af glyphosat afhænger af pH i opslæmninger for cirka 400 af projektets sandjordsprøver og datasættet fra litteraturstudiet. Glyphosat har fire syrestyrkekonstanter (p $K_a$ -værdier), hvoraf den tredje på 5,6 (målt i vand) ligger indenfor pH-spændet for de her undersøgte jorde. Dette betyder at ladningen ændres i forhold til pH. Det antydes på figur 22a og 22b, at bindingen af glyphosat er negativt afhængig af pH. De to figurer viser en tendens til stærkere binding ved lavt pH, specielt i pH-niveauet omkring den tredje syrestyrekekonstant (5,6).

Bindingens afhængighed af pH for de tre øvrige modelstoffer er illustreret i bilag 12. Bindingen af MTB er ikke afhængig af pH, mens der for MCPA og MTA er samme tendens til øget binding ved lavere pH som for glyphosat. MCPA har en syrestyrkekonstant på 3,07, hvorunder effekten indtræder, mens der ikke foreligger oplysninger om MTAs syreegenskaber.

### Jordegenskaber der beskriver modelparametre for binding

Der er foretaget en korrelationsanalyse for at beskrive bindingen af MTB, MCPA og MTA gennem så simple, betydningsfulde og få jordegenskaber som muligt. Ved korrelationsanalysen er der ikke medtaget prøver, hvor bestemmelsen af bindingen er behæftet med stor usikkerhed. Det betyder at der ikke er lavet en korrelationsanalyse til bindingen af glyphosat, mens 90% af data er anvendt for MCPA. For MTB og MTA er godt 50% af data blevet anvendt, idet analyserne af binding af MTB i underjord generelt har givet mange værdier som er så lave at de ikke kan vurderes kvantitativt, mens analyserne af bindingen af MTA ofte har resulteret i høje værdier over den værdi hvor de kan vurderes kvantitativt.

Det er ikke muligt at lave en samlet regressionsanalyse på det fulde datasæt for MTB, bestående af samtlige 50% anvendelige data. Prøver med Kf værdier under 0.5 skiller sig ud som en selvstændig gruppe. Regressionen er derfor udelukkende lavet på prøver der har en Kf værdi over 0.5. Gruppen af prøver med Kf værdier under 0.5 er karakteriseret ved hjælp af en principal komponent analyse, og det er testet om gruppen af prøver med en Kf værdi over 0.5 skiller sig signifikant ud fra denne. Dette blev gjort ved hjælp af Soft Independant Modelling of Class Analogies (SIMCA), og undersøgelsen viser, at stort set alle prøver med højere Kf-værdi end 0,5 skiller sig ud fra populationen med Kf-værdier under 0,5, baseret alene på de iboende egenskaber (Kf er ikke medtaget i PCA og SIMCA analyserne). Dette betyder at modellen kan bruges til at indplacere nye ukendte prøver i en af de to grupper. For den ene gruppe er værdierne af Kf under 0.5 og i den anden er de over 0.5. Den sidste gruppes Kf værdi kan prædikteres ved hjælp af nedenstående PLS-korrelation, figur 23a, mens den første gruppes Kf-værdier kan tillægges en konstant lav værdi (fx. 0).



**Figur 23a**. Målt binding ( $K_f$ ) mod korreleret binding ( $K_f$ ) af MTB. Varians forklaret: X: 87%; Y: 84%; 4 PLS-komponenter. Outliers 9/112. Outlier identifikation: se tabel 10.2 i bilag 10. Kun Kf værdier over 0.5 er anvendt i denne korrelation.



*Figur 23b.* Den relative betydning af jordegenskaber (regressionsvektorer for PLS-modellen) for binding ( $K_f$ ) af MTB. Kun Kf værdier over 0.5 er anvendt i korrelationen. "Silt" betegner her fraktionen finsilt.

Prædiktionen af MTB's binding er på figur 13a vist i forhold til målt binding. Det fremgår at data er fordelt over hele variationsområdet for Kf-værdier over 0,5. Ved brug af korrelationen kan prøver, der ved SIMCA analysen er indplaceret som hørende til populationen med Kf-værdier over 0,5, prædikteres.

Bindingen af MTB kan især beskrives ved indholdet af organisk kulstof (C-total). pH er af mindre betydning mens kornstørrelsesfordelingen, især siltindholdet, betyder lidt mere, figur 23b. Resultaterne vedr. afhængigheden mellem modelstoffernes binding og jordegenskaber er vist i tabel 8

**Tabel 8**. Jordegenskaber der benyttes til korrelation af binding ( $K_f$ ) for MCPA, MTB og MTA (og glyphosat). "+++" og "- - -": stor positiv og negativ betydning; "++" og "- -": middel positiv og negativ betydning; "+" og "- ": lav positiv og negativ betydning; "/": ringe betydning. Af bilag 10 fremgår korrelationerne for MCPA og MTA.

	C-total	рН	Ler	Finsilt	Grovsilt	Finsand1	Finsand2	Grovsand 1
Metribuzin	+++	/	/	+	1	1	1	1
MTA	1		+++	/	/	/	1	1
MCPA	+++ <sup>1)</sup>	-	1	1	1	1	1	1
Glyphosat <sup>2)</sup>	?	()	?	?	?	?	?	?

Note: <sup>1)</sup> Fjerde rod af organisk kulstofindhold (C-total) er anvendt. Det giver det bedste

resultat. Også andre transformationer har været afprøvet.

<sup>2)</sup> I figur 22a er det vist at glyphosat har forskellige bindingsegenskaber ved forskellige pH-værdier, og det er derfor ikke muligt at lave en korrelationsmodel der dækker et bredt pH-interval.

De jordegenskaber som er tilstrækkelige til indirekte at beskrive de fire modelstoffers binding er således: organisk kulstofindhold, pH og kornstørrelsesfordeling.

# Simuleret udvaskning af MTB (målt K<sub>d</sub> og fast DT50)

For yderligere at bestyrke identifikationen af de jordegenskaber som betyder mest for stoffets opholdstid i de øverste jordlag er den simulerede udvaskning af MTB fra de 24 fuldprofiler undersøgt. Simuleringerne er udført med den aktuelle binding, men med fastholdt nedbrydning for alle profilerne, hvorved udvaskningen bliver en direkte afspejling af stoffets opholdstid (se forklaring i afsnit 1.3).



**Figur 24**. Søjlediagram af den relative simulerede pesticidkoncentration i 2 meters dybde for MTB fra de 24 fuldprofiler. Simuleret med den målte binding ( $K_f$ ) og fast nedbrydning (DT50). Nedbrydningen er fastsat som 80% fraktilen af de målte forsvindingsværdier (DT50, eller 20% fraktilen af nedbrydningsraten k) for fuldprofilerne mhp. at tage udgangspunkt i en konservativt karakterisering af nedbrydningsforholdene.

De relative udvaskninger af MTB fra de 24 fuldprofiler (figur 24), hvor nedbrydningen er fastsat som 80% fraktilen af de målte værdier, viser at der er stor forskel i udvaskning mellem profilerne. De 24 profiler dækker hele variationsfeltet (udfaldsrummet) sammenlignet med resultaterne fra profildatabasen, hvilket indikerer at profilerne repræsenterer et bredt spektrum af sandjorde. Dette understøttes gennem simuleringer af MTBs udvaskning fra sandprofilerne fra profildatasen, hvor de 24 profiler er jævnt fordelt blandt alle sandjordsprofilerne.

Simuleringerne for sandjordsprofilerne i profildatabasen bygger på prædiktioner af modelparametre for hydraulik og binding ved hjælp af korrelationssammenhænge, som er etableret på grundlag af det opbyggede datasæt. Dette lægger naturligvis en begrænsning på det mulige variationsfelt for profildatabasen. Imidlertid er antallet af profiler hvor udvaskningen ikke kan prædikteres udfra disse korrelationer meget lille, hvilket støtter at de 24 fuldprofiler fra projektets undersøgelsesmarker er repræsentative for størstedelen af de danske sandjorde.

# 4.6. Forsvinding i relation til stoffernes opholdstid

Nedbrydning af pesticid har, sammen med stoffets opholdstid i de øvre jordlag, betydning for hvor stor del af pesticidet der forsvinder før stoffet når den mættede zone. I det følgende præsenteres resultater om sammenhæng mellem jordegenskaber og forsvinding af pesticid, samt om hvilke jordegenskaber der på dette grundlag har størst betydning for pesticidets opholdstid (se afsnit 1.3 og bilag 13) i de øverste jordlag.

### Laboratorieanalyser

Forsvindingstiden, DT50, for tre af de fire modelstoffer er blevet bestemt for alle prøver fra de 24 fuldprofiler i forsøg efter OECD guideline. Forsvindingstiden er ikke bestemt for glyphosat, idet den ikke kan analyseres med den analysemetode som anvendes til de øvrige stoffer. Resultaterne for MTB, MCPA og MTA for fire udvalgte profiler er vist i figur



25.

**Figur 25**. Forsvindingen (DT50, = antal dage hvorefter halvdelen af pesticidet er forsvundet) for MCPA (, MTB () og MTA () i forhold til dybden i fuldprofilerne (FP) på markerne Astrup, Ulsted, Sjørup og Stubkær, som repræsenterer landskabstyperne Bakkeø, Yoldiaflade, Weichsel moræneflade og Alluvialkegle (hedeslette). Forsvindingsværdier på eller over 500 dage er behæftet med stor usikkerhed og er som standard angivet som "over 500 dage".

Forsvindingen er hurtigst for MCPA, hvor DT50 hovedsagelig ligger mellem 5 og 25 dage. For MTA og MTB er forsvindingstiden noget længere med de fleste DT50 værdier på 100 dage eller derover. Usikkerheden på bestemmelserne vokser med stigende forsvindingstid, hvilket vil sige at DT50 værdierne for MCPA generelt er fastlagt med større sikkerhed end for MTA og MTB. Nedbrydnigen er komplekst/usystematisk fordelt med dybden, bort set fra for MCPA.

# Jordegenskaber der beskriver modelparametre for forsvinding

I udgangspunktet er alle forsvindingsværdier blevet benyttet i korrelationsanalysen mellem nedbrydning og jordegenskaber, - også værdier over 500 dage, hvor usikkerheden på

bestemmelsen er stor. Korrelationen er lavet i forhold til forsvindingsraten, k, som har lav numerisk værdi ved høj DT50 værdi og vice versa. De numerisk højeste værdier har størst betydning for

korrelationen, hvorfor de numerisk lave værdier ikke får samme betydning for den endelige korrelation og derfor har kunnet inkluderes i analysen.



**Figur 26a** Målt forsvindingsrate (k) mod korreleret forsvindingsrate (k) på baggrund af DT50 værdierne for MTB. Forklaret varians: X: 83%; Y: 80%; 5 PLS-komponenter. Outliers: 3/42. Outlier identifikation: se tabel 10.2 i bilag 10. Raten har negative værdier, idet den angiver at der er negativ tilvækst i pesticidmængden (se fx. Yoldia-rapporten fig. 3.18)

Den korrelerede forsvindingsrate for MTB er på figur 26a vist i f.t. de målte forsvindingsrater for fuldprofilerne. Korrelationen er relativt god idet 80% af variationen i raten er forklaret med korrelationen. Figuren viser at én prøve ligger adskilt fra de øvrige, idet den ses at ligge i direkte forlængelse af korrelationsretningen fra alle øvrige data. Når denne prøve fjernes medfører det ikke en ændret korrelation, hvorfor prøven bibeholdes for dermed at udvide det variationsområde, hvor korrelationsresultatet kan anvendes.



*Figur 26b.* Den relative betydning af jordegenskaber (regressionsvektorer for PLS-model) for forsvindingsraten (k) baseret på DT50 for MTB. "Silt" angiver her kornstørrelsesfraktionen finsilt.

Sammenhængen mellem MTB's forsvindingsrate og jordegenskaber fremgår af figur 26b. Korrelationen viser at forsvindingsraten for MTB kan beskrives ved hjælp af jordegenskaberne: organisk kulstof, ombytteligt brint, jern og aluminium indhold, kornstørrelsesfordeling, samt SIR, ASA og FDA.

**Tabel 9**. Jordegenskaber til korrelation af forsvindingsraten (k) baseret på DT50 for MCPA, MTB og MTA. "+++" og "- - ": stor positiv og negativ betydning; "++" og "- -": middel positiv og negativ betydning; "+" og "- ": lav positiv og negativ betydning; "/": ringe betydning; "0": indgår ikke i korrelationen fordi jordegenskaben ikke influerer på korrelationen. Af bilag 10 fremgår korrelationerne for MCPA og MTA.

	C-total	H <sup>+</sup> ombyt.	Н	er	-insilt	ðvrig ekstur <sup>1)</sup>	e_DCB	e_oxalat	N_DCB	N_oxalat	SIR	ASA	-DA
Metribuzin			0		++		0	ш. /	1	4	/	-	+
MTA	0	0	+	0	0	0		+	+++	0		0	+++
MCPA <sub>alle</sub>		0	/	/	0	+	0	0	0	0	0		/
<b>MCPA</b> overjord		-	/	0	0	0	0	0		0	0	0	0
loter: <sup>1)</sup> avria teketur dækker, groveilt, finsand1, finsand2, grovsand1													

Noter: <sup>1)</sup> øvrig tekstur dækker, grovsilt, finsand1, finsand2, grovsand1

Beskrivelsen af MTB, MCPA og MTAs nedbrydning (forsvinding) ud fra jordegenskaber fremgår af tabel 9. For MCPA og MTB er der negativ afhængighed af indholdet af organisk kulstof, hvilket betyder at en stigning i kulstofindholdet vil medføre en højere nedbrydningsrate og dermed en kortere forsvindingstid. For alle tre stoffer indgår der et mål for den biologiske aktivitet i korrelationsmodellen. Antallet af jordegenskaber der kræves for at beskrive forsvindingen er større i forhold til de jordegenskaber som er nødvendige for at beskrive hydrauliske egenskaber og stoffernes binding (afsnit 4.2. og 4.3), hvilket peger på at nedbrydningen (forsvindingen) er en mere kompleks proces og sikkert også mere stofspecifik end bindingen.

De nødvendige jordegenskaber som sammen kan beskrive pesticidernes forsvinding er således: C-total, pH, ombytteligt brint (H<sup>+</sup> ombyt.) kornstørrelsesfordeling, jern og aluminium indhold, og et mål for den biologiske aktivitet (SIR/ASA/FDA).

### Simuleret udvaskning af MTB (målt K<sub>d</sub> og DT50)

Formålet med simulering af MTBs udvaskning under anvendelse af målte værdier for binding og forsvinding er at udpege de mest udvaskningskarakteriserende jordegenskaber for profiler som giver anledning til særlig udvaskning.



*Figur 27.* Søjlediagram af den relative simulerede pesticidkoncentration i 2 meters dybde for MTB fra de 24 fuldprofiler. Simuleret med målt binding ( $K_t$ ) og forsvinding (DT50).

Den relative simulerede udvaskning af MTB fra de 24 fuldprofiler (figur 27) viser at der især i ét profil udvaskes en relativt høj koncentration af pesticid. Den udvaskede koncentration i dette profil (FP11) er 2-3 gange højere end for de øvrige profiler. Den simulerede udvaskning i de øvrige 23 profiler er fordelt over variationsområdet op til en relativ koncentration på godt 0,4.

# 4.7. Følsomhed for randbetingelser

I afsnittene 4.1-4.4 er sammenhængen mellem jordegenskaber (jordens iboende egenskaber) og udvaskning af pesticid blevet klarlagt. I tillæg til disse jordegenskaber er også andre forhold af mulig betydning, når risikoen for udvaskning skal vurderes. I dette afsnit behandles derfor betydningen/følsomheden af udvaskningen i forhold til

- tykkelsen A-horisonten,
- nedbørsmængden og
- afstanden til grundvandsspejlet.

# Tykkelse af A-horisonten

Muligheden for binding og nedbrydning af pesticid afhænger af det samlede indhold af organisk kulstof i jordprofilet. Det øverste jordlag (A-horisonten) er, jævnfør afsnit 4.3 og 4.4, generelt det vigtigste for binding og nedbrydning af stof. Indholdet af organisk kulstof og tykkelsen af A-horisonten er tilsammen som hovedregel mest afgørende for summen organisk kulstof i den øverste meter. Det er derfor vigtigt at kende tykkelsen af A-horisonten, samt at vide hvor følsom udvaskningen er overfor denne tykkelse. Også en Bh-horisont kan have højt indhold af organisk kulstof og vil i givet fald både øge kulstofindholdet og tykkelsen af den reaktive zone.

Den således forventede betydningen af A-horisontens tykkelse for udvaskningens størrelse er undersøgt ved at simulere udvaskningen af MTB for 10 af de 24 fuldprofiler, idet tykkelsen af A-horisonten er varieret på bekostning af den underliggende B-horisont. Beregningerne er gennemført med tykkelser af A-horisonter som i begge ender af skalaen rækker ud over det praktisk realistiske for at tydeliggøre ændringer i udvaskningsforløbene i de karakteristiske tykkelsesintervaller på 30-40 cm. Store tykkelser kan dog siges at repræsentere situationer med en Bh-horisont som er rig på organisk kulstof. Resultaterne af simuleringerne fremgår af figur 28.



**Figur 28.** Den relative simulerede udvaskede koncentrations afhængighed af tykkelsen af A-horisonten for 10 af de 24 fuldprofiler (FP). Simuleret med målt binding og fast nedbrydning af MTB for 10 udvalgte fuldprofiler. Yderpunkterne i tykkelserne af A-horisonten afspejler ikke forholdene i naturen men er beregningsmæssigt nødvendige for at kunne udtrykke følsomheden for ændringer i tykkelsen.

Udvaskningen af MTB er som forventet afhængig af tykkelsen af A-horisonten (figur 28), idet den højeste binding af MTB er i denne horisont. Det betyder alt andet lige at tykkere A-horisont medfører en længere opholdstid af stoffet i A-horisonten og dermed en større mulighed for nedbrydning af pesticidet. Følsomheden overfor tykkelsen af A-horisonten er dog ikke ens for de 10 profiler, hvilket ses af forskellen på kurvernes hældning på figur 28. Som eksempel har kurverne for fuldprofil 1 og 9 (FP1 og FP9) samme relative udvaskede koncentration når A-horisonten har en tykkelse på 5 cm, men med stigende tykkelse af A-horisonten falder den relative koncentration i FP1 hurtigere end det er tilfældet for FP9. Det betyder dels at FP9 kan betragtes som mere følsomt end FP1, såfremt tykkelsen af A-horisonten fastlægges med præcision end for FP9, idet ændringer i tykkelsen betyder relativt mest for FP1. Blandt de 10 profiler udvalgt til undersøgelsen har FP1 og FP5 den største hældning

på kurven og dermed den største følsomhed, mens profilerne FP9, FP13 og FP24 er mindst følsomme i forhold til ændring i tykkelsen af A-horisonten.

Idet forsvindingen af MTB er holdt konstant under simuleringerne kan forskellene i profilernes følsomhed overfor tykkelsen af A-horisonten tilskrives forskelle mellem A- og B-horisonterne i enten de hydrauliske forhold eller bindingen af MTB. For at afklare hvilke af jordens iboende egenskaber der influerer mest på følsomheden er denne beskrevet gennem en korrelationsanalyse ud fra de jordegenskaber som kan beskrive hydraulik og binding i A- og B-horisonterne. Faconen på kurverne for relativ følsomhed af de ti profiler som funktion af A-horsontens tykkelse, tyder på at med en given forøgelse af A-horisonten følger en konstant mindre andel udvaskning, fx. at en forøgelse på 10 cm altid giver en reduktion på 30%. Såfremt dette er tilfældet kan kurverne karakteriseres som eksponentielt faldende, i hvilket tilfælde det er rimeligt at tage faldet i starten af kurverne som mål for følsomheden overfor tykkelsen af horisonten.



**Figur 29a.** Følsomheden for tykkelsen af A-horisont (Measured Y) mod modelleret følsomhed (Predicted Y) for de 10 udvalgte fuldprofiler. Følsomheden er baseret på simulering af MTB udvaskning med varierende tykkelse af A-horisonten. Varians forklaret: X: 46%; Y: 86%; Outliers: 0/10.

De 10 profiler i figur 28 blev valgt med henblik på at være repræsentative i forhold til hele variationen i den simulerede udvaskning af MTB (figur 24) og samtidig repræsentere de fire landskabselementer Yoldiaflade, Alluvialkegle, Bakkeø og Weichsel moræneflade. Det fremgår af figur 29a at de 10 udvalgte profiler er fordelt jævnt i hele variationsområdet (udfaldsrummet) fra lav følsomhed for FP24 til høj følsomhed for FP5. Den opstillede korrelation har en god forklaringsgrad af variationen i følsomheden (86%) for alle de 10 profiler, hvilket peger på at det er universelle relationer mellem jordens iboende egenskaber der giver anledning til følsomheden.



**Figur 29b.** Den relative betydning (regressionsvektorer for PLS-model) af jordegenskaber i A- og B-horisonterne og forholdet mellem  $K_d$  i A- og B-horisonterne og følsomhed for ændring i A-horisontens tykkelse.

Resultatet af korrelationen af følsomheden for tykkelsen af A-horisonten afhænger af forholdet mellem bindingen af MTB i A- og B-horisonterne (Kd\_forhold) og lerindholdet i B-horisonten (figur 29b). K<sub>d</sub> forholdet er negativt korreleret til følsomheden, hvilket betyder at stigende forskel på bindingen i A- og B-horisonterne medfører en stigende følsomhed overfor tykkelsen af A-horisonten, hvilket ikke er overraskende. Bindingen af MTB afhænger af indholdet af organisk kulstof (figur 23b), hvilket genspejles på figur 29b, hvor det organiske kulstofindhold i A-horisonten ligesom K<sub>d</sub>-forholdet er negativt korreleret til følsomheden, mens kulstofindholdet i B-horisonten korrelerer modsat i.f.t. i A-horisonten. Stigende lerindhold i B-horisonten medfører en faldende følsomhed, hvilket også er tilfældet for volumenvægten i både A- og B-horisonterne. Volumenvægt og lerindhold er de vigtigste jordegenskaber i beskrivelsen af de hydrauliske modelparametre (figur 20).

Samlet viser korrelationen at jo mere udvaskningen afhænger af høj binding i Ahorisonten eller dårlige hydrauliske egenskaber, jo større er følsomheden overfor tykkelsen af A-horisonten.

#### Nedbørsmængde og nettonedbør

Forskelle i nettonedbør (grundvandsdannelse) har indflydelse på stoftransporten. Alt andet lige vil en større nedadgående vandtransport betyde at den samlede mængde af pesticid der udvaskes vil stige. To scenarier er mulige ved en øget stofmængde sammen med en øget grundvandsdannelse: 1) koncentration i grundvandet stiger på grund af større stofmængde eller 2) koncentrationen bliver lavere på grund af fortyndingseffekten. For at afklare dette spørgsmål er der gennemført simuleringer af udvaskningen af MTB og de 9 kK<sub>f</sub>-kombinationer for to klimatyper. Tylstrup klimaet repræsenter den gennemsnitlige nedbørsmængde for Danmark, mens Estrup klimaet repræsenter områder med høj nedbør.



**Figur 30**. Simuleret udvasket koncentration for kK<sub>r</sub>-kombination 2, for Estrup klima mod Tylstrup klima, viser ringe afhængighed af forskel i nettonedbør indenfor den aktuelle 20% forskel i nettonedbør for de to klimascenarier. Punkterne repræsenterer profiler.

Resultaterne fra simuleringer med forskellig nettonedbør (eksemplificeret i figur 30) viser, at den simulerede udvaskede koncentration i de fleste tilfælde er næsten uafhængig af variation i nettonedbøren indenfor den undersøgte 20% variationsbredde. For de højeste simulerede udvaskede koncentrationer er der dog tendens til relativt mindre udvasket koncentration ved højere nettonedbør, hvilket tilskrives en fortyndingseffekt.

#### Afstanden til grundvandsspejlet

Indflydelsen af dybden til grundvandsspejlet (den nedre randbetingelse for MACRO modellen) er undersøgt ved at simulere udvaskning i 2 meters dybde med fastholdte grundvandsspejl i hhv. 0,5, 3 og 5 meters dybde (se også afsnit 3.2). For de undersøgte sandprofiler er der kun ringe forskel i simuleret udvaskning under disse forskellige randbetingelser, bilag 9, selv om et dybereliggende grundvandsspejl principielt øger opholdstiden i den umættede zone, sådan at eventuel binding og nedbrydning i den dybereliggende del af den umættede zone vil mindske mængden af pesticid der ellers ville kunne udvaskes til grundvandet.

#### 4.8. Gruppering af pesticider

En række pesticiders binding og omsætning er blevet undersøgt dels i form af laboratorieforsøg og dels i form af et litteraturstudie, se disse. Med baggrund i disse undersøgelser samt resultaterne fra de fire hovedpesticider (MCPA, MTB, MTA og glyphosat) er det vurderet om pesticider kan håndteres som én gruppe af stoffer med ensartet afhængighed af jordegenskaber i forhold til binding og nedbrydning.

Nedenfor behandles først muligheden for en gruppering i forhold til binding og dernæst i forhold til nedbrydning.

### **Pesticidernes binding**

Hovedkonklusionerne fra stofgruppeundersøgelserne og litteraturstudiet er gengivet i bilag 11 og nærmere uddybet i stofgruppe- og litteraturrapporterne. Her præsenteres en integreret vurdering af de to studier, samt undersøgelserne for de fire modelstoffer i form af en cluster analyse. Vurderingen bygger på korrelationsanalyser mellem jordegenskaber (indholdet af organisk kulstof, pH og kornstørrelsesfordelingen) og bindingen af pesticid angivet som fordelingskoefficienten, K<sub>d</sub>, eller Freundlich konstanten, K<sub>f</sub>. Freundlich konstanten er anvendt på lige fod med fordelingskoefficienten i de tilfælde hvor eksponenten i Freundlich udtrykket, n<sub>f</sub>, er mellem 0,7 og 1,1, idet Freundlich udtykket i dette interval tilnærmelsesvist har et lineært forløb. For nogle af de undersøgte stoffer fra litteraturstudiet har det været nødvendigt at se bort fra en af typerne af jordegenskaber (pH, organisk kulstof eller tekstur) for at få et tilstrækkeligt stort datasæt som grundlag for korrelationen.



**Figur 31**. Illustration af gruppering (cluster-analyse) i forhold til binding af pesticiderne fra litteraturstudiet (-litt.), stofgruppeundersøgelserne (-lab.), samt de fire modelstoffer (KUPA). Opdelingen i grupper er foretaget på baggrund jordegenskaberne's betydning (regressionsvektorer) i korrelationerne for afhængighed til binding. De jordegenskaber som ligger til grund er: organisk kulstof (C-total), pH, ler, silt og sand. Grøn boks ("hovedgruppen" og grupperne "A" og "B") består af stoffer, hvor der er stor positiv afhængighed mellem binding og indholdet af organisk kulstof. Blå boks angiver stoffer med negativ eller ringe afhængighed af pH. Grå felter fortæller at pH ikke indgår i korrelationsanalysen. Forskellen på MCPA-lab og MCPA-KUPA er at KUPA-resultaterne er baseret på et langt større datasæt. Resultaterne af en Cluster-analyse for bindingen af de undersøgte pesticider, både som modelstoffer, stofgruppeundersøgelser og i litteraturstudiet, er vist i figur 31. Analysen viser at stofferne kan opdeles i fire grupper. "Hovedgruppen" består af stoffer som alle har en positiv afhængighed af det organiske kulstofindhold og samtidig en negativ eller ringe afhængighed af pH. "Gruppe A" udviser de samme afhængigheder af C-total som "hovedgruppen", men korrelationerne har svag udsagnsstyrke. Gruppe A kan i princippet opfattes som en del af hovedgruppen, kendetegnet ved at alle pesticiderne er undersøgt i stofgruppeundersøgelserne. Her er der kun undersøgt tre overjorde og tre underjorde. Variationsbredden i dette datasæt er således ringe og data har karakter af at de er en snæver gruppe overjord og en snæver gruppe underjord. Dette medfører at korrelationerne er svage, idet der i praksis kun er to observationer for hvert stof. Det vurderes at det er dette forhold der slår igennem ved definition af gruppe A i forhold til hovedgruppen.

Gruppe B, som egentligt ikke er en gruppe men to enkeltstoffer, består af dimethoat og MCPA. Dimethoat er særegent idet stoffet er det eneste med en positiv afhængighed af pH. MCPA fra litteraturstudiet udviser ligesom for MCPA i forbindelse med undersøgelserne af modelstofferne og stofgruppe undersøgelserne stor positiv afhængighed af kulstofindholdet og negativ afhængighed af pH. I litteraturstudiet er der yderligere en stor negativ afhængighed af lerindholdet, som ikke fremgår af de to øvrige studier (dette kan skyldes at variationsbredden for ler i litteraturstudiet er anderledes end i de jorde, som er undersøgt i projektet). I stofgruppeundersøgelserne har MCPA en positiv afhængighed af ler, mens ler ikke har nogen betydning i forbindelse med undersøgelserne af MCPA som modelstof.

Den sidste gruppe af stoffer falder udenfor hovedfordelingen, hovedsagelig fordi disse stoffer ikke er positivt afhængige af kulstofindholdet. MTA (analyseret som modelstof) udviser ingen afhængighed af kulstofindholdet, mens glyphosat (analyseret i stofgruppeundersøgelserne) og Cyanazin (analyseret i litteraturstudiet) har negativ afhængighed til kulstofindholdet.

Resultatet af clusteranalysen, baseret på korrelationerne mellem binding og jordegenskaber viser at det er muligt at lave en repræsentativ generalisering fra et pesticid til en større gruppe af stoffer. "Hovedgruppen" og "gruppe A" udgør tilsammen den største gruppe karakteriseret ved at bindingen er positivt korreleret til indholdet af organisk kulstof og negativt eller ringe korreleret til pH. Generelt betyder dette at disse stoffer binder hårdere til humusrige jorde med et lavt pH.

For langt hovedparten af stofferne er der, som indikeret med den grønne boks på figur 31, en positiv afhængighed mellem binding og det organiske kulstofindhold. Endvidere udviser alle stoffer (på nær dimethoat) negativ eller ringe korrelation i forhold til pH.

De fire modelstoffer vurderes at være repræsentative for det store antal undersøgte pesticider, idet to af de fire falder indenfor clusteranalysens "hovedgruppe" af pesticider, mens de to øvrige repræsenterer stoffer med anderledes afhængighed af jordegenskaber.

# Stoffernes forsvinding og mineralisering

I rapporterne stofgruppe- og litteraturrapporterne er der beskrivelser af opdelingen af pesticiderne i to grupper med henholdsvis hurtig og langsom nedbrydning (forsvinding). I forbindelse med stofgruppeundersøgelserne er stoffernes nedbrydning kun bestemt som mineralisering, dvs. deres omdannelse til kuldioxid. Kriteriet for om et pesticid tilhører gruppen af hurtigt omsættelige stoffer er at mere end 5% skal være mineraliseret indenfor 60 dage. Dette svarer nogenlunde til de grænser, der benyttes ved godkendelsen af pesticider, hvor minimum 5% af det tilsatte pesticid skal være mineraliseret indenfor 100

dage. Lige som ved godkendelsen af pesticider, er der her analyseret for både for overog underjorde.

I modsætning til de gennemførte laboratorieundersøgelser vedr. gruppering af stoffer, omhandler litteraturstudiet hovedsagelig forsøg, hvor det er stoffernes "forsvinden" fra jorden der er undersøgt. I denne samenhæng betragtes et stof som hurtigt nedbrydeligt (hurtig forsvinding) hvis mere end 50% af stoffet er omsat indenfor en periode på 90 dage. Som minimum skal 90% af de tilgængelige referencedata opfylde dette kriterie for at et pesticid tilhører gruppen af hurtigt nedbrydelige stoffer.

I tabel 10 er resultaterne for forsvinding og mineralisering opsummeret. Fire stoffer (MCPA, mechlorprop, isoproturon, metamitron) udgør en gruppe af hurtigt nedbrydelige pesticider, både hvad angår forsvinding og mineralisering. Fem stoffer (atrazin, simazin, MTB, diuron, og til dels linuron) udgør en gruppe af langsomt nedbrydelige pesticider, både med hensyn til forsvinding og mineralisering. De øvrige undersøgte pesticider kan ikke entydigt fordeles i enten gruppen af hurtigt nedbrydelige eller langsomt nedbrydelige stoffer.

En sammenligning af disse resultater med resultaterne for de fire modelstoffer, bilag 9, viser at samme mønster genfindes for MCPA og MTB, hvor MCPA tilhører gruppen med hurtig nedbrydning/mineralisering og MTB den langsomme gruppe. I litteraturen er der ingen oplysninger om forsvindingsværdien (DT50) for MTA. De gennemførte nedbrydningsundersøgelser viser, sammen med oplysninger om mineralisering, at denne metabolit hører til gruppen af langsomt nedbrydelige stoffer. Nedbrydningen af glyphosat er ikke bestemt i projektet, men mineraliseringsforsøgene med pesticidet viser at stoffet nedbrydes hurtigt især i A-horisonter, mens mineraliseringen i sandede underjorde generelt går langsomt.

**Tabel 10**. Forsvinding/mineralisering af pesticider og metabolitter (N) som er undersøgt i henholdsvis litteraturstudiet (litt.) og stofgruppeundersøgelserner (lab.). H = hurtig forsvinding/mineralisering; L = langsom forsvinding/mineralisering; UD = utilstrækkeligt datagrundlag; 0 = ingen værdier til rådighed; O/U = overjord/underjord. Tomme felter angiver at der ikke er nogen data til rådighed.

		i rauigi			
Stof	Litt.	Lab.	Stof	Litt.	Lab.
		O/U			O/U
Triaziner og triazinoner			Phenoxysyrer		
Atrazin	L	L/L	Dichlorprop	Н	
Simazin	L	L/L	MCPA	Н	H/H
Cyanazin	Н		Mechlorprop	Н	H/H
Terbuthylazin	Н	L/L	2,4-D	L	H/H
Metamitron	Н	H/H	Fluazifop-P-butyl	0	
Metribuzin	L	L/L			
			Ethylenbisdithyocarbarmater		
Phenylurea forbindelser			Maneb	0	
Diuron	L	L/L	Mancozeb	0	H/L <sup>2)</sup>
Linuron	L	L <sup>1)</sup> /L	ETU (N)	0	
Isoproturon	Н	0			
Mono-desmethyl-		$H/L^{2}$	Phosphonsyrer		
isoproturon (N)					
4-isopropylanilin (N)		H/H	Glyphosat	L	H/L
			Glyphosat-trimesium	0	
Sulfonylurea forbindelser			Glufosinat	Н	
Chlorsulfuron	Н	L <sup>1)</sup> /L			
Metsulfuron-methyl	Н	H/L	Organiske phosphorsyreestre		
Thifensulfuron-methyl	Н	H/L	Dimethoat	Н	
Tribenuron-methyl	UD	$H/L^{2)}$	Diazinon	Н	L/L
Triazinamin (N)		L/L			
Methyltriazinamin (N)		L/L	Andre		
			Fenpropimorph	0	
Benzonitriler			Desmedipham	0	
Bromoxynil	UD		Phenmedipham	UD	
loxynil	UD		Propiconazol	UD	
			Bentazon	Н	H/L
Dinitroaniliner			Dichlobenil		L/L <sup>3)</sup>
Pendimethalin	Н		BAM (N)		L/L

Noter:

<sup>1)</sup> i en af tre overjorde blev der observeret mineralisering over 5%

<sup>2)</sup> i en af tre underjorde blev der observeret mineraliseing over 5%
<sup>3)</sup> stoffet fordamper fra underjord

### 4.9 Kriterier for identifikation af særlig pesticidfølsomhed.

Der er stor forskel på følsomheden overfor pesticidudvaskning fra sted til sted, som det fremgår af den relative simulerede udvaskning for et stort antal jordprofiler i sandjordsområder, figur 32. Denne fordeling af relativ udvaskning i profilerne danner grundlag for det følgende eksempel på, hvordan særligt følsomme profiler/arealer kan identificeres.



**Figur 32.** Simuleret udvaskning i kvadratnetsprofilerne af et modelstof baseret på MCPA's bindingsegenskaber. Profilerne (på x-aksen) er sorteret efter udvaskning, hvor den højeste er normeret til 1. To grønne linier angiver de her valgte udvaskningskriterier for relative udvaskninger, hvor 0,65 er et regneeksempel baseret på fordelingen af de simulerede udvaskninger og 0,43 svarer til det af varslingssystemets fire profiler, som indplaceres med den relativt højeste korrelerede udvaskningsværdi. Værdierne benyttes i den videre fremstilling til at skelne profiler, som er særligt følsomme overfor pesticidudvaskning, fra de øvrige. Farvede profiler er fra varslingssystemet: de to profiler i Jyndevad = røde, og de to profiler i Tylstrup = orange; det grå profils egenskaber (Karup) indgår i godkendelsesordningen for pesticider.

Opgaven er derfor at karakterisere forholdene og identificere den geografiske beliggenhed af de steder, hvor der er relativ høj simuleret udvaskning, dvs. de profiler/arealer som er særligt følsomme overfor udvaskning af pesticid, på den enklest mulige måde. Dette indebærer også en identifikation af de steder der ikke er særligt følsomme, samt af en mellemkategori af potentielt særligt følsomme arealer, hvor der er behov for yderligere kriterier for at afgøre om følsomheden er høj eller lav. Da kvadratnetsprofilerne er spredt ud over sandjordsområderne antages andelen af profiler i kategorierne at afspejle bredden i den arealmæssige variation og proportionen indenfor de undersøgte sandjordstyper. Dette skal dog vurderes i forhold til variabiliteten.

Det er i den foreslåede fremgangsmåde som udgangspunkt valgt at se bort fra forskelle i pesticidernes nedbrydning, og alene at tage udgangspunkt i transport og binding, idet nedbrydning dels er meget afhængig af konkret driftsledelse (primært afgrødevalg, jordbehandling og gødningstype), dels kræver en omkostningstung fastlæggelse af nedbrydningsværdier, subsidiært kræver en del supplerende oplysninger. Det er således

sandsynligt at der, indenfor de arealer som her karakteriseres som "særligt følsomme", vil forekomme delarealer, hvor stofspecifik nedbrydning under den aktuelle landbrugspraksis modvirker (reducerer eller hindrer) udvaskningen. Nedbrydning indgår således som en konstant i de beregninger som ligger til grund for den foreslåede fremgangsmåde og eksemplet.

I en evt. videregående karakterisering og indsnævring af særligt pesticidfølsomme profiler/arealer, ud over det som her eksemplificeres, vil det, ud fra data indsamlet i projektet, være muligt at pege på pesticidegenskaber, hvor nedbrydning er betydende, mens identifikation af tilsvarende gunstige driftsforhold kræver ny dokumentation.

Effekten af at inddrage nedbrydning i vurderingen af følsomheden overfor udvaskning vil i almindelighed være en mindskelse af den simulerede udvaskning, således at særlig følsomhed i gunstigste tilfælde helt kan elimineres. I undersøgelsen er der simuleret med konstant nedbrydningsværdi på 80% fraktilen af nedbrydningsværdierne, hvorfor der også vil forekomme tilfælde, hvor brug af aktuelle nedbrydningsværdier vil øge den simulerede udvaskning.

Udpegningen af særligt pesticidfølsomme arealer og karakteriseringen af sandjordsarealers følsomhed overfor pesticidudvaskning kan således tage udgangspunkt i de jordegenskaber, som har mest betydning for hydrauliske og bindingsmæssige forhold (opholdstiden). Hertil kan karakteriseringen af følsomhed efter behov yderligere detaljeres ved inddragelse af yderligere data, herunder vedrørende nedbrydning, klimatiske og landbrugsmæssige driftsforhold.

De profiler/arealer som på denne måde er karakteriseret som særligt pesticidfølsomme eller potentielt særligt følsomme omfatter, som det fremgår ovenfor, nogle profiler/arealer som i realiteten er mindre følsomme (falske positiver). For at mindske antallet af falske positiver (og negativer) kan de identificerede profiler yderligere karakteriseres og sorteres gennem modellering/korrelering og evt. inddragelse af nedbrydningsaspektet for konkrete pesticider i simulering af udvaskning. Ved således at inddrage et større datasæt, vil profiler (arealer) på forbedret grundlag kunne karakteriseres efter følsomhed overfor simuleret udvaskning af konkrete pesticider. Dette vil i reglen indebære en nedgradering af følsomheden, idet første etape af karakteriseringen er baseret på 80% fraktilen af nedbrydningsværdierne. Den praktiske anvendelse af resultaterne af en sådan eventuel udvidet undersøgelse forudsætter, at de afgørende kriterier kan kortlægges.
#### Eksempel

De tre kategorier af følsomhed identificeres direkte ved hjælp af afskæringsværdierne (figur 32) på krydsplot mellem humus indhold, samlet indhold af ler og silt, og relativ simuleret udvaskning, figur 33.

Eksemplet tager udgangspunkt i de jordegenskaber, som har vist sig at indeholde mest information om udvaskningen (ud fra en betragtning om opholdstid og hvor nedbrydningen er holdt som konstant), nemlig det volumenvægtede indhold af humus, og ler og silt i den øverste meter af jorden. Relationerne analyseres samlet, hvilket indebærer at humusindholdet krydsplottes mod den samlede mængde af ler og silt i den øverste meter af jorden. De enkelte datapunkter (profiler) i krydsplottet er kodet med farve efter graden af relativ simuleret udvaskning, figur 33. Som det fremgår af figur 33C identificeres der ved denne fremgangsmåde et antal særligt følsomme profiler med røde signaturer. De særligt følsomme profiler er afgrænset af den grønne linie, som snævrest muligt afgrænser profiler efter udvaskningskriteriet på 0,65, samtidig med at hhv. humusindholdet, og ler- og siltindholdet er meget lavt. Herudover identificeres der yderligere samtidig en del profiler (lilla og blå signaturer), som er potentielt særligt følsomme (de lilla er særligt følsomme dersom udvaskningskriteriet 0,43 lægges til grund), vist som et felt under den orange linie, men fratrukket de "røde " profiler. I den potentielt særligt følsomme kategori identificeres der et betydeligt antal falske positiver (blå), hvilket viser at der, ved et lavere udvaskningskriterie sker en mere usikker identifikation af følsomme profiler/arealer. som også illustreret i figur 34. Blå profiler som ligger over den orange linie i figur 33 er de ikke særligt følsomme profiler.



**Figur 33 A-C.** Illustration af identifikation af de tre kategorier af følsomhed overfor udvaskning i eksemplet. Røde punkter er profiler med beregnet udvaskning over det valgte udvaskningskriterie på 0,65. Lilla punkter er profiler med lavere beregnet udvaskning over det valgte lavere udvaskningskriterie på 0,43. Blå punkter er profiler med relative beregnede udvaskninger som ligger under de valgte udvaskningskriterier. Den grønne linie afgrænser de særligt følsomme profiler (med en enkelt falsk positiv) på basis af afskæringsværdierne humus <17 kg/m<sup>2</sup>, og ler og silt <130 kg/m<sup>2</sup> (udvaskningskriterie 0,65). Mellem den særligt følsomme kategori og linien "Ler+Silt<-10\*Humus+350" (orange) findes de "potentielt følsomme" profiler/arealer med udvaskningskriteriet 0,43 og en del falske positiver. Over den orange linie findes gruppen af "ikke særligt følsomme" profiler/arealer (med enkelte falske negativer).



*Figur 34.* Illustration af datagrundlaget for figur 33C, idet der er interpoleret lineært mellem de relative simulerede udvaskninger for profilerne. Figuren tydeliggør den dominerende sammenhængen mellem høj simuleret udvaskning og lave indhold af humus, og ler og silt. Farveskalaen viser relativ udvaskning. Y-aksen er humusindholdet på en skala fra 0 til 56 kg/m<sup>2</sup> og X-aksen er ler- og siltindholdet på en skala fra 50 til 700 kg/m<sup>2</sup>.

Med udgangspunkt i fremgangsmåden og resultaterne i eksemplet muliggøres en karakteristik af de tre kategorier for følsomhed:

- I "særligt pesticidfølsomme" profiler/arealer er humusindholdet <17 kg/m<sup>2</sup> og summen af ler og silt indholdet <130 kg/m<sup>2</sup>.
- "Potentielt følsomme" profiler/arealer har indhold af humus, og ler og silt, der ligger under relationen Ler + Silt < -10\*humus + 350 fratrukket mængden af særligt følsomme arealer. De potentielt følsomme profiler/arealer består af en blanding af profiler med højere relativ udvaskning end 0,43 (lilla signaturer i figur 33C) og profiler, der udvaskningsmæssigt er falske positiver (blå signaturer i figur 33C), og således ikke kan udskilles fra hinanden uden at der inddrages flere kriterier end i eksemplet.
- Gruppen af "ikke særligt følsomme" profiler/arealer har indhold af humus, og ler og silt, som ligger over linien Ler + Silt < -10\*humus + 350 i figur 33C. Ved den her valgte definition af linien er der enkelte falske negativer.

Antallet af profiler i de tre kategorier af følsomhed fremgår af tabel 11. Dersom en yderligere karakteristik af følsomhed er påkrævet vil de supplerende undersøgelser især

skulle fokusere på en detaljering af følsomheden i gruppen af "potentielt følsomme" profiler/arealer.

**Tabel 11**. Antal profiler i de tre følsomhedskategorier, samt falske positive og negative, til karakterisering af jordes følsomhed overfor udvaskning af pesticid

	Alle	Falske +	Falske -
Særligt følsomme	14	4	0
Potentielt særligt	31	18	0
følsomme			
Ikke særligt følsomme	100	0	3

#### Videregående identifikationen af særligt pesticidfølsomme profiler

En styrke ved den foreslåede fremgangsmåde er at den benytter iboende og relativt stabile jordegenskaber og følger forsigtighedsprincippet ved at muliggøre fravalg af profiler/arealer, hvor det vurderes, at der ikke er særlige problemer. Der vil, som vist i fx. figur 33C, forekomme tilfælde, hvor et profil klassificeres forkert. I en eventuel anden etape, hvor identificerede falske positiver (og negativer) karakteriseres med jordegenskaber, sådan at arealerne kan kortlægges i større detalje og under hensyntagen til temporære og/eller stofspecifikke forhold, bliver de samlede fravalgskriterier mere komplekse. Fra den del af profilerne/arealet, som ved den beskrevne fremgangsmåder er samlet i kategorien af særlig pesticidfølsomme, vil der således i en evt. anden etape kunne fravælges falske positiver på basis af simulering af udvaskning med et bredere datagrundlag end det her anvendte.

Simuleringen kan foregå på grundlag af det fulde datasæt for korrelation af hydrologiske egenskaber og binding. Det kan også vælges at inddrage egenskaber som indgår i korrelationen af nedbrydning, i hvilket tilfælde resultaterne bliver stofspecifikke. Endelig kan der benyttes aktuelt klima. Den eksemplificerede fremgangsmåde giver dog den mest ensartede og holdbare karakteristik.

Alle projektets resultater måles op mod relativ simuleret udvaskning. Konkret verifikation af de simulerede udvaskninger forudsætter, at der findes relevante målinger af fysiske udvaskninger, som er foregået med de undersøgte stoffer og under betingelser som svarer til forudsætningerne i projektet.

Da de viste resultater illustrerer afskæringsværdier for et kunstigt modelstof baseret på MCPA's bindingsegenskaber, vil konkrete stoffers udvaskelighed afvige individuelt. Projektet har imidlertid vist, at de fleste pesticiders binding kontrolleres af de samme jordegenskaber som for det MCPA-lignende stof, hvorfor udvaskningsfølsomheden i forhold til binding og hydrauliske betingelser kan anses for at være størst under de samme forhold.

Den generelle effekt af et beskyttelsesprincip for grundvand, baseret på de beskrevne eksempler, vil øges ved at bruge højere afskæringsværdi for indhold af fine kornstørrelser og humus, og dermed lavere værdi for simuleret udvaskning. Omvendt vil det altid være de relativt mest følsomme arealer der udpeges, hvis afskæringsværdierne for indhold af fine kornstørrelser og humus reduceres, svarende til at hæve udvaskningsværdien (grønne linier i figur 32). Omvendt vil der ved højere afskæringsværdier for humus-, ler- og siltindhold og dermed mindre tærskelværdi for udvaskning øges usikkerheden i

identifikationen imidlertid af særligt pesticidfølsomme profiler/arealer, således at der inkluderes flere falske positiver. Fastlæggelsen af kriterierne og dermed graden af eksemplernes tilstræbt beskvttelse på basis af metodik er således et politisk/administrativt/økonomisk valg, mens en videregående karakteristik repræsenterer den forbedring, der kan opnås ved at inddrage foranderlige forhold (specifikke pesticider, konkrete landbrugsmæssige driftsforhold, aktuelt klima og nedbrydning). For alle de identificerede særligt pesticidfølsomme profiler/arealer vil inddragelse af de foranderlige forhold mindske graden af følsomhed, mens enkelte falske negative fravalg vil blive omstødt grundet 80% fraktil kriteriet for nedbrydning i de generelle undersøgelser.

Den videregående karakteristik er betydeligt dyrere end den eksemplificerede, hvorfor de eksemplificerede fravalg/identifikationer af profiler/det areal, der betegnes som "ikke særligt pesticidfølsomt" kan være med til at reducere omkostninger ved eventuel gennemførelse af den anden etape.

# 5. Diskussion

Gennem en systematisk dataindsamling på 24 danske undersøgelsesmarker er der indhentet et omfattende og sammenhængende datasæt, der beskriver en bred vifte af jordegenskaber, bilag 1,.samt modelparametre for hydrauliske forhold, binding og nedbrydning.

Gennem korrelationanalyser og simuleringer af pesticidudvaskning er der blevet etableret viden om hvilke jordegenskaber, der er afgørende for, om et areal/profil er særligt sårbart for udvaskning af pesticider, baseret på hydraulik og binding, altså uden konkret varierende nedbrydning.

De 24 undersøgelsesmarker indenfor 6 genetiske landskabselementer er udvalgt for at dække et bredt udsnit af de mest udbredte, dyrkede og grundvandsrelevante danske sandjordstyper. Derfor er det verificeret at de udvalgte profilers og markers egenskaber er i overensstemmelse med tilsvarende oplysninger fra den meget større teksturdatabase, bilag 2. Repræsentativiteten af de 24 undersøgelsesmarker er yderligere testet ved sammenligning med 170 sandjordsprofiler fra profildatabasen, kapitel 4.1 og bilag 2.

Simulering af pesticidet MTB's udvaskning viser at de 24 fuldprofiler fra undersøgelsesmarkerne er dækkende for det udfaldsrum som også findes for de 175 sandjordsprofiler fra profildatabasen (sammenlign figur 9.3 og 9.5 i bilag 9).

### 5.1. Grundlag for zonering

Det er, som forudsætning for at det vil være muligt at identificere særligt pesticidfølsomme sandjordsarealer, vist at der er generel forskel på hvor stor relativ udvaskning der simuleres på forskellige sandjorde, figur 36 samt kapitel 3.3 og bilag 9.

Den foreslåede angrebsvinkel til identifikation af særligt pesticidfølsomme arealer bygger på at det gennem nærværende arbejde har været muligt at pege på forholdsvis simpelt og billigt tilgængelige jordegenskaber, som tilsammen rummer information om jordens iboende følsomhed overfor udvaskning (uden at inklludere varierende nedbrydning). Det er en forudsætning for udpegning af de særligt pesticidfølsomme arealer med udgangspunkt i projektets resultater, at disse jordegenskaber er til rådighed eller kan skaffes med tilstrækkelig geografisk dækning.

Udpegningen af de jordegenskaber, der er mest afgørende for hvor stor pesticidfølsomheden beregnes at være, er sket på baggrund af undersøgelser for fire pesticider (modelstoffer) som forlods kunne formodes at være repræsentative for bredden i pesticiders egenskaber. Undersøgelserne har vist, at den viden der er opbygget om de fire pesticiders udvaskningsforhold svarer til at pesticiderne overordnet kan inddeles i to grupper af stoffer. En statistisk vurdering af 34 yderligere pesticider viser således, under hensyn til de fundne spredninger i resultaterne, at alle disse pesticider kan henføres til en af disse to grupper. Den altdominerende gruppe inkluderer MCPA og MTB. Undersøgelserne viser at et stof (fx. MCPA) hører hjemme flere forskellige steder i den dominerende gruppe, hvilket skyldes variationsbredden i de data der er med til at karakterisere bindingsevnen (Kf/Kd) for MCPA i de forskellige datasæt (hovedprojektet, litteraturstudiet og stofgruppeprojektet), figur 31. En meget lille del af de undersøgte pesticider (3 ud af de 34) falder udenfor denne gruppe, og for disse må der iværksættes en selvstændig vurdering baseret på det enkelte pesticids fysiske og kemiske egenskaber.

Gennem arbejdet er det blevet klart at jordens forholdsvis stabile udvaskningsegenskaber (hydrauliske og bindingsegenskaber) i hovedtrækkene kan karakteriseres på grundlag af humusindhold og indhold af ler og silt. Yderligere detaljering af de stabile forhold som influerer på hydraulik og binding kræver oplysninger om flere jordegenskaber, tabel 9. Mens hydrauliske- og bindingsforhold afhænger af jordegenskaber, som i hovedtrækkene kan kortlægges med forholdsvis enkle midler, og hvis variabilitet tildels kan fastlægges indirekte, kræves der flere og vanskeligere opnåelige data for at karakterisere nedbrydningsforholdene i jorden. Dette afspejler ikke at nedbrydning er uden betydning. Tvært imod vil aktuel nedbrydning formodentlig kunne nedgradere graden af følsomhed overfor specifikke pesticider for en del arealer.



*Figur 35.* Graden af overensstemmelse mellem simuleret udvaskning i kvadratnetsprofiler på sandjord af MTB og et modelstof, hvis egenskaber tager udgangspunkt i "MCPA's" egenskaber (et beregningsmæssigt stof).

Figur 35 illustrerer at det i betydelig grad er i de samme profiler der simuleres hhv. høj og lav udvaskning for stoffer, som hører til den store gruppe af pesticider. De 12 meget høje værdier for MTB skyldes at nogle af analyseresultaterne af MTB's binding er under detektionsgrænsen og derfor er sat = 0. Denne svaghed i data vedr. MTB er baggrunden for at videre vurderinger af følsomme arealer er baseret på et MCPA-lignende stof frem for på MTB (se yderligere i bilag 9 og 10).

Vanskeligheden ved at kortlægge jordens følsomhed på grundlag af nedbrydning er at den er stofspecifik og afhængig af aktuel landbrugspraksis. Graden af følsomhed, baseret på nedbrydning, ville således ændre sig geografisk og gennem tiden for de enkelte stoffer og kræve kendskab til fordelingen af specielle jordegenskaber, hvis variabilitet, selv i et øjebliksbillede, er vanskelig at fastlægge.

En generel kortlægning af følsomhed overfor udvaskning af pesticider på grundlag af hydrauliske og bindingsegenskaber etablerer derimod en relativt uforanderlig karakterisering som angiver et niveau, i forhold til hvilket en nedbrydningseffekt i reglen vil

mindske følsomheden (udvaskningsberegningen er gennemført med en fast nedbrydningsværdi svarende til 80% fraktilen, hvorfor anvendelsen af aktuel nedbrydning i nogle tilfælde vil øge udvaskningen.

#### Profilernes repræsentativitet

For at kunne vurdere, hvorvidt projektets resultater kan tillægges generel betydning for sandjorde, er det undersøgt hvor godt de valgte undersøgelsesmarker repræsenterer deres landskabelige omgivelser, jordartsmæssige pendanter, m.v., tabel 12 og bilag 1 - 4. Denne repræsentativitetsundersøgelse karakteriserer de udvalgte lokaliteter og sammenligner dem med eksisterende data fra bl.a. Teksturdatabasen. Det er på denne måde vurderet at de undersøgte lokaliteter er gode repræsentanter på statistisk niveau, figur 36.

Tabel 12. Tabellen viser hvor udbredt og skønsmæssigt vigtig jordtypen er for grundvandsdannelsen og -ressourcen i Danmark. Vurderingsarealet for forskellige jordarter på jordartskortet 1:200.000 omfatter kun landbrugsarealer (højbund). Smeltevandssand og -grus udgør overvejende områder af betydning for grundvandsdannelsen. Opgørelsen af arealet inkluderer ca. 1000 km<sup>2</sup> smeltevandsgrus, som ikke fremgår af tabellen, men som forventes overvejende at være særligt følsomt overfor pesticidudvaskning. Sen- og postglacialt ferskvandssand ligger overvejende i områder med ringe grundvandsdannelse. Det anslås at kun en fjerdedel af flyvesandet er dyrket, men til gengæld forventes det overvejende at være særligt følsomt, idet det generelt har lavt humus, ler- og siltindhold. Morænesand vurderes (i modsætning til Yoldiasand) overvejende ikke at være særligt følsomt (se også figur 36). Saltvandssand og –grus udgør overvejende områder med ringe interesse for grundvandsdannelse, fx. på grund af saltproblemer. De undersøgte landskabselementer/marker er domineret af de jordarter, som er angivet med X.

Sandjor	dsarealer	Grundvands-	Jylland	Hele Danmark	Undersøgelses-
Symbol	Navn	interesse	km <sup>2</sup>	km2	marker
DS	Smeltevandssand	Stor	5334	8277	Х
TS	Senglacialt ferskvandssand	Lille	2571	4274	
FS	Postglaciale ferskvands lag	Lille	1694	5059	
ES	Flyvesand	Mellem	585	1917	
MS	Morænesand	Stor	1284	1972	х
HS	Saltvandssand	Lille	194	2710	
HG	Saltvandsgrus	Lille	17	232	
YS	Yoldia sand	Stor	550	771	х
SUM			12235	25218	

I projektets resultater indgår imidlertid sammenligninger med Profildatabasens kvadratnetsprofiler. Kvadratnetsprofilerne (beliggende med 7 km indbyrdes afstand) er placeret i et net, figur 37. På grund af den systematiske placering af kvadratnetsprofilerne er de her antaget at repræsentere de mest udbredte jordarter i korrekt indbyrdes proportion. Den gode sammenhæng som er fundet mellem fordelingen af projektets egne og følsomhed og tilsvarende egenskaber overfor udvaskning, profilers for kvadratnetsprofilerne, anses for at underbygge de undersøgte lokaliteters repræsentativitet for danske sandjorde.

Variationen af en lang række jordegenskaber er beskrevet i datarapporterne 3 – 10, hvor variationen indenfor undersøgelsesmarkerne er vist i "boblediagrammer" og med statistiske informationer, se også bilag 4. Imidlertid kan der være forskel på den

variabilitet, som er beskrevet med de aktuelle dataindsamlingspunkter og den "virkelige", iboende variabilitet. Variabiliteten må derfor mest nærliggende vurderes ved en variogramamalyse. Datatætheden og -mængden er imidlertid for de fleste jordegenskaber utilstrækkelig til en variogram analyse. Variabiteten er derfor vurderet for de jordegenskaber, som benyttes i det foreslåede grundlag for en generel zonering efter følsomhed overfor udvaskning af pesticid, baseret på hydrauliske egenskaber og binding. Denne fortolkning af variabiteten, og dens betydning for udvaskningsfølsomheden, tager udgangspunkt i en af spredning på såvel profil- som markskala, bilag 3B.

Den foreslåede løsning af problemet med at vurdere følsomheden under hensyntagen til variabiliteten ligger i en karakterisering af særligt følsomme arealer ved en kombineret fortolkning af geoelektriske målinger (EM38, som kån danne grundlag for en statistisk holdbar variogram-undersøgelse), indsamlede punktoplysninger og viden om områdets pedologi og geologi.

Samlet har undersøgelserne af variabilitet vist, at den er karakteristisk forskellig for forskellige landskabselementtyper, men at den kan karakteriseres på baggrund af geoelektriske variabilitetsstudier (EM38), som viser hvor langt profiloplysninger kan ekstrapoleres (bilag 3B). Denne vurdering er ikke enkel, bl.a. på grund af skalaproblemer med EM38, men med passende skalering "tegner" Em38-kortene fordelingen af ler og silt, sådan at der til den generelle karakteristik af følsomhed fortrinsvis skal kunne skaffes oplysnnger om indholdet af humus (og volumenvægt). Humus findes overvejende i Ahorisonten (tiltider også i B-horizonten) således at det ofte vil være tilstrækkeligt at indsamle disse oplysninger fra A-horisonten. Ud fra viden om den pågældende jordarts sammensætning og databaseværdier kan volumenvægten, der i øvrigt udviser ringe absolut variation i forhold til de øvrige benyttede variable, anslås.

Variabilitetsundersøgelsen peger på at de mest følsomme arealer også er de, hvor der er størst variation i hhv. humusindhold og indhold af ler og silt, mens de ikke særligt følsomme arealer er relativt homogene og derfor lettere at karakterisere.

#### Jordegenskaber der beskriver følsomhed i forhold til pesticidudvaskning

Udvaskningen er simuleret med modellen MACRO4.3. Inputparametrene til MACRO modellen beskriver jordens hydrauliske forhold, den stofspecifikke binding og nedbrydningen. Disse modelparametre beskriver de tre processer der er afgørende for om, og i hvilket omfang, der sker udvaskning af pesticid fra sandjord. De hydrauliske egenskaber har betydning for hvor lang tid vandet opholder sig i den umættede zone. Stoffets binding har indflydelse på dets opholdstid i den umættede zone, mens en nedbrydning (forsvinding og mineralisering), som forløber fuldstændigt, i sidste ende fjerner stoffet fra den umættede zone, så der ikke sker en udvaskning til grundvandet.

De jordegenskaber der beskriver jordens hydrauliske egenskaber er kornstørrelsesfordelingen, indholdet af organisk kulstof og volumenvægten, figur 20. Et højt indhold af de fine kornstørrelser er sammen med stigende volumenvægt med til at nedsætte den hydrauliske ledningsevne og dermed forlænge vandets opholdstid i den umættede zone (øge retentionen). Omvendt betyder et stort indhold af de grove kornstørrelsesfraktioner at jorden lettere afdrænes, hvilket også synes at være effekten af et højt indhold af organisk kulstof i jordprofilen, antagelig på grund af strukturdannende egenskaber.

Bindingen af pesticid er detailundersøgt for fire stoffer. De jordegenskaber der samlet kræves for at beskrive hovedtrækkene i den del af bindingen der ikke kan brydes ved en ekstratktion i laboratoriet, er indholdet af organisk stof, pH og kornstørrelsesfordelingen.

Det er dog ikke alle disse jordegenskaber der indgår i beskrivelsen af hvert enkelte stofs binding. Højt indhold af organisk kulstof betyder for MTB og MCPA øget binding, mens afhængigheden for glyphosat er mindre klar. Afhængigheden af pH er mere entydig, idet faldende pH betyder en stigende binding. Med hensyn til kornstørrelsesfordelingen medfører en større andel af de fine kornstørrelser en øget binding af stofferne.

Nedbrydning af pesticid er detailundersøgt for tre stoffer. Nedbrydningen er beskrevet ved forsvindingstiden, hvilket betyder at både omsætning af stoffet og ikke ekstraherbar binding indgår i bestemmelsen. Beskrivelsen af nedbrydningen ud fra jordegenskaber er langt mere kompleks end beskrivelsen for hydrauliske parametre og binding. De jordegenskaber der samlet kræves for at beskrive stoffernes nedbrydning er: indholdet af organisk stof, pH, ombyttelige brintjoner, kornstørrelsesfordelingen, indholdet af jern og aluminium, samt diverse mål for den biologiske aktivitet. Dertil kommer at de forskellige pesticider fordrer forskellige parametre for en vurdering (tabel 9). Det store antal forskellige oplysninger, der skal bruges til en nedbrydningsvurdering, og nedbrydningens dyrkningsafhængighed, gør, at en sådan vurdering må være stofspecifik og derfor vanskeligt kan udgøre grundlaget for en generel udpegning af særligt pesticidfølsomme arealer. Generelt er der større lighed mellem afhængighederne af jordegenskaber for MCPA og MTB end for MTA. Ved højere indhold af organisk kulstof går nedbrydningen for MTB og MCPA hurtigere, mens det ikke har betydning for nedbrydningen af MTA.

Effekten af variationer i en række andre jordegenskaber, som influerer på forudsigelsen (korrelationen) af de konkrete stoffers simulerede udvaskning, binding og nedbrydning er undersøgt, bilag 10. Disse egenskaber (fx. pH) har betydning for korrelationerne, specielt ved en rangordning af ikke særligt sårbare arealer. Det har imidlertid, i bestræbelsen på at finde en simpel fællesmængde af oplysninger, som har generel udsagnskraft for mange stoffer på en gang, vist sig at de kan undværes i karakteriseringen af de aller mest følsomme profiler/arealer. Disse egenskaber må geninddrages dersom det vælges af detaljere den generelle karakteristik af følsomhed, især i forhold til nedbrydning.

Jorde med ringe følsomhed i forhold til udvaskning af pesticid har lav hydraulisk ledningsevne, høj vandretention, høj binding og stor nedbrydning af stof. De jordegenskaber der samlet beskriver jordens følsomhed er: indholdet af organisk kulstof, kornstørrelsesfordelingen, volumenvægt, pH, indholdet af jern og aluminium og et mål for den biologiske aktivitet (nogle af disse jordegenskaber kan variere i løbet af et år). Heraf er det jordegenskaberne "indhold af organisk kulstof" og "indholdet af de fine kornstørrelser (ler og silt)", som er særligt afgørende. Generelt vil en stigning i indholdet af organisk stof betyde en faldende følsomhed grundet højere binding og nedbrydning af pesticiderne. Stigende indhold af organisk stof i jordprofilen medfører en højere hydraulisk ledningsevne, men denne effekt overskygges af det organiske kulstofs betydning for de stofspecifikke parametre, således at høit indhold af organisk stof samlet set begrunstiger en tilbageholdelse. Hvor volumenvægten er relativt høj og der er et forholdsvis stort indhold af de fine kornstørrelser er følsomheden overfor udvaskning af pesticid alt andet lige generelt mindre, idet højt ler- og siltindhold medfører høj retention og lav hydraulisk ledningsevne, og bidrager til øget binding af pesticid, samtidig med at volumenvægten tenderer til at være lidt højere for jorde med højt indhold af de fine kornstørrelser på grund af muligheden for tættere pakning. Jordenes pH-niveau har primært betydning for bindingen af stofferne, hvor et faldende pH-niveau, afhængig af det konkrete stof, giver en højere binding og dermed en lavere følsomhed overfor pesticidudvaskning (denne effekt af højt pH har ikke afgørende betydning for karakteriseringen af de "særligt følsomme arealer").

#### Repræsentativitet af modelstofferne

Erfaringsgrundlaget for udpegning af jordegenskaber af betydning for sårbarheden bygger på viden indhentet for fire pesticider (modelstoffer). Yderligere er der gennemført undersøgelser for 34 pesticider med henblik på at generalisere resultaterne for de fire pesticider. Arbejdet omhandler både laboratorieundersøgelser og en indsamling af resultater fra litteraturen (litteraturrapporten). Generaliserbarheden er vurderet i forhold til begge de pesticidspecifikke forhold, binding og nedbrydning.

Bindingen for de fire detailundersøgte pesticider beskrives af indholdet af organisk kulstof, pH og kornstørrelsesfordelingen, hvor specielt ler og silt spiller ind. Idet risikoen for at MTB og MCPA udvaskes helst skal være lav, er det optimalt med et højt indhold af organisk kulstof og ler (og silt). Resultatet af undersøgelsen viser at langt hovedparten af stofferne har samme type afhængigheder som er blevet fundet for to af de detaliundersøgte pesticider: MCPA og MTB. Generelt bindes stofferne hårdere i jorde med højt indhold af organisk kulstof og ler, samt lavt pH.

Vurderingen af de fire detailundersøgte pesticiders nedbrydning ud fra jordegenskaber bygger på en kvalitativ sammenligning af de faktiske værdier for forsvinding. Blandt de fire modelstoffer har MPCA en høj generel nedbrydning og glyphosat en høj nedbrydning i overjord og lav i underjord, mens MTA og MTB har en generel lav nedbrydning. Undersøgelsen af et stort antal stoffer (34) viser at de fire detailundersøgte pesticider udspænder udfaldsrummet for nedbrydning godt. Det vurderes derfor at de tendenser der findes for de fire pesticider kan forventes at være gældende for en langt større gruppe stoffer, men at årsagen til variationerne for det enkelte pesticid på forskellige jordtyper, skyldes helt forskellige egenskaber.

Den viden der er opbygget for de fire pesticider omkring hvilke jordegenskaber der skal anvendes til at udpege særligt følsomme arealer vurderes, specielt med hensyn til stoffernes binding og de hydrauliske egenskaber, at ville kunne nyttiggøres så den gælder for hovedparten af de 34 undersøgte stoffer. Det er ikke konkret vurderet hvorvidt dette resultat også er dækkende for de øvrige nuværende/fremtidige pesticider, men med den store udspænding i de undersøgte pesticiders egenskaber og det store udfaldsrum for resultaterne er en sådan gyldighed sandsynlig og nærliggende. Dette vil forholdsvis enkelt kunne verificeres, idet en række målinger af binding og nedbrydning på kendte jordtyper kan klassificeres i forhold til de 34 undersøgte pesticider.

Hvorvidt en zonering baseret på egenskaber for hovedparten af pesticiderne vil være tilstrækkelig til også at sikre beskyttelsen i forhold til de pesticider, hvis egenskaber falder udenfor denne gruppe, er vanskelig at vurdere konkret. Imidlertid vil der ikke, indenfor de arealer der er udpeget som særligt følsomme, være risiko for udvaskning, dersom der her indføres et generelt forbud mod at anvende pesticider. For de arealer der ikke er generelt særligt følsomme, kan der teoretisk være mulighed for at visse arealer i denne gruppe udviser særlig følsomhed overfor netop et eller flere af disse pesticider. Varslingssystemet for Pesticider udspænder væsentlige egenskaber for disse stoffer, og det vil derfor være muliqt at sådanne arealer er beskyttet via restriktioner i medfør af godkendelsesordningen, herunder Varslingssystemet for Pesticider. For pesticider der ikke falder indenfor hovedgruppens egenskaber, skal der foretages en konkret vurdering baseret på det enkelte pesticids aktuelle egenskaber.

#### 5.2. Strategi for zonering

Den omstændighed at der findes simple jordegenskaber der indeholder nødvendig og tilstrækkelig korreleret information om den generelle følsomhed af et areal i forhold til pesticidudvaskning, til at følsomheden kan forudsiges, viser at der foreligger et grundlag for en mulig praktisk zonering. Dersom en detailkortlægning af alle de mest betydningsfulde jordegenskaber ikke er realistisk for hele det danske sandareal kan følgende mere pragmatiske løsning overvejes.

En praktisk strategi for en eventuel zonering kunne være baseret på en udpegning af de områder, hvor der er størst risiko for udvaskning af de mest mobile og sværest nedbrydelige blandt de godkendte pesticider. Det må således forventes at kun en lille del af de godkendte pesticider vil have en problematisk udvaskningsrisiko indenfor de udpegede særligt følsomme områder. Karakteriseringen af sandarealers følsomhed overfor udvaskning af pesticider kan ske på baggrund af eksisterende eller let tilgængelige data. Vurderingen indebærer en karakterisering som ikke særlig følsomt, potentielt følsomt eller særligt følsomt. Indenfor den mellemste "potentielt følsomme" kategori kan nogle delarealer om nødvendigt, ved nærmere og mere omfattende karakteristik og detialkortlægning af de jordegenskaber som er nødvendige til beskrivelse af hydraulik, binding og (i princippet også) nedbrydning, omklassificeres til en af de andre kategorier..

Denne vurdering foreslås at ske på baggrund af forholdene i jordens øverste meter, dels fordi processerne i denne zone kvantitativt er langt de vigtigste i forhold til binding og nedbrydning af pesticid, dels og sekundært fordi kortlægning af dette øverste jordlag er ulig nemmest. Et pesticid der forlader rodzonen betragtes altså i denne sammenhæng som udvasket til grundvandet, vel vidende at der i den dybere del af den umættede zone vil kunne forekomme jordlag med egenskaber, der mindsker risikoen for at stoffet når grundvandet. Tilstedeværelse af sådanne jordlag vil yderligere mindske den beregnede følsomhed overfor forurening af grundvandet (i forhold til den foreslåede enkle karakteristik). Derfor er det et konservativt valg at tage udgangspunkt i forholdene i rodzonen, hvilket også er praksis ved godkendelse af pesticider. Med kendskab til forholdene i de dybe jordlag kan karakteristikken af særligt følsomme områder således detaljeres yderligere. De konkrete simuleringer har dog vist at denne effekt i den dybereligende umættede zone er beskeden for modelstofferne, bilag 9.

#### Jordegenskaber og afskæringsværdier ved karakterisering af jordens følsomhed

Karakteriseringen af sandområders følsomhed overfor udvaskning af pesticid, som i eksemplet, hvor tre kategorier af følsomhed udskilles, må ske på baggrund af de jordegenskaber som har mest betydning for beskrivelsen af et areals følsomhed overfor udvaskning fra rodzonen. Korrelationsanalyserne til de simulerede udvaskninger viser at indholdet af organisk kulstof, lerindhold og volumenvægt er de tre vigtigste jordegenskaber, figur 20. Indholdet af organisk kulstof påvirker især binding og nedbrydning af stof, mens lerindholdet og indholdet af organisk stof (normaliseret ved omregning med volumenvægt) særligt har betydning for de hydrauliske egenskaber. Karakteriseringen vil derfor kunne baseres på en vurdering af det samlede indhold af organisk kulstof, og ler og silt i jordens øverste meter.

Det samlede indhold af organisk kulstof i den øverste meter kan anslås som en funktion af indholdet af organisk stof (koncentrationen) og tykkelse af A-horisonten. Denne beregning tager hverken højde for et evt. aftagende indhold af organisk kulstof fra bunden af pløjelaget til bunden af A-horisonten eller til organisk kulstof i en evt. underliggende Bh-horisont. Der er lavet en følsomhedsanalyse for A-horisontens tykkelse som viser at jorde,

hvor stoffets opholdstid er stærkt afhængig af binding, er mere følsomme overfor Ahorisontens tykkelse end jorde hvor lav hydraulisk ledningsevne også spiller en rolle i tilbageholdelsen af stof. Da bindingen for hovedparten af de undersøgte stoffer hænger sammen med indholdet af organisk stof og da hydraulikken blandt andet afhænger af lerindholdet, kan en fremgangsmåde til en identifikation af særligt pesticidfølsomme områder indebære fastlæggelse af afskæringsværdier for organisk kulstofindhold under hensyntagen til ler- og siltindholdet og vægtet efter volumenvægt. De afskæringsværdier der vil kunne benyttes fremgår af tabel 13. Den arealstørrelse, hvor kortlægning af sandjordes følsomhed er relevant efter de opstillede forudsætninger er anslået i tabel 12. Landskabselementernes betydning for vurderingen af særlig følsomhed hænger sammen med at der er forskel på variabiliteten indenfor de forskelige elementer.

**Tabel 13.** Afskæringsværdier for indhold af organisk kulstof (humus), ler og silt i den øverste meter af jorden, svarende til eksemplet i kapitel 4.9. Når de samhørende værdier for et område er lavere end de højeste angivne værdier eller relation er er området i den mest følsomme af de to kategorier som kriteriet adskiller.

	1. afgrænsning		2. afgrænsning	
Eksemplet	Humus, kg/m <sup>2</sup>	Ler+silt, kg/m <sup>2</sup>	Ler+silt, kg/m <sup>2</sup>	Humus, kg/m <sup>2</sup>
3	17	130	Ler+silt<-10*humus	+350

Til videregående identifikation af særligt pesticidfølsomme områder (indenfor den følsomhedsmæssige mellemkategori af pesticidfølsomme områder) er der behov for en vægtet vurdering af udvaskningsrisikoen på basis af alle de jordegenskaber, som har vist sig at have betydning for korrelation af simuleret udvaskning, binding, nedbrydning og hydrauliske egenskaber. Denne vurdering må baseres på en kombination af eksisterende og nyindsamlede data som testes i den fortolkningssammenhæng som er etableret, dvs. i en simulering, ved korrelation, ved en sammenligningssamling eller evt. i en regnearksformel.

#### Udmøntning i landskabet

Undersøgelserne er gennemført for jordprofiler, hvilket i landskabet svarer til udnyttelse resultaterne punktoplysninger. Den praktiske af forudsætter at punktoplysningerne kan omsættes til en karakterisering af arealer. De i alt ca. 200 profiler, som er blevet undersøgt i projektet, ligger i områder, som er domineret af smeltevandssand, ferskvandssand, Yoldiasand og morænesand, figur 3. Profilerne er spredt ud over sandjordsområder i Jylland, hvor disse jordarter er mest udbredt. Det vurderes derfor at det forholdsmæssige antal af profiler, som illustrerer særlig følsomhed for pesticidudvaskning, tilsvarende afspejler forholdet mellem arealernes følsomheder for de undersøgte sandjordstyper og landskabselementer.

De øvrige sandjordstyper er :

- Postglacialt ferskvandssand (~5000 km<sup>2</sup> i hele landet), som i betydeligt omfang ligger i lavninger uden grundvandsdannelse.
- Sen- og postglaciale havaflejringer (~3000 km<sup>2</sup> i hele landet), som er udeladt da de er af begrænset interese i drikkevandssammenhæng.
- Flyvesand (~1900 km<sup>2</sup> i hele landet), som formodes at være særligt følsomt, men hvoraf det antages at kun en fjerdedel (~450 km<sup>2</sup> udgør landbrugsområde).

En praktisk udnyttelse af resultaterne i eksemplerne forudsætter, at de benyttede oplysninger om jordegenskaber kan kortlægges med udgangspunkt i eksisterende data og/eller nyindsamlede data, og at det er muligt at tolke landskabet i forhold til disse data.

Der eksisterer databaser med oplysninger om kornstørrelsesfordelinger og humusindhold, omend oplysningerne ikke nødvendigvis dækker den fulde variation i landskabet (fx. topografi). Volumenvægt er den dårligst dækkede oplysning, men kan tildels anslås på baggrund af erfaringsværdier for de forskellige jordtyper, idet værdierne er relativt konstante og har lille variation i forhold til variationen i prædiktionen og simuleringen af udvaskning. I profildatabasen er der 2200 oplysninger om sandjordes volumenvægt.

Nogle af de data, som er nødvendige for at gennemføre supplerende beregninger, svarende til en detaljering af karakteriseringen af følsomhed, kan hentes fra eksisterende databaser.

Kortlægning af denne type, hvor eksisterende punktoplysninger suppleret med nyindsamlede data udbredes til at karakterisere arealer, anvendes i mange sammenhænge. Anvendelsen bygger på en stor erfaring og rutine som også anses for brugbar i forbindelse med identifikation af særligt pesticidfølsomme arealer, når blot variabiliteten tages i betragtning, 3A og 3B. Det etablerede grundlag for identifikation af særligt pesticidfølsomme sandjorde forventes således tilsvarende at kunne omsættes i konkret kortlægning og afgrænsning af særligt pesticidfølsomme sandjordsarealer: at det er muligt at skalere fra punkt til areal.

#### Eksempel på zonering

En praktisk udnyttelse af resultaterne (som skitseret i eksemplet) forudsætter anvendelse af eksisterende data og/eller nyindsamlede data afhængig af på hvilken skala zoneringen skal udføres. Zoneringeseksemplet bygger udelukkende på anvendelse af eksisterende data i samme skala som det geologiske jordartskort, 1:25.000.

Informationer om overjorden (eksisterende data). Der findes en række kilder til informationer om overjordens egenskaber. Den vigtigste kilde til denne information er *Den Danske Jordklassificering*. Til denne klassificering blev der indsamlet et helt nyt landsdækkende datasæt, som består af tekstur analyser fra pløjelag og underjord. Der blev udtaget prøver fra omkring 36.000 lokaliteter, ca.1 prøve pr km<sup>2</sup>. Der blev ikke udtaget prøver fra by- og skovområder. Prøverne blev udtaget af lokale planteavlskonsulenter i samarbejde med de ansatte på Landbrugsministeriets Arealdatakontor, SDK. På laboratoriet blev prøverne analyseret for textur, organisk materiale og kalk indhold og resultaterne blev lagret i databaser på ADK. Landbrugsarealet blev klassificeret i 12 jordklasser afhængig af texturen i 0 – 20 cm dybde, tabel 14. Disse 12 jordklasser blev slået sammen til de 8 farvekoder som ses på det endelige kortværk. Jordtype grænserne på dette kortværk blev trukket i et samarbejde mellem SJF og lokale planteavlskonsulenter. Rest områderne blev opdelt i byområder og skovområder. På denne måde udnyttede man konsulenternes store lokalkendskab.

I 1980 var de 400 kort fra den danske jordklassificering færdig kompileret og trykt i 1:50.000.

			Percenta	ge by weig	<u>j</u> ht			-
Farve koder	Jord type	JB- nr.	Ler < 2 μm	Silt 2-20 μm	Finsand 20-200 μm	Total Sand 20-2000 μm	Org. Mat. 58.7 % C	Kalk CaC O₃
1	Grovsandet jord.	1	0.5	0.20	0-50	75 100	≤ 10	
2	Finsandet jord	2	0-5	0-20	50-100	75-100		
3	Lerblandet	3	5-10	0-25	0-40	65-95		≤ 10
Ū	sandjord	4	0 10	0 20	40-95	00 00		
4	Sandblandet	5	10-15	0-30	0-40	55-90		
-	lerjord.	6		0.00	40-90	00 00		
5	Ler jord.	7	15-25	0-35		40-85		
		8	25-45	0-45		10-75		
6	Svær lerjord of siltjord.	9	45-100	0-50		0-55		
		10	0-50	20-100		0-80		
7	Organisk jord.	11					> 10	0-90
8	Kalk jord	12					≤ 10	> 10

### Tabel 14. Definitioner af jordklasser og jordtyper

<u>1844 matriklen.</u> *1844 matrikelboniteringen* indeholdt en landsdækkende kortlægning af matriklerne samt udtegningen af et nyt matrikel kort (1:4000). Derudover blev jorderne boniterede efter deres produktions potentiale, figur 36. Jorderne blev vurderet i henhold til en 24 trins skala og den bedste jord fik takst 24, referencelokaliteten for takst 24 er beliggende i Karlslunde mellem Roskilde og Køge. Markernes bonitet samt deres størrelse var grundlaget for bestemmelse af de forskellige gårdes hartkorn, som var beskatningsgrundlaget. 1844 matrikelboniteringen blev brugt som skattegrundlag i ca. 60 år. I 1903 blev en ny skattelovgivning vedtaget hvor hartkorn forsvandt som beskatnings grundlag. Ikke desto mindre er 1844 matriklen fortsat meget anvendt.



Figur 36. Scannet matrikkelkort fra 1844

<u>Jordprofilundersøgelsen (underjorden).</u> I løbet af firserne blev der gennemført to store landsdækkende kampagner. I disse blev der udført detaljerede jordprofilundersøgelser og et omfattende analysearbejde (Madsen og Jensen 1985). Den første kampagne blev gennemført i forbindelse med etableringen af hovedgasledningen fra Nordsøen på tværs af Danmark til København. Denne kampagne, hvor der blev der beskrevet ca. 800 profiler, blev gennemført fra 1981-84.

I den anden kampagne etablerede Landbrugets Rådgivningscenter i 1986 et 7 km kvadratnet som indeholdt ca. 850 punkter. I alle punkter blev der udført jordprofilundersøgelser. Undersøgelsen blev gennemført i perioden fra 1987-1990 i et samarbejde mellem Landbrugsministeriets Arealdatakontor (ADK) og Geografisk Institut på Københavns Universitet.

Disse to kampagner dannede grundlaget for etableringen af Den Danske Jordprofil Database, som administreres af Danmarks JordbrugsForskning (se figur 37).



Figur 37.: Placering af Jordprofilerne fra Den Danske JordprofilDatabase

Alle jordprofiler blev beskrevet efter retningslinier (Madsen & Jensen, 1988). Der blev taget prøver til analyse fra alle profilerne, prøverne blev udtaget fra pedologiske horisonter, textur, organisk C, pH og kalk indhold blev bestemt på alle horisonter. På udvalgte horisonter blev der endvidere bestemt DC og Pyrofosfat extraherbar Fe og Al, CEC, udbytbare base, total N og P, lermineralogi og vandindhold. Disse oplysninger lagres i Den Danske Jordprofil Database.

<u>Det Geologiske Jordartskort.</u> I 1888 påbegyndtes en landsomfattende kortlægning af den geologiske jordart i 1 meters dybde. Kortet viser den geo-genetiske jordart, så som Moræne, Flyvesand eller Ferskvandstørv. Derudover viser kortene en grov tekstur klasse; Grus, Sand, Silt, Ler. Grænsen mellem Ler og Sand er ca. 15% ler.

90% af Danmark er på nuværende tidspunkt kortlagt og er tilgængeligt i digital format i skala 1:25.000. GEUS har herudover lavet en landsdækkende version i 1:200.000.

Kortlægningen af jordarterne bliver I praksis udført med et 1 meter langt jordbor hvormed geologen udtager en lille prøve fra 1 meters dybde, både jordart og tekstur klassen er vurderet på denne prøve. Normalt er der kun angivet en jordart pr. boring men i nogle tilfælde hvor jorden er lagdelt kan der angives to jordarter pr boring.

Geologen går igennem landskabet i transekter med 100-200 meters afstand og borer ligeledes med 100-200 meters afstand. Den nøjagtige lokalisering samt jordarten er indtegnet på et målebordsblad (1:20 000). Grænserne mellem jordarterne er ligeledes færdigtegnet i felten.

<u>Statistisk bearbejdning.</u> For at kunne få jordbundsparametre knyttet til de arealdækkende kort skal der etableres en rumlig link mellem punkt data og kort data. Ved at anvende denne metode får man eksempelvis alle jordbundsprofiler som ligger indenfor DS på det geologiske jordartskort samlet i én gruppe. Dette link etableres både mellem teksturpunkter og farvekode kort og imellem jordprofiler og jordarskort mhp. Analyse af landskabet.

For alle arealklasser på de to arealdækkende kort kan der således, udfra databasens punkter inden for de respektive arealklasser, beregnes median værdier for ler, silt og humus, tabel 15.

Tabel 15. Medianværdier af ler-, silt- og humusindhold (samt følsomhedskategorier) beregnet ud fra landsdækkende jordbundsdatabaser for et større areal omkring det område der er vist i figur 38. Afskæringsværdierne fremgår af tabel 13.

Jordart	Ler kg/m <sup>2</sup>	Silt ka/m <sup>2</sup>	Ler+silt ka/m <sup>2</sup>	Humus ka/m <sup>2</sup>	Følsomhed (gns.)
DG	134	92	225	17,3	Ikke særlig
DS	69	89	158	14,9	Potentiel
ES	39	39	78	17,8	Potentiel
FS	53	74	126	15,4	Særlig
MG	68	75	143	20,8	lkke særlig
MS	68	105	173	17,3	Potentiel
TG	62	77	138	25,7	lkke særlig
TS	56	68	123	20,3	Potentiel

<u>Udmøntning i landskabet</u>. På baggrund af informationerne i jorddatabasen er der beregnet medianværdier for indholdet af ler, silt og humus i de forskellige jordarter i et større område øst for Nissum Bredning. Disse værdier er anvendt til at karakterisere udvaskningen i kategorier efter følsomhed, tabel 15. På grund af anvendelsen i eksemplet af medianværdier indenfor et større område for humus, og ler og silt, er den "potentielt følsomme" mellemkategori (gul i figur 38) mere udbredt end den forventeligt, og i forhold til figur 32, ville være med de eksakte og lokale data. Dette kan blandt meget andet (ud over medianværdierne) skyldes at det ikke er verificeret om teksturbasens data er vægtet i forhold til en eventuel effekt af topografi, hvor der kan være mere humus i lavninger. En medvirkende årsag kan desuden være at der er regnet med konstant volumenevægt. Figuren illustrerer imidlertid at der er realistisk potentiale i en sådan regional karakterisering af følsomhed.

De kriterier der ligger til grund for eksemplet og projektets resultater iøvrigt er forsøgsvis lagt ind i et beslutningsstøttesystem, bilag 15, som kan håndtere variabiliteten i data med henblik på konkrete vurderinger af følsomhed.



**Figur 38.** Forsøgsvis zonering af et område øst for Nissum Bredning. Grå arealer er lavbunde, som ikke er udvaskningsmæssigt karakteriserede. Røde områder er særligt følsomme. Gule områder er potentielt særligt følsomme og grønne områder er ikke særligt følsomme. Sammenlign tabel 15 og figurerne 33 og 34.

### 5.3. Usikkerhed

Usikkerheden på forudsigelserne af modelparametre og simulerede udvaskninger på basis af almindelige jordegenskaber er ikke konkret vurderet, men beskrevet ved at forudsigelserne gennemgående beskriver over 80% af den samlede variation ved den multivariate korrelation. Denne korrelationsusikkerhed fremstår som en uforklaret residual som bl.a. indeholder den ustrukturerbare del af simuleringsresultaterne, dvs. simuleringsusikkerheden. Den samlede usikkerhed (som inkluderer alt lige fra prøvetagning, opbevaring, prøveforberedelse og analyser til simulering og statistisk behandling) kan således antages at være indbygget i de sidste knapt 20% af variationen (pers. kom., Kim Esbensen). Resultaterne vurderes således at være gyldige for en majoritet af aktuelle kombinationer af almindelige jordegenskaber på et niveau som vil være realistisk i praksis i forhold til den geografiske variabilitet. Resultaterne vil derfor netop kunne anvendes til at sondre mellem arealer der er, eller ikke er, "særligt" følsomme overfor udvaskning af pesticid.

Beregningsresultaterne tilføjes yderligere usikkerhed når de føres ud i praksis i landskabet, idet der her adderes usikkerhed fra variabiliteten. Denne usikkerhed kommer til udtryk i spredningen i beregnede udvaskningsværdier i kombination med den kortlægningsmæssige usikkerhed. Den samlede usikkerhed der føres ud i landskabet vil afhænge af hvilke data, der er til rådighed, og hvilken erfaring der er opbygget for det pågældende areal.

Dersom usikkerheden ønskes minimeret kan der indsamles data til prædiktion af binding og hydraulik, hvorefter der gennemføres en modelmæssig simulering. Dette vil kunne være relevant i områder der karakteriseres som "potenntielt særligt følsomme".

Problemkredsen vedr. forvaltningsmæssige, juridiske og økonomiske aspekter af udlægning af beskyttelseszoner for særligt pesticidfølsomme områder indgår ikke i dette projekt.

#### 5.4. Verifikation

Det er væsentligt at fremgangsmåden til udpegning af særligt følsomme arealer i praksis viser sig at pege på arealer, hvor der reelt er en relativt høj risiko for udvaskning af pesticid. Derfor er pesticidudvaskningen fra fire marker med forskellige typer sandjorde, klima og landbrugsdrift, blevet moniteret gennem de seneste tre år, mhp. at verificere den foreslåede strategi, bilag 14. Der er indsamlet prøver af det aller øverste grundvand og analyseret for indhold af de anvendte pesticider. Også resultaterne fra de to VAP marker på sandjord inddrages i verifikationen.

Verifikationen sker ved at sammenligne reelt målte udvaskninger fra de seks marker (Verifikationsmarker og VAP-marker) med de forventninger til arealernes sårbarhed der kan opstilles på baggrund af de simple jordegenskaber, der indgår i karakteriseringen efter følsomhed, bilag 14. Dette foregår ved en sammenligning mellem de gennemsnitlige udvaskninger fra verifikationsmarkerne og markernes placering på den relative udvaskningsskala for sandjordes følsomhed overfor udvaskning, som projektet har etableret, tabel 18 og figur 39

Indplaceringen af VAP- og verifikationsmarkerne i den relative simulerede udvaskningsrækkefølge viser, at der er overensstemmelse mellem de enkelte markers indbyrdes placeringer i forhold til målte gennemsnitlige udvaskninger. Denne effekt vurderes at være robust til trods for store klimatiske forskelle på markerne, bilag 14. Også VAP-markernes relative indplacering er i overensstemmelse med resultaterne fra denne kilde, Kjær et al., 2002.

Det er således sandsynliggjort at projektets resultater vedr. identifikation og rangordning af profiler/arealer efter relativ følsomhed er i overenssstemmelse med en virkelig fordeling af følsomhed i landskabet.

Mark	Fladerne	e bæk	Hellevad	1	Nørager	r mark	Poulstrup		
Påvisninger, µg/l	Antal	Max konc	Antal	Max konc	Antal	Max konc	Antal	Max konc	
Fund i alt	77	23	37	6,2	50	0,45	28	1,2	
Middel koncentration		0,487		0,145		0,031		0,034	

Tabel 18. Sammendrag af pesticidfune på de fire verifikationsmarker.



Figur 39. Angivelser af variationsbredde (lodrette streger) medianværdi og (skæringspunkt med blå for korrelerede kurve) relative udvaskninger for verifikationsmarkerne, samt de specifikt korrelerede udvaskninger for de to profiler i hver af Varslingssystemet for Pesticiders sandjordsmarker (Jyndevad og Tylstrup). Disse værdier er sat i forhold til den simulerede udvaskning af modelstoffet MCPA i kvadratnetsprofilerne (blå kurve). Den relative udvaskningsværdi for "Jyndevad 1" er identisk med den laveste af de benyttede afskæringsværdier, 0,43, i relativ simuleret udvaskning.

Den store variabilitet indenfor særligt følsomme arealer, figur 39, medfører at der her lokalt vil forekomme flere grader af følsomhed (fra overordentlig høj til lav). Dette vil imidlertid ikke have nogen praktisk betydning dersom der, via påbud, ikke anvendes pesticider på disse "særligt følsomme arealer". Derimod vil de "ikke særligt følsomme arealer", hvor variabiliteten er mindre og den beregnede udvaskning lav, være omfattet af resultaterne fra Varslingssystemet for Pesticider og ikke kræve yderligere beskyttelsestiltag i denne sammenhæng. I mellemkategorien ("de potentielt særligt følsomme arealer") vil følsomheden for de relativt mest følsomme arealer være mindre end for de "særligt følsomme arealer", mens de relativt mindst følsomme arealer i denne kategori vil være omfattet af resultaterne fra Varslingssystemet for Pesticider.

# 6. Referencer

Barlebo, H.C., Ernstsen, V., Jacobsen, P.R., Nygaard, E., Torp, S., Vosgerau, H., Møller, I., Greve, M.H., Iversen, B.V., Jacobsen, O H., Winther, F.P., Elsgaard, L., Brinch, U.C., Jacobsen, C.S., Juhler R. og Olesen, S.E., 2002: Undersøgelses- og analysemetoder anvendt i forbindelse med undersøgelser af sandlokaliteter: Hvilke metoder er anvendt, og hvilke overvejelser er gjort? Koncept for Udpegning af Pesticidfølsomme Arealer, Rapport nr. 2, Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelse, Miljøministeriet, 62 s.

Grathwohl, P. & Halm, D.(eds.), 2004: Integrated Soil and Water Protection: risks from diffuse pollution (SOWA). EU EVK1-CT-2002-80022 project, 47 p., http://www.uni-tuebingen.de/sowa/

Greve, M.H., 2004: A Danish Soil Reference System for Soil Interpretation on a detailed scale. Ph.D. Thesis University of Copenhagen.

Greve, M.H. og P.E.Larsen, 2000: Præsentation og anvendelse af digitalt matrikelkort fra 1844. In "Aktører i Landskabet". Red. Møller, P.G., Holm, P. & Rasmussen, L., Odense Universistes forlag.

Greve, M. H., Nehmdahl. H. and Krogh, L., 2003: Soil mapping on the basis of soil electrical conductivity measurements with EM38. p. 26-34. In: Lindén, B. and Olesen, S. (eds.) Implementation of Precision Farming in Practical Agriculture. Proc. Seminar No. 336, Nordic Association of Agricultural Scientists, Skara, Sweden. 10 - 12 Jun. 2002. DIAS Report, Plant Production No. 100, Tjele, Denmark.

Kjær, J., Ullum, M., Olsen, P., Sjelborg, P., Helweg, A., Mogensen, B., Plauborg, F., Jørgensen, J. O., Iversen, B. O., Fomsgaard, I. and Lindhardt, B., 2002: The Danish Pesticide Leaching Assessment Programme: Monitoring results, May 1999-July 2001, Geological Survey of Denmark and Greenland.

Madsen, H. B. og N.Jensen., 1985: Jordprofilundersøgelsen. Landbrugsministeriets Arealdatakontor.

Madsen, H. B. og Jensen, N., 1988: Vejledning til beskrivelse af jordprofiler. Landbrugsministeriets Arealdatakontor

Møller, I., 2001: Geofysik i umættet zone: En vurdering af metoder og instrumentsystemers genethed til kortlægning af den umættede zone. Koncept for Udpegning af Pesticidfølsomme Arealer, Rapport nr. 1, 85s.

Schaap, M.G., Leij, F.J. & van Genuchten, M.Th., 1998: Neural Network Analysis for Hierarchial Prediction of Soil Hydraulic Properties. Soil Sci. Soc. Am. J. 62: 847-855.

Touborg Jensen, S., 1961: Om jord og planter. Jordklassificering og jordbonitering. Artikel i publikationen Jord og Planter, Kbh. KVL.

Herudover refereres der til projektets egne data-, stofgruppe- og litteraturrapporter, samt projektets lerrapport (Ernstsen, red. 2004).

# Bilag 1. Geologi og Pedologi, Repræsentativitet

GEUS: Ingelise Møller, Henrik Vosgerau

DJF: Bjarne S. Hansen, Mogens H. Greve, Svend Elsnab Olesen, Søren B. Torp.

### Geologi.

På baggrund af de geologiske profilopmålinger, Jupiter boredatabasen samt georadarundersøgelser, vurderes undersøgelsesområdernes variation og forskellighed. I vurderingen er undersøgelsesområderne opdelt i landskabselementtyper. Endvidere vurderes det om undersøgelsesprofilerne er repræsentative for de respektive undersøgelsesområder og dermed også landskabselementtyper. Formålet hermed er at vurdere om landskabselementtyperne kan danne grundlag for opskalering af modelresultaterne vedr. pesticidudvaskning eller de simple jordegenskaber, som indirekte beskriver pesticidudvaskningen. Sluttelig beskrives udregninger af grundvandsdybden på grundlag af eksisterende datamateriale vedrørende grundvands- og terrænkoter.

<u>Sedimentære facies</u>. I udgravningerne, der knytter sig til fuldt program profilerne (profiler hvor der er gennemført det fulde undersøgelsesprogram), er sedimenterne inddelt i sedimentære facies, hvorfra der er udtaget prøver til måling af den hydrauliske ledningsevne. I figur 1.1 er vist typen af facies og den arealmæssige fordeling af disse opmålt på profilvægge i udgravninger inden for syv forskellige landskabselementtyper. Fordelingen baserer sig på en arealmæssig opmåling af de sedimentære facies i især C-horisonten, men i nogle tilfælde, hvis jordbundsudviklingen ikke har udvisket de sedimentære facies, også i B-horisonten.

I de tre udgravninger på Yoldiafladen domineres sedimenterne af finkornet sand, der er vandret lamineret (facies Sv) eller homogent (facies Sh). Sidstnævnte facies er i mange tilfælde udviklet ved marine organismers bioturbation af facies Sv, hvorved den oprindelige vandrette lamination er blevet udvisket. Den fine kornstørrelse, der dominerer sedimenterne i udgravningerne på Yoldiafladen, samt tilstedeværelsen af sedimentære strukturer i form af vandret lamination (facies Sv) og krydslamination (Sr), vidner om et roligt aflejringsmiljø, hvor sedimenterne blev aflejret fra suspension og bundstrømme i det marine aflejringsmiljø.

I udgravningerne på Weichsel moræneflader på Djursland og i Himmerland består sedimenterne af sandede, strukturløse blandingsbjergarter (facies Dmh), der repræsenterer morænesand afsat af gletschere. I alle udgravningerne er de sandede blandingsbjergarter grusede og indeholder sten og enkelte blokke. Matrix består hovedsagelig af mellemkornet sand med et silt- og lerindhold, der varierer lidt fra lokalitet til lokalitet. Enkelte lodrette sprækker ses i morænesandet ved Låstrup.

I udgravningerne på Weichselmoræneflader i Vendsyssel ses sandede, strukturløse blandingsbjergarter (facies Dmh), der repræsenterer morænesand afsat af gletschere. Morænesandet indeholder spredte gruspartikler og sten. Matrix domineres af svagt til stærkt leret, fint sand. Morænesandsaflejringerne er op til et par meter tykke og overlejrer på alle lokaliteterne smeltevandssand eller smeltevandsler. Lokaliteten ved Hellum skiller sig ud fra de to øvrige lokaliteter ved at morænesandet i dets øvre del stedvis er så leret, at der i realiteten er tale om stærkt sandet moræneler. Endvidere overlejres morænesandet ved Hellum af et tyndt lag smeltevandssand, hvilket ikke er tilfældet på de to øvrige lokaliteter, hvor morænesand udgør den øvre del af udgravningerne.

I alle udgravningerne på bakkeøerne er der sandede, strukturløse blandingsbjergarter (facies Dmh), der repræsenterer morænesand afsat af gletschere. Morænesandet er siltet, svagt gruset og indeholder enkelte sten, hvorimod lerindholdet varierer fra lokalitet til lokalitet (fra leret til stærkt leret). Sandet er hovedsageligt mellemkornet. Morænesandet i udgravningerne ved Hjortkær og Nr. Felding indeholder endvidere linser og striber af smeltevandssand. Enkelte lodrette sprækker ses i morænesandet ved Hjortkær. Ved lokaliteterne Astrup og Nr. Felding

overlejres morænesandet af mere velsorteret sand, der tolkes til at være flyvesand. I udgravningen ved Astrup er andelen af flyvesand ca. dobbelt så stor som andelen af morænesand.

I udgravningerne på alluvialkeglerne domineres sedimenterne af homogent eller dårligt lagdelt grus (facies Gd) samt af mellem- og grovkornet sand, der er trug eller planart krydslejret (facies St og Sp). Den ene lokalitet (Frederiks) skiller sig dog ud ved, at den indeholder færre grusaflejringer og ved, at der forekommer flydejord i form af dårligt sorteret sand (facies Dmh) i udgravningens øvre del. Sedimenternes generelt grove kornstørrelse på de tre lokaliteter vidner om højt energiniveau i smeltevandsfloderne på aflejringstidspunktet.

I udgravningerne på de proximale smeltevandssletter domineres sedimenterne af trugskrålejret sand (facies St), der er mellem- og grovkornet og stedvis gruset. Klastunderstøttede gruslag, der er strukturløse (facies Gd), forekommer endvidere i alle udgravningerne. Sedimenternes generelt grove kornstørrelse på de tre lokaliteter vidner om højt energiniveau i smeltevandsfloderne på aflejringstidspunktet.

På de distale smeltevandssletter er der kun opmålt sedimentære facies på to af lokaliteterne, da et højtstående grundvandsspejl ved Emmerske forhindrede, at udgravningen på denne lokalitet kunne laves så dyb, at sedimentære facies i C-horisonten kunne blotlægges. Sedimenterne på de to øvrige lokaliteter domineres af mellemkornet sand. Ved Simmelkær forekommer der dog også en del grovkornede sandlag. Ved Hogager er sandet hovedsageligt trugskrålejret (facies St) med sættykkelser på op til 1 m, hvorimod planart skrålejret sand (facies Sp) med sættykkelser på op til 40 cm dominerer i udgravningen ved Simmelkær. De planare og trugskrålejrede sandaflejringer tolkes at være dannet af sandbanker, der hovedsagelig migrerede nedstrøms i flettede smeltevandsfloder.

Det fremgår af det ovenstående, at der er mindre variationer i typen og fordelingen af sedimentære facies i udgravningerne inden for de enkelte typer af landskabselementer. En sammenligning af udgravningerne på tværs af landskabselementtyperne viser, at udgravningerne adskiller sig fra hinanden med hensyn til typen og fordelingen af sedimentære facies, bort set fra, at morænesandet både inden for Bakkeøerne og Weichselmorænefladerne består af strukturløse, sandede blandingsbjergarter (figur 1.1). Klassifikationen af sandede blandingsbjergarter er dog mindre detaljerede end for vandtransporterede sedimenter og afspejler således ikke de variationer i ler- og siltindhold, og tilstedeværelsen af sandlinser og sprækker, der er konstateret i udgravningerne indenfor og mellem Bakkeøerne og Weichselmorænefladerne. For eksempel synes blandingsbjergarterne at være relativt finkornede i udgravningerne på morænefladerne i Vendsyssel, idet sandet her er finkornet, i modsætning til i udgravningerne indenfor de to øvrige typer landskabselementer med morænesand, hvor sandet hovedsageligt er mellemkornet. Da der på morænesandslokaliteterne også forekommer smeltevandssand og flyvesand, er den geologiske variation, med udgangspunkt i den geologiske sammensætning i udgravningerne, større inden for Bakkeøerne og Weichselmorænefladerne end inden for de øvrige typer landskabselementer.

Andelen af grovkornede sedimenter falder generelt fra alluvialkeglen over den proximale smeltevandsslette til den distale smeltevandsslette. Dette ses ved, at andelen af grusede facies falder i denne retning samt ved, at de sandede facies domineres af mellem- og grovkornet sand indenfor alluvialkeglen og den proximale smeltevandsslette i modsætning til den distale smeltevandsslette, hvor de sandede facies i udgravningerne domineres af mellemkornet sand.



**Figur 1.1**: Udbredelse af facies i opmålte profilvægge fra udgravninger inden for syv landskabsselementtyper. Fordelingen baserer sig på en arealmæssig opmåling (i m<sup>2</sup>) af de sedimentære facies fra C-horisonten og nogle tilfælde også B-horisonten. Dmh: homogen, matrixunderstøttet diamikt; Gd: homogen eller dårligt lagdelt grus; Gt: trugskrålejret grus; Sh: homogen sand; Sp: planar skrålejret sand; St: trugskrålejret sand; Sl: lavvinklet skrålejret sand; Sv: vandret lamineret sand; Sr: krydslamineret sand; s: sand hvori primære strukturer ikke kan erkendes på grund af jordbundsudvikling eller lignende; Fv: vandret lamineret ler og silt; Fh: homogen ler og silt.

<u>Georadar</u>. Georadarmetoden kan kortlægge den geologiske variation og sedimentære strukturer i de øverste 5-15 m af jorden (se fx. Møller 2001; Barlebo et al., 2002). Hvor dybt signalet trænger ned i jorden (penetrationsdybden) afhænger af aflejringernes lerindhold, kornstørrelse og sorteringsgrad således, at penetrationsdybden er størst i grovkornede aflejringer uden indslag af lerlag. Undersøgelserne viser, at det for sandede jordarter er muligt kvalitativt at vurdere den geologiske variabilitet med georadar. Ofte kan hele den umættede zone beskrives på denne måde, ligesom metoden kan danne grundlag for vurdering af variationen inden for og mellem de forskellige undersøgelsesområder. Georadarmetoden er også et redskab til korrelation mellem boringer og udgravninger og til vurdering af deres repræsentativitet i forhold til omgivelserne. Georadarundersøgelser i sandede områder kan således give information om variationer i dybden og afbilde sedimentære strukturer ofte i hele den umættede zone.

På alle variabilitetsmarker og langs med de tilhørende profillinier samt på ca. halvdelen af de øvrige undersøgelsesmarker er der lavet georadarundersøgelser. Georadarundersøgelserne giver sammen med de udførte profilundersøgelser et overordnet billede af den geologiske sammensætning i den umættede zone. I det følgende er georadarundersøgelserne anvendt til at vurdere, hvor repræsentativt det enkelte fuldt program-profil er for den variationsmark, hvorpå profilet er beliggende, samt hvor repræsentativ variationsmarken er for den tilhørende profillinie. Hvor der er udført georadarundersøgelser på andre af et landskabselements undersøgelsesmarker, er disse inddraget i en vurdering af landskabselementets geologiske variabilitet.

I tabel 1.1 er der opstillet forskellige parametre til beskrivelse af georadarprofilerne, som er opnået ved kørsel med georadar på variationsmarkerne. Parameteren "penetration" angiver, i hvor stor dybde under terræn georadarsignalerne kan erkendes. Generelt gælder det, at penetrationsdybden falder jo mere finkornede sedimenterne bliver. Specielt er penetrationsdybden lille, hvis sedimenterne er lerede. Parameteren "amplitude" angiver, hvor kraftigt de målte refleksioner slår igennem. Kraftige amplituder angiver blandt andet markante lithologiske kontraster i de målte sedimenter. Parameteren "refleksion" angiver udseendet af de registrerede refleksioner; herunder deres kontinuitet og form.

På Yoldiafladens variationsmark ved Ulsted varierer penetrationsdybden fra 1–8 m.u.t., dog med to dominerende niveauer på henholdsvis 1,5–2 og 5–6 m.u.t. Variationen i penetrationsdybden kan betegnes som moderat til stor og angiver dermed, at sedimenternes tekstur varierer. Amplituden er svag til moderat, hvilket indikerer, at sedimenternes lithologiske kontraster er små. Refleksionernes kontinuitet er stor og angiver, at der findes lag, som har længder på over 200 m. I de øverste 1–2 m er refleksionerne subhorisontale, mens storskalabølgende strukturer ses i de dybere niveauer. På lille skala (5–10 m) er variationen i refleksionernes udseende lave, hvorimod refleksionernes bølgende strukturer på større skala gør, at variationen kan betegnes som moderat til stor på en stor skala (>100 m).

Refleksionsmønstret med bølgeformede og hældende refleksioner indikerer, sammenholdt med de geologiske data, at sedimenterne er aflejret i migrerende banker i et kystnært miljø. Ved det sted, hvor udgravningen er placeret på Ulsted mark, er refleksionerne forstyrret, men de omkringliggende refleksioner indikerer, at stedet sandsynligvis udgøres af bankeformede aflejringer. Observationer i udgravningen viser, at sedimenterne domineres af finkornet sand

				Penetra	tion (m u.t.)		Amplitude Refleksion						
Lokalitet	Landskabselement	Min.	Max	Profil	Dominerende	Variation	Styrke	Variation	Kontinuitet	Form	Særlige karakteristika	Va Lille skala (5-10 m)	riation Stor skala (>100 m)
Ulsted	Yoldia flade	1	8	4 til 5	5 - 6, men også meget 1,5 - 2	moderat til stor	Svag til moderat	Lille på lille skala, moderat til stor på stor skala	Stor, nogle refleksioner kan følges mere end 200 m	Subhorisontale dominerer øverste 1-2 m. Derunder storskala bølget	Storskala bølget	Lille	Middel til stor
Stubkær	Alluvialkegle	4,5	9	7,5	hældende fra 4,5 (SV) - 7,5 (NØ)	Lille	Kraftig	Lille på stor skala, Større på lille skala	Hovedsagelig lille (10 15 m eller få meter) men op til 30-40 m i Ø-V orientererede profiler	Subhorisontale dominerer i stor grad, også hummocky præg a la profiltegning	Flimmeret udseende. GVS 2-4 m.u.t. ?	Moderat	Lille
Kølvrå	Proximal smeltevandsslette	9	10,5	ca. 9,5	ca. 9,5	Lille	Kraftig	Lille på stor skala, Større på lille skala	Blanding af lille 3-10 m, større 20-30 m, enkelte op til 100 m	Horisontale- subhorisontale refleksioner dominerer, også enkelte områder med svagt hældende refleksioner og områder med hummocky præg.	Et lidt flimrende udseende blandet med zoner med horisontale til subhorisontale refleksioner med kraftigere amplitude	Moderat	Lille
Simmel- kær	Distal smeltevandsslette	5	10	ca. 7	6-7,5	Lille	Kraftig	Lille på stor skala, Større på lille skala	Blanding af lille 3-10 m (nogle hældende), større 20-30 m (mest horisontale)	Vekslende mellem zoner med horisontale- subhorisontale svagt bølgende refleksioner og zoner med hummocky præg.	Lidt flimrende udseende vekslende med horisontale refleksioner	Stor, hvor flimrende; lille hvor horison- tale reflek- sioner	Lille
Astrup	Bakkeø - MS	1,5	6	6	ca. 2	Moderat	Svag	Lille til moderat på lille og stor skala	Et par kontinuerte refleksioner inden for de øverste 2 - 3 m (op til 100 m lange). Mange forholdsvis lange, svækkede, brudte refleksioner	Subhorisontale	Subhorisontale refleksioner der stedvis svækkes	Lille til moderat	Moderat
Sjørup	Weichsel moræneflade - Djursl./Himmerl.	2-2,5	9	4,5	3-4,	Middel til stor på stor skala, llille på lille skala	Svag til moderat	Moderat	Lille, pånær en enkelt gennemgående refleksion, der ligger i 3,5-4 m 's dybde (muligvis grænsen mellem DS og underliggende MS)	Områder med subhorisontale refleksioner og områder med hummocky præg (opbrudte og hældende). Lidt kaotisk præg	Gennemgående og svage refleksioner, hvorunder signalet "dør"	Moderat	Moderat til stor

Tabel 1.1: Beskrivelse af georadarprofilerne opnået ved kørsel med et 100 MHz georadarsystem på de seks variationsmarker.

Langs med profillinien viser georadarprofilet bølgende strukturer adskilt af subhorisontale strukturer svarende til, hvad der ses på variationsmarken. Flere steder falder penetrationsdybden brat på flanken af bankestrukturerne, hvilket indikerer, at de sedimenter, som fylder lavningerne ud mellem bankerne, er mere lerede eller siltede. Enkelte steder er penetrationsdybden meget lav, hvilket indikerer, at der findes ler umiddelbart under terrænoverfladen. En af boringerne, der indgår i profillinien, er beliggende i et sådant område med lav penetrationsdybde. Her viste boringen tilstedeværelsen af Senglacialt marint ler ned til 3 m.u.t.

Det kan konkluderes, at fuldt program-profilet på Ulsted mark sandsynligvis repræsenterer sandbanker, der ses som bølgeformede strukturer på georadarprofilerne og tolkes til hovedsageligt at være finkornet sand. Lavningerne mellem sandbankerne, repræsenteret ved de subhorisontale strukturer på georadarprofilerne, består sandsynligvis af lidt mere finkornede sedimenter. Endvidere er Ulsted mark i georadarmæssig henseende repræsentativ for profillinien. Fuldt program-profilet repræsenterer dermed omkring halvdelen af de områder, hvor der er kørt georadar på Yoldiafladen.

På alluvialkeglens variationsmark ved Stubkær varierer penetrationsdybden for et 100 MHz georadarsystem fra 4,5–9 m.u.t. jævnt stigende fra sydvest til nordøst. Generelt er variationen i penetrationsdybden lille. Amplituden er kraftig og indikerer dermed, at sedimenternes lithologiske kontraster er stor. Refleksionernes kontinuitet er hovedsagelig lille (fra få meter til 10–15 m). I de øst-vest orienterede georadarprofiler kan refleksionerne dog være op til 30–40 m lange. Subhorisontale refleksioner dominerer i stor grad, men en del steder får refleksionerne også et "hummocky" præg. Det er karakteristisk, at refleksionerne generelt danner et lidt "flimret" mønster. Variationen i refleksionsmønsteret er moderat på lille skala og lille på stor skala.

I udgravningen på marken veksler sedimenterne mellem strukturløse gruslag og skrålejrede sandlag, hvoraf nogle kiler ud lateralt. Den observerede geologi er i god overensstemmelse med, at georadarundersøgelserne inden for marken viser refleksioner, der har kraftig amplitude og lille kontinuitet samt subparallel til hummocky-prægede forløb. Georadarsignalernes udseende ved fuldt program-profilet er repræsentativ for signalernes udseende i den øvrige del af marken.

I tilknytning til boringerne, der indgår i profillinien, er der lavet georadarundersøgelser. Boringerne varierer i boredybde fra 4-8,5 m u.t. og består af smeltevandsaflejringer, der varierer i kornstørrelse fra fint til grovkornet sand. Den groveste sandfraktion er ofte svagt gruset eller gruset og stedvis stenet. Der ses ingen systematisk variation i kornstørrelsesfordelingen i boringerne ud langs profillinien. For eksempel er andelen af grove sandlag ikke større i den østlige og proximale del af alluvialkeglen end i den vestlige og mere distale del af keglen. Resultaterne af georadarundersøgelserne viser, at subhorisontale brudte refleksioner dominerer. Penetrationsdybden er generelt mellem 6 og 10 m.u.t. målt med et 200 MHz georadarsystem. Data optaget med et sådant system vil almindeligvis have penetrationsdybder, der er 1-3 m mindre end data optaget med et 100 MHz georadarsystem. Den laterale udstrækning af refleksionerne varierer typisk fra et par meter og op til omkring 20 m. Dog ses der på de fleste af georadarprofilerne også zoner med høj amplitude, hvor interne refleksioner kan nå længder på op til 50 m. Selve zonerne med forhøjet amplitude kan have flere 100 m's udstrækning og enkelte af dem danner relief på 4-5 meter. Hvor zonerne danner lavninger, ses der oven over dem typisk både subhorisontale og hældende refleksioner. Nærtliggende boringer indikerer, at zonerne med forhøjet amplitude består af grusede, grovkornede sandlag og de overlejrende sedimenter af svagt grusede, fint og mellemkornede sandlag.

De store ligheder mellem alle georadarprofilerne viser, at fuldt program profilet og variationsmarken er repræsentativ for profillinien.

På den proximale smeltevandsslettes variationsmark ved Kølvrå varierer penetrationsdybden mellem 9,0 og 10,5 m.u.t. målt med et 100 MHz georadarsystem. Den dominerende penetrati-

onsdybde ligger på 9,5 m.u.t. og variationen i penetrationsdybde er generel lille. Amplituden er kraftig, hvilket indikerer, at sedimenterne har relativt store lithologiske kontraster. Refleksionernes kontinuitet veksler mellem lille (3–10 m) og moderat (20–30 m) og til stor (større end 100 m) for nogle enkelte refleksioner. Subhorisontale refleksioner dominerer. Der findes også enkelte hældende refleksioner og områder, hvor refleksionsmønstret har et "hummocky" præg. Det er karakteristisk, at georadarprofilerne har et lidt "flimrende" udseende vekslende med zoner med subhorisontale refleksioner med kraftigere amplitude. Variationen i refleksionsmønstret er moderat på lille skala (5-10 m) og lille på stor skala (> 100 m).

I udgravningen på marken ses skrålejrede, mellem- og grovkornede sandlag, hvoraf nogle kiler ud lateralt. I den øvre del af udgravningen ses endvidere et gennemgående gruslag, der er op til 60 cm tykt. Den observerede geologi er i fin overensstemmelse med, at georadarundersøgelserne inden for marken viser refleksioner, der har kraftig amplitude og forskellig kontinuitet, samt subhorisontalt eller "hummocky" forløb. Georadarprofilerne, som omkranser fuldt program profilet, har meget ens-udseende refleksionsmønstre og ligner også resten af georadarprofilerne på variationsmarken. Det må derfor konkluderes, at fuldt program-profilet er repræsentativt for variationsmarken.

Boringerne langs profillinien varierer i boret dybde fra 3–5 m.u.t. og består af smeltevandssand, der er fin- og mellemkornet. Grovkornede sandlag er kun konstateret i de to østligste boringer, hvor de udgør en mindre andel af de gennemborede sedimenter. Det er kun i den vestligste boring, at der er konstateret et enkelt tyndt lag af sand og grus. Der ses ingen klar systematisk variation i kornstørrelsesfordelingen i boringerne ud langs profillinien. Dog er andelen af grovkornede sandlag som nævnt større i den østlige del af den proximale smeltevandsslette, der har befundet sig tættere på gletscherporten, i forhold til i den vestligste del, der har befundet sig længere væk fra gletscherporten.

I tilknytning til boringerne, der indgår i profillinien, er der lavet georadarundersøgelser. Penetrationsdybden ligger mellem 4,5 og 9 m u.t. med en dominerende penetrationsdybde for alle lokaliteter på 7–8 m u.t. for georadarprofiler optaget med et 200 MHz georadarsystem. Refleksionernes kontinuitet er som på variationsmarken vekslende mellem lille (3–10 m) og moderat (20–30 m) og til stor (større end 100 m) for nogle enkelte refleksioner. Refleksionsmønstret domineres på flertallet af lokaliteterne af subhorisontale refleksioner. Derudover findes en del hældende og bølgende refleksioner samt zoner, hvor refleksionsmønstret har "hummocky" præg. I flere georadarprofiler er der enkelte refleksioner med kraftigere amplitude og en lateral udstrækning på mere end 100 m.

Der er store ligheder mellem alle georadarprofilerne optaget langs profillinien, hvilket viser, at der ikke er store laterale variationer i aflejringsmiljø og sedimenter langs profillinien. Variationsmarken ligger 7–10 km nordøst for de nærmeste profillinielokaliteter. Dog er der så store ligheder mellem profilliniens georadarprofiler og variationsmarkens georadarprofiler, at man må antage, at fuldt program-profilet og variationsmarken er repræsentativ for profillinien.

På den distale smeltevandsslettes variationsmark ved Simmelkær varierer penetrationsdybden målt med et 100 MHz georadarsystem mellem 5 og 10 m u. t. med den største penetrationsdybde i den østlige del af marken. Variationen i penetrationsdybde er dog generel lille. Amplituden er kraftig, hvilket indikerer, at sedimenterne har relativt store lithologiske kontraster. Refleksionernes kontinuitet veksler mellem lille (3–10 m) og moderat (20–50 m), hvor de mere kontinuerte refleksioner hovedsagelig er subhorisontale. Refleksionsmønstret veksler mellem zoner med subhorisontale refleksioner, som kan være svagt bølgeformede, og zoner, hvor refleksionsmønstret har et "hummocky" præg. I de øst-vest-orienterede liner dominerer subhorisontale refleksioner. Der findes enkelte vandrette refleksioner med kraftigere amplitude. Disse er dog ikke så kontinuerte som tilsvarende refleksioner på variationsmarkerne på den proximale del af smeltevandssletten og på alluvialkeglen. Det er karakteristisk, at georadarprofilerne har et lidt "flimrende" udseende vekslende med zoner med subhorisontale refleksioner med kraftigere amplitude. Variationen i refleksionsmønstret på lille skala (5–10 m) er lav, hvor subhorisontale refleksioner dominerer, og moderat til stor, hvor det flimrende udseende dominerer. På stor skala (> 100 m) er variationen ringe.

I udgravningen på marken består sedimenterne af skrålejrede sandlag, hvoraf enkelte er gennemgående i udgravningen, mens andre kiler ud. I enkelte af de skrålejrede sandlag ses grusede foresets. Den observerede geologi er i fin overensstemmelse med, at georadarundersøgelserne inden for marken viser refleksioner, der har kraftig amplitude og forskellig kontinuitet, samt subhorisontale og "hummocky" forløb. Georadarprofilerne, som omkranser fuldt program-profilet, har meget ens-udseende refleksionsmønstre og ligner også resten af georadarprofilerne på variationsmarken. Det må derfor konkluderes, at fuldt program-profilet er repræsentativt for variationsmarken.

Boringerne langs profillinien varierer i boredybde fra 3–5 m.u.t. og domineres af smeltevandssand, der er fint til mellemkornet og en del steder horisontalt lagdelt. I den østligste boring forekommer en del lag med smeltevandssand, der er gruset og stenet. I de to midterste boringer på profillinien forekommer enkelte lag med siltet smeltevandssand. Der ses ingen systematisk variation i kornstørrelsesfordelingen i boringerne ud langs profillinien. Dog er andelen af smeltevandssand, der er gruset og stenet som nævnt større i den østligste del af den distale smeltevandsslette, der har befundet sig tættere på gletscherporten, i forhold til i den vestligste del, der har befundet sig længere væk fra gletscherporten.

I tilknytning til boringerne, der indgår i profillinien, er der lavet georadarundersøgelser. Penetrationsdybden ligger mellem 5 og 10 m.u.t. med en dominerende penetrationsdybde på 7–8 m.u.t. for de to østlige lokaliteter og 9–10 m.u.t. for de to vestlige lokaliteter for georadarprofiler optaget med et georadarsystem med antenner med en centerfrekvens på 200 MHz. Refleksionernes kontinuitet er som på variationsmarken vekslende mellem lille (3–10 m) og moderat (20–50 m). På de vestlige lokaliteter er der tillige refleksioner med stor (> 100 m) kontinuitet. På to af lokaliteterne dominerer refleksionsmønstre med "hummocky" præg. Der findes også zoner med subhorisontale refleksioner, der kan have større kontinuitet. På de andre lokaliteter domineres refleksionsmønstret af subhorisontale refleksioner og svagt hældende refleksioner med vekslende kontinuitet. Desuden findes der områder, hvor refleksionsmønstret har "hummocky" præg. I flere af georadarprofilerne på de fleste af lokaliteterne er der zoner med enkelte refleksioner med kraftigere amplitude og stor lateral udstrækning.

Da de samme typer af refleksionsmønstre findes på alle profillinielokaliteter samt på variationsmarken, og der kun ses en variation i den arealmæssige fordeling af de forskellige refleksionsmønstre, kan det derfor konkluderes, at fuldt program-profilet og variationsmarken er repræsentativ for profillinien.

*På bakkeø-morænesands*-variationsmarken ved Astrup varierer penetrationsdybden fra 1,5–6 m.u.t. med en dominerende penetrationsdybde på godt 2 meter. Variationen i penetrationsdybden hen over marken er moderat. Amplituden er svag og indikerer dermed, at sedimenternes lithologiske kontraster er små. Der ses en dominans af forholdsvis lange, brudte refleksioner, der er subhorisontale og hvis amplitude stedvis svækkes. I 2 til 4 meters dybde ses mange steder en gennemgående refleksion. Variationen i refleksionsmønsteret er lille til moderat på lille skala og moderat på stor skala. På stor skala består variationen i, at der nogle enkelte steder ses en forholdsvis stor penetrationsdybde. På det sted hvor udgravningen, der indgår i fuldt program-profilet, er placeret, er penetrationsdybden forholdsvis stor og de nederste refleksioner har et forløb, der indikerer en kanallignende struktur med et relief på ca. 3,5 meter. Udgravningen viser, at der inden for de øverste 2 m.u.t. er en erosiv nedskæring i morænesand, og at den øverste blotlagte del af de sedimenter, som fylder lavningen ud, består af flyvesand. På georadarprofilet afspejler kanalfyldet sig som subhorisontale og "hummocky"prægede refleksioner. I boringen, der er placeret lidt væk fra udgravningen, er der konstateret morænesand ned til 4 m.u.t., hvorunder følger moræneler og derunder smeltevandssand. Det er sandsynligvis grænsen mellem morænesand og moræneler, der ses som en markant refleksion i en 2–4 meters dybde på de fleste af georadarprofilerne.

Om fuldt program-profilet gælder det, at boringen er repræsentativ for variationsmarken, hvorimod den kanallignende struktur, som refleksionerne indikerer ved udgravningen, kun er konstateret dette sted på marken. Udgravningen kan dermed ikke siges at være repræsentativ for variationsmarken.

Langs med den sydlige halvdel af profillinien er penetrationsdybden stor og amplituden kraftig, hvilket indikerer tilstedeværelsen af smeltevandssand. Det bekræftes af de to sydligste boringer, som viser, at der er smeltevandssand tilstede ned til henholdsvis minimum 5 m.u.t. og 8 m.u.t., hvor boringerne stopper. I den nordlige halvdel af profillinien er penetrationsdybden lille svarende til penetrationsdybden på variationsmarken. Boringerne viser, at den lille penetrationsdybde i området skyldes, at moræneler optræder tæt ved terrænoverfladen (1–4 m u.t.). Ovenover moræneler er der i to af boringerne, der indgår i profillinien, påvist morænesand, mens der i en enkelt boring er påtruffet smeltevandssand. Det er ud fra georadarprofilerne ikke muligt entydigt at afgøre, om det er morænesand eller smeltevandssand, der optræder terrænnært over moræneleren. Muligvis kan smeltevandssandet adskilles fra morænesandet ved, at det på georadarprofilerne har en lidt kraftigere amplitude.

Det kan konkluderes, at variationsmarken højest er repræsentativ for den nordlige del af profillinien, svarende til ca. halvdelen af profillinien. Det er dog også tvivlsomt, hvor repræsentativ variationsmarken er for denne del af profillinien, da det er vanskeligt at afgøre i hvor store områder, moræneler overlejres af smeltevandssand og ikke morænesand, som tilfældet er på variationsmarken. Hvor boringen, der indgår i fuldt program profilet, er ganske repræsentativ for variationsmarken og dermed dele af den nordlige halvdel af profillinien, forholder det sig anderledes med udgravningen. Denne er hverken repræsentativ for variationsmarken eller profillinien.

På bakkeøer er der yderligere udført georadarundersøgelser og lavet fuldt program-profiler ved lokaliteterne Nr. Felding og Hjortkær. Hver af disse lokaliteter er repræsenteret med to undersøgelsesmarker beliggende på henholdsvis morænesand og smeltevandssand. Desuden er der en smeltevandssandslokalitet ved Alle, hvor georadarprofilerne har markant anderledes refleksionsmønstre end observeret på de øvrige bakkeølokaliteter. Georadarprofilerne ved Nr. Felding og Hjortkær viser samme store variation i penetrationsdybder og refleksionsmønstre som observeret langs profillinien ved Astrup. Den største variation i bl.a. penetrationsdybde ses i områderne, hvor der er konstateret indslag af morænesand i boringerne og udgravningerne. Ved Nr. Felding og Hjortkær smeltevandssands fuldt profiler er der observeret en mindre variation i refleksionsmønstre samt penetrationsdybder. Disse områder vurderes til at være "rene" smeltevandssandsområder.

Da georadarundersøgelserne sammenholdt med de geologiske observationer viser, at der på bakkeø-lokaliteterne er en stor variation i de geologiske aflejringer både inden for de enkelte marker og markerne i mellem, er det ikke muligt at vurdere, hvor repræsentative de enkelte undersøgelsespunkter er for bakkeø-landskabselementerne.

*På Weichsel morænesands*-variationsmarken ved Sjørup varierer penetrationsdybden fra 2 – 9 m.u.t. med den dominerende dybde på 3-4 meter. Variationen i penetrationsdybde kan betegnes som lille på lille skala og middel til stor på stor skala. Amplituden er lille til moderat. Refleksionernes kontinuitet er lille på nær en enkelt gennemgående refleksion, der ses i 3,5 til 4 meters dybde. Refleksionerne er subhorisontale eller har "hummocky" præg. Variationen i refleksionsmønsteret er moderat på lille skala og moderat til stor på stor skala. Penetrations-dybden og refleksionernes udseende ved fuldt program-profilet er repræsentativ for variationsmarken. Ved fuldt program-profilet er der konstateret morænesand ned til 1,6 m.u.t. og i et lag mellem 3 og 4 m.u.t. Derudover er der smeltevandssand til minimum 9 meters dybde.

Langs med profillinien er penetrationsdybden generelt lidt mindre end på variationsmarken. Endvidere er refleksionsmønsteret i lidt mindre grad præget af "hummocky" strukturer langs med profillinien sammenlignet med variationsmarken. Boringerne, der indgår i profillinien, viser, at sedimenterne hovedsageligt består af morænesand. Dette kan forklare den lidt mindre penetrationsdybde i forhold til variationsmarken, hvor morænesand kun findes som forholdsvis tynde lag, over og mellem lag af smeltevandssand. I den østlige del af profillinien danner refleksionerne stedvis bassinagtige strukturer, der har længder på 30 til 100 m og et relief på op til 3 m. Bassinfyldet er ofte karakteriseret ved subhorisontale refleksioner og ofte ses en lidt større amplitude og penetration end uden for bassinstrukturerne. Bassinstrukturerne ses i et område med en del dødishuller og det er derfor nærliggende at antage, at strukturerne repræsenterer udfyldning af sådanne huller med ferskvandssand.

Det kan konkluderes, at fuldt program profilet er repræsentativt for variationsmarken, men at variationsmarken ikke er videre repræsentativ for profillinien. Sidstnævnte skyldes, at variationsmarken kendetegnes ved forholdsvis tynde lag af morænesand over og mellem smeltevandssand, hvorimod profillinien karakteriseres ved, at morænesand er tilstede i en større dybde, samt at der langs dele af linien forekommer bassinudfyldninger.

Der er udført en georadarundersøgelse på Weichsel morænesandsundersøgelsesmarken Gammelkirke i Vendsyssel. Indenfor de 8 ha som georadarundersøgelsen dækker, er der en stor variation i penetrationsdybde fra 0,5 m til 6,5 m både med bratte og glidende overgange mellem ringe og god penetrationsdybde. Refleksionsmønstret veksler mellem områder med meget få refleksioner, hvor der er meget ringe penetrationsdybde, områder med korte brudte primært subhorisontale refleksioner og områder med mere kontinuerte refleksioner med bassinagtige former. Georadarundersøgelsen viser, at der er meget stor geologisk variation på undersøgelsesmarken.

Sammenfattende viser georadarundersøgelserne, sammenholdt med de geologiske observationer i boringer og udgravninger, at den geologiske variation er lille inden for alluvialkeglen samt den proximale og distale del af smeltevandssletten, moderat til stor inden for Yoldiafladen, moderat til stor inden for morænesand og smeltevandssand på bakkeøen, samt moderat til stor inden for Weichsel morænefladen. Desuden har georadarprofilerne på alluvialkeglen og den proximale og distale del af smeltevandssletten mange ligheder bl.a. i refleksionsmønstre.

Georadarundersøgelserne viser, at fuldt program-profilet og variationsmarken er repræsentativ for store dele af profillinien inden for Yoldiafladen, alluvialkeglen, samt den proximale og distale del af smeltevandssletten, hvilket ikke er tilfældet indenfor de øvrige landskabselementer. Inden for bakkeøen og morænefladen består den umættede zone udover morænesand af kvartære jordarter som smeltevandssand, flyvesand, moræneler og sandsynligvis ferskvandssand, der lithologisk og dannelsesmæssigt er markant forskellige fra morænesand. Ved at anvende georadar sammen med boringer er det på bakkeøerne muligt at kortlægge denne variation og dermed at underinddele bakkeøen i særegne områder med hensyn til den geologiske sammensætning i den umættede zone.

<u>Geologisk information fra Jupiter boredatabasen.</u> Jupiter boredatabasen er anvendt til at vurdere den geologiske sammensætning og variation i dybden (ned til 10 m.u.t.) inden for forskellige typer landskabselementer. I tabel 1.2 er angivet hvor mange boringer der indgår i vurderingen, og hvordan antallet af gennemborede metre fordeler sig procentvis på forskellige jordartstyper. Fordelingen er angivet i hele tal, og jordartstyper som udgør mindre end 1 % er udeladt. Dette medfører, at jordartstyperne indenfor de enkelte 2 m dybdeintervaller ikke i alle tilfælde giver 100%. Indenfor de enkelte typer landskabselementer er der kun udvalgt boringer, som på de kvartære jordartskort er beliggende på de typer jordarter, der er angivet i tabel 1.2. Eksempelvis indgår der på Yoldiafladen kun boringer, som er beliggende på senglacialt saltvandssand (YS) eller senglacialt saltvandsgrus (YG). Områder med disse jordarter udgør indenfor Yoldiafladen 722 km<sup>2</sup> som angivet i tabel 1.2. I disse område findes der i Jupiter boredatabasen i alt 2556 boringer, som indeholder oplysninger om hvilke jordartstyper, der er gennemboret. I områder, hvor der ikke eksisterer kvartære jordartskort (i 1:25.000), er det kvartære jordartskort (1:200.000) anvendt ved udvælgelsen af boringerne.

Under "bakkeø" indgår Skovbjerg og Varde bakkeø; udstrækningen af områderne "Moræneflade-Djursland, Himmerland" og "Moræneflade-Vendsyssel" svarer henholdsvis til regionbetegnelserne "Djursland"-"Himmerland" og "Nordjylland". Under "alluvialkegle", "proximal-" og "distal-" smeltevandsslette" indgår arealer fra Karup og Tinglev hedeslette (ref. projektets datarapporter).

Det fremgår af tabel 1.2 at variationen i dybden af fordelingen af jordartstyperne generelt ikke er stor inden for de enkelte typer landskaber. På Yoldiafladen stiger andelen af ler, mergel (L) med dybden, hvilket modsvares af et faldende sandindhold (S). På Bakkeø (DS, DG) stiger andelen af Oligocæne-, Miocæne, og Pliocæne aflejringer med dybden, hvorimod sandindholdet (S) falder med dybden. På Bakkeø (MS, MG) stiger andelen af smeltevandssand (DS) med dybden, hvilket modsvares af et faldende indhold af moræneler (ML) med dybden.

Landskabstyperne bakkeø og moræneflade er repræsenteret med flest forskellige typer jordarter og angiver dermed, at den geologiske variation er større indenfor disse end indenfor de øvrige typer landskaber. Andelen af morænesand (MS) er markant lille i de boringer, som ifølge de kvartære jordartskort er beliggende på morænesand og -grus indenfor bakkeø og moræneflade. Dette må tilskrives unøjagtigheder i de kvartære jordartskort eller borebeskrivelserne som følge af vanskeligheder med at skelne morænesand fra smeltevandssand. Ligeledes ses det i tabel 1.2, at indenfor landskabselementet bakkeø er andelen af morænesand i de boringer, der er beliggende på morænesand og -grus stort set ikke større end i de boringer, der er beliggende på smeltevandssand og -grus. Derimod ses det, at andelen af moræneler (ML) og grus (G) er væsentlig mindre, og at andelen af sand (S) samt Oligocæne-, Miocæne, og Pliocæne aflejringer (KS, GL, GS) er væsentlig større i boringerne beliggende på smeltevandssand og -grus frem for boringer, som er beliggende på morænesand og -grus. Der knytter sig dog en usikkerhed til sammenligningen, idet antallet af boringer beliggende på morænesand og -grus er lille i forhold til antallet af boringer beliggende på smeltevandssand og grus. Ligeledes er der ved udvælgelsen af boringer på Skovbjerg bakkeø anvendt jordartskort i målestok forhold 1:200.000, som er mere unøjagtige end jordartskortene i målestok forhold 1: 25.000.

Unøjagtigheder i de kvartære jordartskort eller i borebeskrivelser må også formodes at ligge til grund for, at der i boringerne udvalgt på moræneflader i Vendsyssel forekommer en forholdsvis stor andel Senglaciale (YS, YL) og postglaciale (HS, HL, HI) aflejringer. Forekomsten af disse jordartstyper er ikke i overensstemmelse med, at de ifølge de kvartære jordartskort overlejres af stratigrafisk ældre morænesand eller –grus.

Indenfor alluvialkeglen er andelen af smeltevandsgrus (DG) og grus (G) væsentlig større end indenfor den proximale- og distale smeltevandsslette. Fordelingen af jordarterne indenfor den proximale- og distale smeltevandsslette er forholdsvis ens.

**Tabel 1.2.** Fordelingen af jordartstyper med dybden indenfor forskellige landskabstyper baseret på geologisk information fra Jupiter databasen. DS: smeltevandssand; DG: smeltevandsgrus; DL: smeltevandsler; DI: smeltevandssilt; MS: morænesand; ML: Moræneler; S: sand; G: grus; L: ler; I: silt; YS: Senglacial saltvandssand; YL: Senglacial saltvandsler; YI: Senglacial saltvandssilt; HS: Postglacial saltvandssand; HL: Postglacial saltvandsler; HI: Postglacial saltvandssilt; K: kalk, kridt, kalksten; SK: Campanien-Maastrichtien skrivekridt, kalksten, mergelsten; KK: Danien kalksandskalk; ZK: Danien kalk, kalk og flint; KS: Miocæn kvartssand; GL: Oligocæn, Miocæn-Pliosæn glimmerler; GS: Oligocæn-Miocæn-Pliocæn glimmersand.

Meter under terræn	DS %	DL %	S %	G %	L %	l %	YS %	YL %	HS %	Total antal meter	Antal borin- ger	Antal boringer pr km <sup>2</sup>
0-2	5	-	58	3	18	2	8	2	1	3894	2556	4
2-4	6	-	47	4	23	3	9	3	2	4208	2543	4
4-6	7	-	39	4	27	3	9	5	1	4064	2402	3
6-8	9	1	34	3	30	3	9	5	1	3811	2204	3
8-10	10	2	32	3	32	2	9	5	1	3692	2093	3

**Yoldiaflade** (Jordartskort = YS eller YG; Areal: 722 km<sup>2</sup>)

**Alluvialkegle** (Jordartskort = TS eller TG; Areal: 212 km<sup>2</sup>)

Meter under terræn	DS %	DG %	S %	G %	L %	KS, GL, GS %	Total antal meter	Antal borin- ger	Antal boringer pr km <sup>2</sup>
0-2	37	6	28	27	-	-	1755	1369	6
2-4	37	9	23	28	-	-	1911	1366	6
4-6	35	11	21	29	-	-	1905	1349	6
6-8	36	10	21	28	2	1	1884	1323	6
8-10	37	10	21	26	3	1	1854	1281	6

## **Proximal smeltevandsslette** (Jordartskort = TS eller TG; Areal: 224 km<sup>2</sup>)

Meter under	DS %	DG %	DL %	ML %	S %	G %	L %	KS, GL, GS %	Total antal meter	Antal borin- ger	Antal boringer
terræn											pr km²
0-2	31	2	-	-	56	10	-	-	1634	1018	5
2-4	32	3	-	-	48	15	-	-	1755	1010	5
4-6	31	4	-	-	44	16	2	1	1736	962	4
6-8	30	4	-	1	45	13	3	3	1719	942	4
8-10	30	3	1	2	44	10	4	4	1659	906	4

## **Distal smeltevandsslette** (Jordartskort = TS eller TG; Areal: 331 km<sup>2</sup>)

Meter under terræn	DS %	DG %	ML %	S %	G %	L %	Total antal meter	Antal borin- ger	Antal boringer pr km <sup>2</sup>
0-2	34	1	-	51	12	-	2614	1606	5
2-4	36	2	-	46	13	-	2823	1591	4
4-6	36	2	2	45	13	2	2816	1549	4
6-8	35	2	3	42	13	4	2740	1522	4
8-10	33	2	5	39	14	5	2571	1420	4

## Tabel 1.2 fortsat

Meter under terræn	DS %	DG %	DL %	MS %	ML %	S %	G %	L %	KS, GL, GS %	Total antal meter	Antal borin- ger	Antal borin- ger pr km <sup>2</sup>
0-2	22	-	-	1	3	59	2	7	3	9598	5664	5
2-4	23	-	-	1	4	47	2	10	10	10174	5651	5
4-6	23	-	1	-	4	42	2	10	14	10090	5591	5
6-8	22	1	2	-	4	40	2	10	19	9864	5416	4
8-10	21	-	2	-	3	39	2	9	22	9724	5280	4

# **Bakkeø** (Jordartskort = DS eller DG; Areal: 1318 km<sup>2</sup>)

**Bakkeø** (Jordartskort = MS eller MG; Areal: 64 km<sup>2</sup>)

Meter under terræn	DS %	DG %	DL %	DI %	MS %	ML %	S %	G %	L %	KS, GL, GS %	Total antal meter	Antal borin- ger	Antal borin- ger pr km <sup>2</sup>
0-2	20	-	1	1	2	19	29	12	13	-	317	220	3
2-4	23	-	2	-	2	22	23	12	14	-	340	220	3
4-6	27	1	1	-	2	17	24	12	12	1	329	210	3
6-8	31	1	2	1	1	12	27	13	10	2	326	202	3
8-10	34	2	1	1	2	9	29	12	9	2	320	196	3

# **Moræneflade -Djursland, Himmerland** (Jordartskort = MS eller MG; Areal: 601 km<sup>2</sup>)

Meter under terræn	DS %	DG %	DL %	DI %	MS %	ML %	S %	G %	L %	K, SK, KK, ZK %	Total antal meter	Antal borin- ger	Antal borin- ger pr km <sup>2</sup>
0-2	33	2	1	1	7	12	27	6	7	2	2054	1786	3
2-4	34	3	1	1	6	12	22	6	7	4	2259	1770	3
4-6	38	4	2	1	4	11	20	6	8	4	2240	1713	3
6-8	40	4	3	2	3	10	19	6	7	5	2240	1636	2
8-10	41	4	3	1	2	9	20	6	6	5	2278	1610	2

# **Moræneflade-Vendsyssel** (Jordartskort = MS eller MG; Areal: 15 km<sup>2</sup>)

Meter	DS	DL	DI	MS	ML	S	G	L	I	YS	YL	HS	HL,	K, SK,	Total	Antal	Antal
under	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%	HI	KK,	antal	borin-	borin-
terræn													%	ZK	meter	ger	ger pr
														%			km <sup>2</sup>
0-2	12	-	-	3	5	42	7	18	-	9	2	2	-	-	55	46	3
2-4	18	2	-	2	2	32	4	17	-	9	3	3	-	9	65	46	3
4-6	16	5	-	-	3	24	3	14	7	6	6	4	-	12	67	45	3
6-8	18	3	-	-	3	20	3	13	11	9	6	-	3	12	68	44	3
8-10	18	7	3	-	3	18	3	18	2	11	6	-	1	11	71	44	3
Sammenligning af geologiske jordartskort og profiler. For at vurdere graden af overensstemmelse mellem oplysningerne i geologiske jordartskort og profiler er geologien fra den dybeste C-horisont (70-110 cm) i 844 profiler fra Den Danske JordprofilDatabase sammenlignet med jordarten på de geologiske kort i 1:25000. For områder uden detaljeret geologisk kortlægning er anvendt jordartskortet i 1:200.000. Sammenligningen fremgår af tabel 1.3.

**Tabel 1.3**. Sammenligning af den geo-genetiske information i 844 jordprofilers C-horisont med jordarten på de kvartærgeologiske kort (MS, ML, DS, TS og YS).

	Till	Smelte- vands- Aflejringer	lssø	Postglacial Ferskvand	Vind	Andre	l alt	Overens- stemmelse i %
Morænesand (MS)	12	5	2	3			17	71
Moræneler (ML)	346	53				13	412	84
Smeltevands- sand (DS)	87	168	1	4	5	5	270	62
Hedeslette (TS)	8	127	1	2	3	2	143	89
Yoldiasand (YS)	1	1					2	0

Tabel 1.3 viser, at overensstemmelsen mellem den genetiske information i den geologiske kortlægning og profiloplysningerne - med undtagelse af Yoldiasand med få observationer - er 71-89 %.

For at vurdere nøjagtigheden af den teksturelle information i de geologiske kort og profiler er der endvidere foretaget analyse af lerindholdet i C-horisonten i de 844 profiler for de samme kortlagte jordarter. Tabel 1.4 viser middel, median samt 25 og 75 % fraktiler i datamaterialet.

**Tabel 1.4**. Analyse af jordartens lerindhold i C-horisonten på de 844 jordprofiler beliggende i de geologisk kortlagte områder (MS, ML, DS, TS og YS).

	l alt	Middel	Q25	Median	Q75
Morænesand (MS)	17	8,8	7,0	10,0	11,0
Moræneler (ML)	412	15,9	10,0	16,0	20,0
Smeltevandssand	270	7,4	2,0	4,0	10,0
(DS)					
Hedeslette (TS)	143	3,6	2,0	2,0	4,0
Yoldiasand (YS)	2	6,5	2,0	6,5	11,0

Hvis der som udgangspunkt regnes med, at grænsen mellem sand og ler ligger på 12 % ler, viser tabellen, at middel- og medianværdier for alle fem jordarter er i overensstemmelse med kriteriet. For en del af profilerne for kortlægningsenhederne morænesand og smeltevandssand er lerindholdet over 12 % (profiler der ligger ud over Q75), mens en del af profilerne på moræneler har under 12 % ler.

Estimering af grundvandskoter og tykkelse af umættet zone. I forbindelse med vurdering af risiko for nedsivning af bl.a. pesticider til grundvandet er der behov for at kende tykkelsen af den umættede zone. Derfor er dybden til grundvand undersøgt. I de fleste tilfælde, hvor der er grundvand i flere niveauer, er grundvandsdybden angivet som dybden til det øverste grundvandsniveau. De fleste amtskommuner har udarbejdet kort med grundvandskurver på digital form. Denne kortlægning er imidlertid ikke landsdækkende og omfatter i de fleste tilfælde de primære, dybereliggende grundvandsreservoirer, der er relevante i forbindelse med vandindvinding. Da der tilsyneladende ikke foreligger tilstrækkelig kortlægning af det øverste grund-

vandsniveau, er det forsøgt at estimere landsdækkende værdier på grundlag af eksisterende datamateriale vedrørende grundvands- og terrænkoter.

**Datamateriale**. Der er anvendt terrænkoter fra højdemodellen med 25 m gridstørrelse fra Kort- og Matrikelstyrelsens (KMS') TOP10DK-dataset. Desuden er anvendt følgende datamateriale vedrørende vandstand:

- 1. Vandstandskoter i boringer. Datamaterialet er fra Jupiter boredatabasen og omfatter ca. 97.000 vandstandspejlinger.
- 2. Dybde af gravede brønde. Dette datamateriale er fra Jupiter boredatabasen og omfatter oplysninger om ca. 17.500 brønde. Da bund af brønd og ikke vandstanden er registreret, antages grundvandskoten at være 1 m over bund af brønd.
- Vandstandskoter i vandløb, grøfter og søer. Data er udtrukket fra KMS's TOP10DKdataset. Datamaterialet omfatter i alt ca. 725.000 punkter fra vandløb, ca. 1.400.000 punkter fra grøfter (vandløb med bredde <2.5 m) og ca. 2.500.000 punkter fra søer fordelt over landet.
- 4. Desuden er der indlagt ca. 9.000 punkter med grundvandskote 0 langs kysterne.

l et så omfattende datamateriale kan datafejl ikke undgås. Det har ikke været muligt, at foretage en egentlig fejlretning, men der er foretaget en grovsortering, idet observationer med registrerede grundvandskoter over 170 m (svarende til højeste terrænkote) eller under –5 m er udeladt. Grundvandskoter i intervallet 0 - –5 m er medtaget, fordi grundvandspotentialet kan være under 0 i inddæmmede områder. Desuden er vandstandskoter i vandløb, grøfter og søer, der afviger mere end 5 m fra terrænkoten i det tilsvarende grid i højdemodellen, udeladt.

Vandstanden i vandløb, søer og en del af vandstandspejlingerne i boringer og brønde, dvs. langt størstedelen af datamaterialet, må antages at repræsentere det øverste grundvandsniveau. I en del tilfælde vil dette grundvandsniveau dog være temporært. F.eks. er de fleste mindre vandløb i lerjordsområder tørre i sommerperioden, dvs. at grundvandsstanden i denne periode er under vandløbsbunden.

Interpolering af vandstandsdata. På grundlag af ovennævnte data er grundvandstanden interpoleret i et landsdækkende gridnet med 50 m gridstørrelse. Til interpolationen er anvendt kriging-metoden i programmet SURFER. Da der er usikkerhed på de enkelte målinger er anvendt en 'nugget-værdi', der betyder, at der kan være afvigelser mellem interpolationsfladen og observerede værdier. Der er anvendt en nugget-værdi på 5 m. Derefter er forskellen mellem målte og interpolerede vandstandskoter beregnet. Som forventet var der i en del tilfælde betydelige afvigelser mellem målte og interpolerede vandstandskoter, bl.a. fordi data i nogle områder stammer fra forskellige grundvandsmagasiner. Af andre årsager til afvigelserne kan nævnes måleusikkerhed samt direkte datafejl, der ikke er fjernet ved den ovenfor nævnte grovsortering, at der ikke er taget hensyn til årstidsvariation i vandstand og at de interpolerede grundvandskoter gælder for centrum i de enkelte grid. Variationer i grundvandstand indenfor de enkelte grid kan medføre afvigelser.

Sortering af vandstandsdata. En del af vandstandspejlingerne i boringer og brønde repræsenterer dybereliggende grundvandsreservoirer. Disse pejlinger må forventes at ligge væsentligt under de interpolerede grundvandskoter. Grundvandspejlinger i boringer og brønde, der er mere end 10 m, svarende til det dobbelte af den anvendte nugget-værdi, under de interpolerede værdier, antages at repræsentere dybereliggende grundvandsreservoirer. Differencen på 10 m er valgt på grundlag af variationen i differencen mellem målte og estimerede grundvandskoter. En del af grundvandspejlingerne fra dybere reservoirer er formodentlig mindre end 10 m under de interpolerede værdier. Den relativ store difference er valgt for at sikre, at stort set kun observationer fra dybereliggende reservoirer sorteres fra. De således frasorterede observationer fra dybereliggende reservoirer indgik i den første interpolation. Derfor gentages beregningerne uden de frasorterede observationer. Derved udskilles nye observationer, der må antages at repræsentere dybere grundvandsreservoirer, og processen gentages. Ved 3. gentagelse af beregningerne var der kun få ændringer. Der var efter 3. gentagelse udskilt ca. 12.000 grundvandspejlinger fra boringer og brønde med observeret grundvandsstand mere end 10 m under de interpolerede værdier. For et tilsvarende antal var den observerede grundvandsstand 5-10 m under de interpolerede værdier. Disse observationer antages at omfatte både øverste og dybereliggende grundvandsniveauer. Vandstandsobservationer fra boringer og brønde mere end 5 m under de interpolerede værdier er derfor udeladt ved den endelige interpolation af det øverste grundvandsniveau, der som de øvrige udføres med kriging-metoden, men med en nugget-værdi på 2 m. Dybden til grundvandsspejlet kan derefter beregnes som difference mellem terrænkoter og estimerede grundvandskoter. Der er anvendt terrænkoter fra den digitale højdemodel med 25 m gridstørrelse fra TOP10DK. Den estimerede dybde til øverste grundvand er vist i figur 1.2.



Figur 1.2. Estimeret dybde til øverste grundvand for både sand- og lerjorde.

Beregningsmetoderne og usikkerhed ved datamaterialet medfører naturligvis nogen usikkerhed på de estimerede grundvandsdybder. Det har bl.a. ikke været muligt at tage hensyn til årstidsvariationen i grundvandsstanden. Usikkerheden på terrænkoterne i højdemodellen er ifølge KMS <0.9 m i fladt terræn og <2 m i kuperet terræn. Usikkerheden på de estimerede grundvandskoter og de anvendte beregningsmetodes egnethed varierer antagelig med terrænform, geologi, jordtype mv. Usikkerheden er antagelig mindst i fladt terræn og med en permeabel undergrund. Derimod er metoden antagelig mindre egnet i kuperede morænelerområder, hvor det øverste grundvandsniveau, der ofte er temporært, antagelig i højere grad følger terrænet. Der er en del mindre områder med estimeret grundvand over terræn, hovedsagelig i mindre lavninger. Ifølge vandløbstemaet fra Areal Informations Systemet er der vandløb i de fleste af disse lavninger, men der er ingen vandstandskoter fra TOP10DK. Manglende vandstandsdata i TOP10DK skyldes antagelig, at man ikke har kunnet bestemme vandstanden på grund af bevoksning omkring vandløbet.



**Figur 1.3**. Sammenligning af målt og estimeret grundvandsdybde på sandjordsarealer. Stiplede linier viser 95% prediktionsintervallet, dvs. regressionslinien  $\pm 2$  gange standardafvigelsen. I projektet er der ikke indsamlet tilsvarende oplysninger for lerjordsarealer, jævnfør figur 1.2.

I projektet er dybden til grundvandet blevet målt på et mindre antal lokaliteter indenfor sandjordsarealer. Målte og estimerede værdier er vist i figur 1.3. Regressionsberegningerne viser en standardafvigelse på ca. 1 m for disse målesteder, hvilket vurderes at være en rimelig præcision for det tidsligt varierende grundvandsspejl.

#### Pedologi

Jordbundsudviklingen på Yoldiafladen er præget af de særlige geologiske og hydrogeologiske forhold, der er typiske for senglaciale marine aflejringer med højt grundvandsspejl. Den pedologiske udvikling er meget varierende afhængig af dræningsgraden samt lokaliteternes vegetations- og dyrkningshistorie, og hyppigst er de såkaldte sure brunjorder. Profilbeskrivelserne på de tre undersøgelsesmarker er i kvalitativ overensstemmelse med databaseoplysninger fra andre jordbundsprofiler indenfor landskabselementet.

På hedesletten (inkl. alluvialkegle, proximal og distal smeltevandsslette) er der udviklet karakteristiske podsolprofiler med akkumulering af humus og jern- og aluminiumoxider i Bhorisonten (ref. Projektets datarapporter). Profilbeskrivelserne for de seks lokaliteter på Karup hedeslette og de tre på Tinglev hedeslette er i kvalitativ overensstemmelse med databaseoplysninger fra andre jordbundsprofiler indenfor samme landskabselement. Jordbundprofilernes modenhed og udviklingsdybde varierer en del, men svarer til, hvad man erfaringsvist kan forvente af pedologisk variation indenfor hedesletten. Variationen gør det ikke muligt at skelne mellem alluvialkeglen og de proximale og distale smeltevandssletter på pedologisk grundlag.

På bakkeøerne Skovbjerg og Esbjerg er der undersøgt pedologiske profiler for både morænesand (MS) og smeltevandssand (DS). Profilerne på morænesand er med deres naturlige lave lerindhold pedologisk karakteristiske ved at være i en moderat fase af podsoludvikling. Bakkeøernes store jordbundmæssige og teksturelle variation må bedømmes som godt dækket for MS med de fundne lokaliteter, jf. Bilag 2, Tabel 2.1.

Den typiske pedologiske udvikling for DS på bakkeøerne er ligeledes podsolering. De fundne lokaliteter er repræsentative for DS, idet der er beskrevet jorde med forskellig dræningsgrad og udviklingsdybde.

Der er foretaget undersøgelser af Weichsel morænesand på moræneflader i Djursland, Himmerland og Vendsyssel. De beskrevne jorde har gennemgået en pedologisk udvikling, hvor forbruning ved forvitring og initial podsolering (brunsol til brunpodsol) er to karakteristiske udviklinger. Jordene er typiske ved, at der ikke har fundet lernedslemning sted, og at der ikke er naturligt kalk tilbage i jorden. Desuden er der beskrevet både veldrænede og moderat dårligt drænede jorde. Lokaliteterne må betegnes som typiske repræsentanter for morænesand i dette landskabselement.

Det kan konkluderes at de undersøgte lokaliteter generelt er typiske for de enkelte landskabselementtyper med hensyn til pedologisk udvikling og karakteristik.

## Litteratur

Møller, I., 2001: Geofysik i umættet zone: En vurdering af metoder og instrumentsystemers egnethed til kortlægning af den umættede zone. Koncept for Udpegning af Pesticidfølsomme Arealer, Rapport nr. 1, Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelse, Miljø- og Energiministeriet, 85 pp.

H.C. Barlebo, V. Ernstsen, P.R. Jacobsen, E. Nygaard, S. Torp, H. Vosgerau, I. Møller, M.H. Greve, B.V. Iversen, O H. Jacobsen, F.P. Winther, L. Elsgaard, U.C. Brinch, C.S.Jacobsen, R.Juhler og S.E. Olesen, 2002. Undersøgelses- og analysemetoder anvendt i forbindelse med undersøgelser af sandlokaliteter: Hvilke metoder er anvendt, og hvilke overvejelser er gjort? Koncept for Udpegning af Pesticidfølsomme Arealer, Rapport nr. 2, Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelse, Miljøministeriet, 62 pp.

# Bilag 2. Kornstørrelsesfordeling og organisk stof - Repræsentativitet

DJF: Mogens H. Greve, Bjarne Hansen, Svend Elsnab Olesen, Søren B. Torp

Teksturdata fra de otte landskabselementtyper er blevet sammenholdt med tilsvarende data i Tekstur- og Profildatabaserne. For A-, B- og C-horisonter i hver landskabselement type (og underinddelinger heraf) er der bestemt medianværdier for teksturfraktioner og humusindhold. Resultater for ler- og humusindhold i A- og C-horisonter er vist som eksempler i tabel 2.1. En opdeling af sandfraktioner for C-horisonten i landskabselementtyperne er endvidere vist i figur 2.1, idet det dog ikke har været muligt at adskille MS og DS på bakkeøer.

A horisont	Obser	vation		Hur	nus		Ler	
	an	tal		%	, D		%	
	DLJ	DJD	DLJ	DJD	Fuld profil	DLJ	DJD	Fuld
								profil
Yoldia (YS)	1279	20	3,5	3,2	2,0 1,9 4,1	4,3	4,7	3,7 5,8
								3,8
Hedeslette (TS, TG)	974	92	4,1	3,7		4,2	4,8	
Karup, kegle	123	5	4,2	5,0	6,6 4,8	4,2	7,7	5,2 6,3
proximal	103	8	4,2	3,1	2,6 4,1	4,2	3,8	2,6 4,6
distal	356	4	4,3	2,0	1,8 4,1	4,2	3,1	3,5 4,3
Tinglev, kegle	112	-	3,4	-	3,2	5,2	-	5,7
proximal	146	10	4,2	3,3	2,2	4,2	5,8	5,2
distal	134	10	3,8	3,6	3,2	3,1	6,5	5,8
Bakkeø								
Smeltevandssand	2522	133	3.7	3.9	3.5 1.1	4,0	5.0	5,6 4,6
(DS)	109	1	3,8	1,9	3,0	4,0	4,1	5,8
Morænesand					2,6 4,9			6,1 6,2
(MS)					2,2			4,2
Ung moræne								
(DS+MS)	1092	16	3,2	-	3,1 3,1	5,0	7,2	5,9 7,4
Vendsyssel	3405	58	3,2	3,9	1,8	4,0	5,0	9,5
Djurs					7,8 3,1			5,3 6,3
Himmerland					2,2			5,7

**Tabel 2. 1**. Medianværdier for humus- og lerindhold i forskellige landskabselementtypers A og C horisonter baseret på Teksturdatabasen (DLJ), Profildatabasen (DJD) samt analyser af fuld-profiler.

C horisont	Obse	rvation	Humus			Ler			
	a	ntal	%			%			
	DLJ	DJD	DLJ	DJD	Fuld pro-	DLJ	DJD	Fuld	
					fil			profil	
Yoldia (YS)	-	43		0,2	0,2 0,2	-	6,4	2,1 2,1	
					0,7			2,5	

Hedeslette (TS,	-	199	-	0,2		-	2,4	
TG)	-	15	-	0,1	0,0 0,0	-	1,6	2,0
Karup, kegle	-	12	-	0,1	0,1 0,2	-	1,7	3,1
proximal	-	9	-	0,1	0,1 4,1	-	1,8	1,5
distal	-	5	-	0,1	0,1	-	2,6	2,0
Tinglev,	-	22	-	0,2	0,2	-	2,9	1,0
kegle	-	19	-	0,3	0,3	-	3,1	4,3
proximal								1,0
distal								2,5
								2,6
Bakkeø								
Smeltevands-	-	294		0,2	0,1 0,1	-	4,8	1,5
sand (DS)	-	1		0,2	0,2	-	12,7	1,0 2,1
Morænesand					0,1 0,3			12,8
(MS)					0,5			7,7 17,8
Ung moræne								
(DS+MS)	-	24	-	0,1	0,2 0,1	-	4,1	11,9 7,7
Vendsyssel	-	78	-	0,2	0,1	-	6,8	19,6
Djurs					0,2 0,2			5,7 7,2
Himmerland					0,2			4,1

- data foreligger ikke

<u>Yoldiafladens (YS) A-horisont</u> har normalt et lerindhold på omkring 5% og et humusindhold på ca. 3,5 %. Sandfraktionen er domineret af mellem- og finsand og har normalt et grovsandsindhold under 10%. Analyser fra A-horisonten i fuld-profil undersøgelserne er i god overensstemmelse hermed, dog er spredningen på de tre humusbestemmelser ret stor. For C-horisonten er lerindholdet i fuld-profilerne noget mindre end normalt. Det kan skyldes, at de tre lokaliteter er udvalgt ud fra sandindholdet, hvorimod databaseoplysningerne er baseret på klassifikationsenheden Yoldia sand, er stedvist indeholder ler (YL).



*Figur 2.1.* Fordelingen af fin-, mellem- og grovsand i C-horisonten for landskabselementtyperne. Det ses at de valgte lokaliteter er repræsentative i forhold til oplysningerne i jorddatabaserne.

<u>Alluvialkegle og smeltevandsslette</u> er afsat af store flettede smeltevandsfloder med udløb fra gletcherporte ved isens hovedopholdslinie under sidste istid. Smeltevands-aflejringer indeholder normalt mindre end 5% ler. Sandfraktionen er domineret af mellemsand med relativt højt indhold af grovsand, specielt på alluvialkeglen nærmest glecherporten. Finsandsindholdet er karakteristisk lavt i disse aflejringer og overstiger sjældent 10%. Humusindholdet i Ahorisonten er lidt højere end på Yoldiafladen, mens det i C-horisonten svarer nogenlunde til Yoldiafladen.

I fuld-profilerne er ler- og humusindholdet i alle horisonter på de seks lokaliteter på Karup hedeslette og tre på Tinglev hedeslette i god overenstemmelse med databaseoplysninger. Det er ikke muligt ud fra undersøgelserne at adskille de tre landskabselementtyper (Alluvialkegle, Proximal og Distal Smeltevandsslette) fra hinanden på grundlag af teksturen, men der er tendens til at grovsandindholdet falder med afstanden fra gletcherporten.

Landskabselementet morænesand på Bakkeø er det mest variable i undersøgelsen. Morænesandet har ofte et betydeligt siltindhold samtidig med at sandfraktionen er karakteriseret ved 5-30% sand i både fin- og grovsand fraktionerne. Det er vanskeligt at vurdere om de udvalgte lokaliteter er repræsentative, idet store dele af Bakkeøen formodentlig fejlagtigt er angivet som smeltevandssand (DS) på 1:200.000 jordartskortet. Dette skyldes at Skovbjerg Bakkeø endnu ikke er karteret i 1:25.000, men på 1:200.000 jordartskortet er fremstillet ved en geologisk tolkning ud fra andre kort og arkivdata. På ældre karteringer kan det endvidere forekomme at morænesand på bakkeøer er angivet som smeltevandssand.

<u>Weichsel morænefladerne</u> har som bakkeø-morænerne ofte et betydeligt siltindhold samtidig med at sandfraktionen er domineret af mellemsand og med 5-30% i både fin- og grovsandsfraktionen. Vurderingen af repræsentativiteten vanskeliggøres ved den manglende detailkortlægning i Himmerland og usikkerhed vedrørende klassifikationen i jordartskortlægningen i Nordjylland. På Djursland derimod, hvor den geologiske kortlægning er af nyere dato og god kvalitet, vurderes Sjørup lokaliteten at repræsentere det unge moræne landskab godt.

# Indhold af ler, silt og sand pr. m<sup>2</sup> til 1 meters dybde

I forbindelse med korrelationsarbejdet har det vist sig at det akkumulerede indhold af ler, silt og humus til en meters dybde er af betydning for pesticid udvaskningen. Det akkumulerede indhold af ler, silt og humus er beregnet for de 166 sandede profiler, som findes inden for de fire landskabselementer:

- Ung moræne (betegnet "10" i fig. 2.2 2.4)
- Bakkeø (betegnet "13" i fig. 2.2 2.4)
- Hedeslette (betegnet "14" i fig. 2.2 2.4)
- Yoldia (betegnet "16" i fig. 2.2 2.4)

Tabel 2.2. Middelværdi for humus, ler og silt på de 4 forskellige landskabstyper.

LANDSKABSTYPE	HUMUS	LER	SILT
Ungmoræne	1,9	8,7	9,1
Bakkeø	2,4	6,8	4,5
Hedeslette	2,4	5,5	3,4
Yoldia	2,0	6,3	5,1
Samlet	2,2	7,1	6,0



Figur 2.2. Det akkumulerede lerindhold på de 4 landskabstyper.



Figur 2.3. Det akkumulerede silt indhold på de 4 landskabstyper.



Figur 2.4. Det akkumulerede humus indhold på de 4 landskabstyper.

# Konklusion

Den vigtigste forskel mellem Yoldia- og hedeslette-aflejringerne fremgår af sand-fraktionernes indbyrdes fordeling, figur 2.1. På Yoldiafladen er der typisk et stort finsands-indhold og sjældent mere end 5% grovsand. På hedesletten er der derimod altid et betydeligt indhold af grovsand, mens finsandsindholdet normalt er under 10%. Begge landskabselementer adskiller sig fra Weichsel moræneflade og Bakkeø der er karakteriseret ved meget dårligt sorterede sandfraktioner med hovedvægt på mellemsand.

Endvidere tyder texturanalyserne, specielt lerindholdet, i lighed med de geoelektriske målinger på at hedesletterne og Weichsel morænefladerne er relativt homogene (se EM38, Bilag 1), hvorimod Yoldiafladen og bakkeøer er ret inhomogene. Denne heterogenitet kan skyldes, at lerindholdet på sidstnævnte landskabselementtyper typisk varierer betydeligt over korte afstande og at der ofte forekommer vekslende lag af ler, silt og sand.

Resultaterne vist i tabel 2.2 og figurene 2.2, 2.3 og 2.4 viser at humusindholdet i de vestjyske landskabstyper (bakkeø og hedeslette) ligger over gennemsnittet. Yoldiafladen ligger tæt på gennemsnittet for de sandede jorder og at det unge moræne landskab har jorde med det laveste akkumulerede indhold af humus. Analysen viser også at jorde på hedesletten har det laveste indhold af ler og silt og det at unge moræne landskab har størst indhold af ler og silt.

Ved sammenligning af forsøgslokaliteternes egenskaber med de landsdækkende jordbundsdatabaser findes at de udvalgte lokaliteter i betydelig grad er repræsentative for de landskabselementer de repræsenterer.

# Bilag 3A. Variabilitet, Geostatistik og Mikrobiologi, Generelt

GEUS: Ingelise Møller

DJF: Lars Elsgaard, Mogens H. Greve, Finn P.Vinther

# Variabilitet på landskabstypeniveau

Variabiliteten på landskabstypeniveau er vurderet på baggrund af en analyse af de landsdækkende jordbundsdatabaser. Teksturanalyserne, specielt lerindholdet, tyder på, i lighed med de geoelektriske målinger, at hedesletterne og Weichsel morænefladerne er relativt homogene (se EM38 nedenfor), hvorimod Yoldiafladen og bakkeøer er ret inhomogene (se tillige Bilag 2). Denne heterogenitet kan skyldes, at lerindholdet på sidstnævnte landskabselementtyper erfaringsmæssigt varierer betydeligt over korte afstande og at der ofte forekommer vekslende lag af ler, silt og sand. Andre undersøgelser har dog også vist at Weichsel morænefladen kan udvise endog betydelig variation (Greve et al. 2003). Undersøgelserne viser desuden, at landskabselementerne er karakteristisk forskellige med hensyn til tekstur og humus. Den vigtigste forskel mellem Yoldia- og hedesletteaflejringerne fremgår af sand-fraktionernes indbyrdes fordeling. På Yoldiafladen er der typisk et stort finsands-indhold og sjældent mere end 5% grovsand. På hedesletten er der derimod altid et betydeligt indhold af grovsand mens finsandsindholdet normalt er under 10%. Begge landskabselementer adskiller sig fra Weichsel moræneflade og Bakkeø, der er karakteriseret ved meget dårlig sorteret sandfraktioner med hovedvægt på mellemsand (Bilag 2).

<u>Variation på mark- til profillinieniveau</u>. Der er udført geofysiske undersøgelser i form af EM38 og georadar målinger på og omkring variationsmarkerne og de øvrige undersøgelsesmarker samt langs profillinierne. Den geologiske variabilitet er kvalitativt vurderet på baggrund af de målte georadarprofiler, hvor variation i penetrationsdybder, amplitude og refleksionsmønstre er beskrevet (se Bilag 1). Georadarundersøgelserne viser sammenholdt med de geologiske observationer i boringer og udgravninger, at den geologiske variabilitet er lille inden for alluvialkeglen, den proximale og distale del af smeltevandssletten, moderat til stor inden for Yoldiafladen, moderat til stor inden for morænesand og smeltevandssand på bakkeøen samt moderat til stor inden for Weichsel morænefladen.

<u>Markvariation</u>. Variabiliteten er undersøgt for en række parametre på 6 marker, hvor der er udført markvariationsundersøgelser i ca. 50 punkter dækkende et areal på 1,5–3 ha. For fire af markerne er en del af analyserne kun udført på prøver i ni punkter. I fig. 3A.1a-d og 3A.2a-d præsenteres boxplot af median og spredning for grupper af parametre, der har betydning for pesticidudvaskningen. Spredningen er udtrykt ved 10, 25, 75 og 90%-fraktilerne. Markerne er rangeret efter faldende indhold af organisk kulstof i Ap-horisonten. Alle parametrene er målt på prøver taget i Ap-horisonten, desuden er nogle af parametrene målt på prøver fra B-horisonten eller, for en enkelt mark, C-horisonten.

Grupperne omfatter jordfysiske, kemiske, mikrobiologiske og pesticidspecifikke parametre. De jordfysiske parametre er kornstørrelsesfraktionerne ler (< 2  $\mu$ m), silt og grovsilt (2–63  $\mu$ m), finsand (63–125  $\mu$ m), mellemsand (125–500  $\mu$ m), og grovsand (500–2000  $\mu$ m), samt elektrisk ledningsevne målt med EM38 metoden og den mættede hydrauliske ledningsevne (K<sub>s</sub>) prædikteret fra luftpermeabilitet målt in situ. De kemiske parametre omfatter det totale indhold af organisk kulstof (C-total), A-horisontens tykkelse, pH i CaCl<sub>2</sub>, samt indholdet af forskellige jern og aluminiumforbindelser (Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> dcb, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> oxalat og Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> oxalat). De mikrobiologiske parametre er substrat-induceret respiration (SIR), arylsulfataseaktivitet (ASA) og fluorescein diacetat hydrolyse (FDA). Basal in situ-respiration (IRGA) er ikke medtaget, da denne parameter er meget årstidsafhængig. De pesticidspecifikke parametre er binding repræsenteret ved K<sub>d</sub> målt på MTA, MTB, MCPA og Glyphosat (GL) og nedbrydningen repræsenteret ved mineralisering efter 64 dage (M64d) målt på MTA, MTB, MCPA og Glyphosat (GL). Mineraliseringen er kun bestemt på nogle enkelte af markerne.

For de jordfysiske parametre (kornstørrelsesfraktioner, elektrisk ledningsevne og hydraulik) skiller markerne beliggende på alluvialkeglen, den proximale og distale smeltevandsslette sig ud fra de øvrige marker ved at være mere grovkornede. Der ses et markant lavere indhold af silt og finsand samt et markant højere indhold af grovsand. Dette afspejler sig også i EM38målingerne, hvor der generelt registreres en lavere elektrisk ledningsevne. Ligeledes er der en tendens til en højere hydraulisk ledningsevne specielt i underjorden. De styrende parametre for den hydrauliske ledningsevne er tekstur og indholdet af organisk stof. I underjorden er indholdet af organisk stof lavt. Derfor vil den hydrauliske ledningsevne her overvejende være styret af jordens tekstur. De mere grovkornede jorde vil derfor have en højere hydraulisk ledningsevne. Forskellen mellem markerne på hedesletten og de øvrige marker ligger i medianværdierne, mens der ikke ses en tendens til et lignende mønster i parametrenes spredning.

Opdelingen af markerne i hedeslettemarker og øvrige marker baseret på de jordfysiske parametre kan ikke genfindes i de kemiske, mikrobiologiske eller pesticidspecifikke parametre.



Bilag side 27



b



Bilag side 29



**Figur 3A.1a-d**. Boxplot af median og spredning for grupper af parametre med betydning for pesticidudvaskningen, bestemt for jordprøver udtaget i Ap-horisonten, hvor **a** er jordfysiske parametre, **b** kemiske parametre og **c** er mikrobiologiske, og **d** pesticidspecifikke parametre. Boksen repræsenterer parameterværdier mellem 25 og 75 %-fraktilerne, hvor den tykke streg angiver parameterens medianværdi, barene angiver 10 og 90 %-fraktilerne og punkterne angiver de specifikke parameterværdier under 10 %-fraktilen og over 90 %-fraktilen.



Bilag side 31



Bilag side 32



Bilag side 33



**Figur 3A.2a-d.** Boxplot af median og spredning for grupper af parametre med betydning for pesticidudvaskningen, bestemt for jordprøver udtaget i B- eller C-horisonten, hvor **a** er jordfysiske parametre, **b** kemiske parametre, **c** er mikrobiologiske, og **d** pesticidspecifikke parametre. Se Fig. 3A.1 for boxplot indstillinger.

## Geostatistik

<u>EM38</u>. Ved EM38 målinger integreres den elektriske ledningsevne i intervallet ned til 1–2 meters dybde. Den elektriske ledningsevne korrelerer stærkt til jordens lerindhold og svagere til humusindholdet. De mange EM38 måleresultater kan behandles geostatistisk, og det enkelte landskabselements variabilitet kan karakteriseres ved parametrene Mean, Range, Sill og Nugget variabilitet. Sill er variansen i afstand større end Range, dvs. variansen i den afstand hvor korrelationen ophører, jf. Barlebo et al., 2002 (Metoderapport) og fig. 3A.3.



Figur 3A.3. Geostatistiske termer. (d) er varians, h er afstand og a er Range.

Udvælgelsen af undersøgelsesmarker inden for de enkelte landskabselementer samt det præcise sted for detaljerede profilundersøgelser (fuldprofil, se projektrapport nr. 2, Metoder) er foretaget på grundlag af EM38 målinger i et større område omkring lokaliteten. Herved er det tilstræbt at profilundersøgelserne er gennemført på et typisk sted i marken mht. jordens elektriske ledningsevne. Et eksempel fra Ulsted på Yoldiafladen er vist i fig. 3A.4.

Analyserne af EM38 målingerne peger på, at landskabselementtyperne kan karakteriseres ved typiske geostatistiske parametre, jf. tabel 3A.1. Værdierne er baseret på målinger på undersøgelsesmarken og nærliggende marker ved de enkelte fuld profil undersøgelser inden for samme landskabselementtype. Den beregnede variationskoefficient for afstande større end range er et sammenligneligt mål for variabiliteten. Tabel 3A.2 viser resultaterne af de geostatistiske analyser af EM38-data fra alle projektets 24 undersøgelsesmarker samt profillinierne.



**Figur 3A.4.** Geoelektriske målinger med EM38 på Yoldiafladen (Ulsted) med angivelse af den udvalgte mark og stedet for fuld profil undersøgelser. Høj elektrisk ledningsevne viser hvor de øvre jordlag er lerede mens lave værdier viser hvor de er sandede.

**Tabel 3A.1**. Oversigt over typiske geostatistiske parametre på otte landskabselementtyper, baseret på måling af elektrisk ledningsevne, jf. tabel 3A.2.

	Mean	Range	Sill	Nugget	Variationskoef. *
	mS/m	m	$(mS/m)^2$	$(mS/m)^2$	%
Yoldiaflade (YS)	7	200	14	1,5	53
Alluvialkegle (TS,TG)	4	40 / 200	0,7	0,2	21
Proximal slette (TS; TG)	4	20	0,3	0,2	14
Distal slette (TS, TG)	4	200	1,0	0,7	25
Bakkeø (MS)	10	200	22	2	47
Bakkeø (DS)	8	250	10	1	30
Weichsel Djurs/Him (MS)	6	200 / 50	1,5	1	20
Weichsel Vendsyssel (MS)	6	200 / 50	0,5	1	11

\*) Variationskoefficienten =  $\frac{\sqrt{Sill}}{Mean}$ \*100

Yoldiafladen er generelt karakteriseret ved en relativ høj Mean, hvilket indikerer et relativt højt lerindhold. Variationskoefficienten tyder på stor variabilitet. Hørby lokaliteten afviger fra Ajstrup og Ulsted lokaliteterne ved større Mean, Sill og Nugget, men ligner Ulsted-Ulstedlund profillinien (tabel 3A.2).

Alluvialkegle og proximale og distale smeltevandssletter har relativt lave Mean værdier, der indikerer lavt lerindhold, samt relativt lave Sill værdier, som tyder på stor homogenitet. Dobbelte Range værdier indikerer at variationerne findes i to forskellige skalaer. Det kan være et resultat af at aflejringerne er afsat af to forskellige geologiske processer eller hvis orienteringen af sedimentaflejringer i ikke-symmetriske landskabselementer er forskellige.

Bakkeøen (MS +DS) skiller sig ud som landskabselementet med den højeste Mean, hvilket tyder på generelt større lerindhold end i de øvrige landskabselementtyper. Sill er også relativ høj, som udtryk for stor variabilitet.

Weichsel morænefladen har er relativ lav Sill varians, som indikerer stor homogenitet. Her er også fundet dobbelte Range værdier. Der er kun ringe variation i Mean og Sill for de seks lokaliteter på landskabselementerne (Djursland-Himmerland, Vendsyssel).

Sammenfattende er høje Mean værdier på Yoldiafladen og Bakkeøer udtryk for relative høje lerindhold i forhold til de øvrige landskabselementtyper. Endvidere tyder lave variationskoefficienter på Hedeslette og Weichsel moræne på relativ stor homogenitet i de øverste jordlag i sammenligning med Yoldia sand og Bakkø sand.

Yoldia (YS)	Mean	Range	Sill	Nugget	CV *	Model
	mS/m	m	$(mS/m)^2$	$mS/m)^2$	%	-
Ajstrup	4,7	280	6,9	0,9	55	Spherical
Hørby	9,7	178	17,9	3,1	43	Spherical
Ulsted	7,2	260	9,3	2,3	42	Exponentiel
Ulsted-Ulstedlund Profillinie	7,9	185	15,9	0,7	50	Spherical
Alluvial kegle (TS)	Mean	Range	Sill	Nugget	CV, %*	Model
Stubbkær, Karup	2,1	197	0,2	0,2	21	Spherical
Frederiks, Karup	4,5	37	0,4	0,3	14	Spherical
Mjøls, Tinglev	6,5	195	1,1	0,5	16	Spherical
Nedre Julianehede (pro-	5,3	30	0,9	0,7	18	Spherical
filinier)						
Nørlund (profilinier)	5,1	10	0,5	0,2	14	Spherical
Søbjerg (profilinier)	2,8	7	1,4	0,2	42	Spherical
Ruskær (profilinier)	3,7	10	5,7	0,3	65	Spherical
Proximal smeltevandssand	Mean	Range	Sill	Nugget	CV, %*	Model
( <b>TS</b> )						
Ilskov, Karup	2,6	11,5	0,2	0,2	17	Spherical
Kølvrå, Karup	3,2	22	0,4	0,2	19	Spherical
Knivsig, Tinglev	7,5	106	2,4	0,3	21	Spherical
Ilskov (profilinier)	4,3	11	17,9	9,3	98	Spherical
Røjen Mosegård (profilinier)	3,1	14	2,2	1,1	47	Spherical

Tabel 3A.2.	. Geostatistisk analyse af EM38 data fra projektets 24 undersøgelse	əsmarker o	g
profillinier.			-

Fortsættes

Spherical

Spherical

13

52

2,6

2,3

2,1

0,4

55

27

2,9

5,6

Røjen kær (profilinier)

Røjen (profilinier)

Fortsat						
<b>Distal Smeltevandsand (TS)</b>	Mean	Range	Sill	Nugget	CV, %*	Model
Hoager, Karup	1,8	270	0,4	0,1	35	Spherical
Simmelkær, Karup	5,2	189	1,6	0,9	24	Exponentiel
Emmersker, Tinglev	14	327	28,4	1,1	38	Exponentiel
Sneptrup (profilinier)	4,6	13	0,2	0,19	10	Spherical
Simmelkær (profilinier)	5,3	26	1,4	0,5	22	Spherical
Ommose (profilinier)	3,9	37	0,9	0,5	24	Spherical
Hallundbæk (profilinier)	3,9	37	1,0	0,5	25	Spherical
Bakkeø (DS)	Mean	Range	Sill	Nugget	CV, %*	Model
Alle	8,4	329	9,6	0,5	36	Circular
Nr. Felding	8,3	153	14,3	3,6	45	Spherical
Hjortkær	12,4	168	37,1	1,2	49	Circular
		J			L	<u>.</u>
Bakkeø (MS)	Mean	Range	Sill	Nugget	CV, %*	Model
Astrup	8,4	330	10,1	0,5	38	Circular
Nr. Felding	8,1	280	19,2	3,4	54	Spherical
Hjortkær	4,8	114	1,2	0,3	22	Circular
Hvingel-Lomborg, Profillinie	18,1	180	1,1	0	6	m
Weichsel (MS)	Mean	Range	Sill	Nugget	CV, % *	Model
Sjørup, Djursland	6,5	178	1,2	0,7	17	Spherical
Låstrup, Himmerland	6,3	23	0,8	0	14	Spherical
Braulstrup, Himmerland	6,6	125	1,2	0,2	18	Spherical
Flyvbjerg, Nordjylland	6,5	178	0,8	0,4	14	Spherical
Hellum, Nordjylland	6,0	56/285*	0,4	1,5	11	Spherical
		*				
Gammelkirke, Nordjylland	6,6	49	0,3	0,7	8	Spherical
Sjørup-Ørbæk, Profillinie	6,6	110	0,95	0,2	15	Spherical

\*) Variationskoefficienten, CV, er beregnet ud fra Sill og Mean.

-

\*\*) Dobbelte Range værdier indikerer forskellige variationsmønstre over korte og store afstande.

<u>Jordfysiske og kemiske parametre.</u> Ved Stubkær (alluvialkegle), Astrup (Bakkeø morænesand) og Sjørup (Weichsel morænesand) er der er indsamlet yderligere prøver langs en transekt i forlængelse af variationsmarken med det formål at få et datasæt af en størrelse der muliggør en geostatistisk undersøgelse af de væsentligste jordparametre (Tabel 3A.3). Antallet af punkter i transekterne er kun stort nok til at antyde variogrammernes udseende. For de fleste parametre er det ikke muligt at modellere de eksperimentelle variogrammer. En af grundene til dette kan være det lave antal datapunkter, idet simuleringstest på todimensionale stokastiske fordelinger har vist, at der skal mindst 150 punkter til for at få et troværdigt estimat af variogrammet (Webster & Oliver, 2001).

For de jordparametre, hvor det har været muligt at modellere et variogram (Tabel 3A.3), er der ikke en sammenhæng mellem Range-værdierne for disse variogrammer og Range-værdien for EM38 variogrammerne. Det har ikke været muligt på grundlag af dette relativt lille datasæt at dokumentere en tilsvarende sammenhæng mellem elektrisk ledningsevne målt med EM38 og både ler og humus, som andre undersøgelser peger på (Nehmdahl & Greve, 2001).

Undersøgelser fra Vindum, tyder på, at der i det unge moræne landskab kan være en betydelig lokal (map unit niveau 1:10000) forskel i variogrammernes udseende (Greve et al., 2003). Dette bekræftes af de EM38 kortlægninger, der er udført i nærværende projekt, hvor mange variogrammer er nestede (både på Yoldiaflade, hedesletten og det unge moræne landskab), og dermed indikerer, at den rumlige korrelation skal beskrives ved flere fordelinger med forskellig skala.

Lokalitet	Parameter	Mean	Range	Sill(C+C0)	Nugget				
Astrup	Ler	3,9	39,5	0,14	0,05				
	Silt	10,2	Unbounded						
	Humus	2,4	Pure nugget						
	Muldtykkelse	0,34	Unbounded						
	EM38	4,0	Nested varia	bilitet, range; 40,60,	90, 125, <b>225</b>				
Sjørup	Ler	4,9	100	0,34	0,14				
	Silt	20,7	Pure nugget	Pure nugget					
	Humus	2,1	25,7	0,06	0,02				
	Muldtykkelse	0,27	Pure nugget						
	EM38	1,1	35,1	0,88	0,3				
Stubkær	Ler	5,1	213	0,34	0,17				
	Silt	6,8	70,8	1,77	0,3				
	Humus	4,0	200	1,4	0,25				
	Muldtykkelse	0,28	Pure nugget						
	EM38	2,3	36,8	0,26	0,09				

**Tabel 3A.3**. Geostatistisk analyse af jordfysiske og kemiske data fra transekt i forbindelse med variationsmarkerne ved Astrup, Sjørup og Stubkær.

## Mikrobiologi.

De mikrobiologiske data, som er indsamlet i projektet og ligger til grund for vurderingen, er sammenfattet i tabel 3A.4. En mere udførlig oversigt over de mikrobiologiske undersøgelser er præsenteret i rapporterne for de enkelte landskabselementer. I det følgende behandles de to parametre ASA (arylsulfatase aktivitet) og SIR (substrat-induceret respiration), der indgår i de udvalgte korrelationsanalyser. Som datagrundlag anvendes målinger fra overjorden, hvor der er bestemt markvariation for seks af de otte lokaliteter

Parameter Landskabs- element	<b>Arylsulfatase aktivitet, ASA</b> (μg <i>p</i> -nitrophenol g <sup>-1</sup> time <sup>-1</sup> )					Substrat-induceret respiration, SIR $(\mu L CO_2 g^{-1} time^{-1})$				
	Min	maks	middel	std	antal	min	maks	middel	std	antal
Yoldia- Flade	8,3	38,4	17,1	7,3	51	2,6	9,7	5,1	1,5	51
Alluvial- kegle	9,2	31,8	20,7	5,9	48	2,0	7,8	3,7	1,2	48
Proximal smelte- vands-slette	0,8	19,2	7,0	3,2	49	1,8	9,1	3,9	1,7	30
Distal smel- tevands- slette	2,0	16,5	7,1	3,1	48	0,9	9,2	3,2	1,8	48
Bakkeø, MS	10,2	24,5	16,1	3,7	51	3,1	10,8	6,4	2,1	51
Bakkeø, DS	7,2	33,9	23,9	14,6	3	4,1	6,0	5,1	1,3	2
Djurs- Himmerl. MS	6,5	26,9	16,3	4,3	46	2,8	6,5	4,2	0,8	46
Vendsyssel, MS	16,2	24,5	20,4	4,2	3	na	na	na	na	Na

**Tabel 3A.4.** Deskriptiv statistik for de mikrobiologiske parametre.

Arylsulfatase aktiviteten afspejler jordens indhold af biologisk aktive enzymer. Værdierne målt i projektet spænder fra 0,8 til 38,4 µg *p*-nitrophenol g<sup>-1</sup> time<sup>-1</sup>. Middelværdierne spænder fra 7,0 til 23,9 µg *p*-nitrophenol g<sup>-1</sup> time<sup>-1</sup> med de laveste middelværdier på den proximale og distale smeltevandsslette. Disse værdier svarer til tidligere målinger i danske overjorde, hvor gennemsnitsværdier for sandjorde ligger på 14,5 µg *p*-nitrophenol g<sup>-1</sup> time<sup>-1</sup>, mens niveauet for lerjorde ligger på 23,5-29,9 µg *p*-nitrophenol g<sup>-1</sup> time<sup>-1</sup>. Frekvensfordelingen af de målte aktiviteter viser en jævn kurve, der kan approximeres med en normalfordelingskurve med middelværdi 14,7 og standardafvigelse 7,5 (Fig. 3A.5).



**Figur 3A.5**. Frekvensfordeling for målinger af arylsulfatase aktivitet (ASA) og substratinduceret respiration (SIR) i overjord fra de undersøgte lokaliteter. De optrukne kurver viser normalfordelingen for de pågældende datasæt.

Den substrat-inducerede respiration afspejler indirekte jordens mikrobielle biomasse. Målingerne spænder fra 0,9 til 10,8  $\mu$ L CO<sub>2</sub> g<sup>-1</sup> time<sup>-1</sup>. Middelværdierne for de undersøgte lokaliteter spænder fra 3,2 til 6,4  $\mu$ L CO<sub>2</sub> g<sup>-1</sup> time<sup>-1</sup>. Dermed er denne parameter, sammenlignet med arylsulfatase aktiviteten, meget homogen på de undersøgte lokaliteter.[FPV]. Niveauet er lidt lavere end i tidligere undersøgelser (4,1 til 14,0  $\mu$ L CO<sub>2</sub> g<sup>-1</sup> time<sup>-1</sup>), men dog i overensstemmelse med at disse målinger blev foretaget i sandblandede lerjorde. Frekvensfordelingen af de målte aktiviteter viser en jævn kurve, der kan approksimeres med en normalfordelingskurve med middelværdi 4,5 og standardafvigelse 1,9 (fig. 3A.5).

Samlet set befinder de målte værdier for ASA og SIR sig i et område, der er almindeligt for danske jordtyper (Elsgård et al. 2002, Vinter et al. 2001).

## Samlet konklusion for bilag 3A

På en skala svarende til variationsmarkerne (1,5-3 ha) er det, ud fra jordprøverne, ikke muligt på baggrund af det foreliggende datagrundlag at vurdere, om der er forskel i variabiliteten markerne i mellem. EM38 målingerne giver derimod god mulighed for at vurdere forskelle i variabiliteten både på mark- og landskabstypeniveau. EM38 undersøgelserne viser, at der i de øverste 1 – 2 m u. t. er en relativ lille variabilitet inden for alluvialkegle, proximale og distale smeltevandssletter samt Weichsel morænefladen, mens variabiliteten er større inden for Yoldiafladen og på bakkeøer.

På lidt større skala har georadarundersøgelser, sammenholdt med geologiske data fra udgravninger og boringer, vist, at den laterale geologiske variabilitet i op til 10–15 m dybde på marker og langs profillinier inden for alluvialkegle, proximale og distale smeltevandssletter er relativt lille mens den inden for Yoldiafladen, bakkeøer og Weichsel morænen er moderat til relativ stor. Uoverensstemmelsen i vurderingen af variabiliteten på Weichsel morænen mellem EM38 og georadarundersøgelserne kan eventuelt forklares ved, at der er en større variation i underjorden (under EM38 metodens indtrængningsdybde) eller at der indgår data fra lokaliteter, hvor der ikke både er målt EM38 og georadar, hvorved datagrundlaget for vurderingerne er forskelligt. Derudover har andre EM38 undersøgelser dog vist, at der også kan være stor variation på Weichsel morænen (Greve et al. 2003).

På en væsentlig større skala og på baggrund af teksturanalyser fra de landdækkende jordbundsdatabaser vurderes det specielt på basis af lerindholdet, at der inden for alluvialkegle, proximale og distale smeltevandssletter samt Weichsel morænefladen er en relativ lille variabilitet mens variabiliteten er større inden for Yoldiafladen og på bakkeøer.

Undersøgelserne viser desuden, at landskabselementerne er karakteristisk forskellige med hensyn til tekstur og humus. Den vigtigste forskel mellem Yoldia- og hedesletteaflejringerne fremgår af sand-fraktionernes indbyrdes fordeling, disse landskabselementer adskiller sig fra Weichsel moræneflade og Bakkeøer, der er karakteriseret ved meget dårlig sorteret sandfraktioner.

#### **Referencer:**

Elsgaard, L., Andersen, G. H. and Eriksen, J. (2002) Measurement of arylsulphatase activity in agricultural soils using a simplified assay. Soil Biology and Biochemistry 34, 79-82

Greve, M. H., Nehmdahl, H. & Krogh, L., 2003. Soil mapping on the basis of soil electrical conductivity measurements with EM38. p. 26-34. In: B. Lindén and S. Olesen (ed.) Implementation of Precision Farming in Practical Agriculture. Proc. Seminar No. 336, Nordic Association of Agricultural Scientists, Skara, Sweden. 10 - 12 Jun. 2002. DIAS Report, Plant Production No. 100, Tjele, Denmark.

Nehmdahl, H. & Greve M.H., 2001. Using soil electrical conductivity measurements for delineating management zones on highly variable soils in Denmark. p. 461-466 In: G. Grenier and S. Blackmore (ed.) Proc. of the 3rd European Conference on Precision Agriculture, Montpellier, France. 18-20. Jun. 2001. Vol. 1. ISBN 2-900792-13-4.

Vinther, F. P., Elsgaard, L. and Jacobsen, O. S. (2001) Heterogeneity of bacterial populations and pesticide degradation potentials in the unsaturated zone of loamy and sandy soils. Biology and Fertility of Soils 33, 514-520

Webster, R., & Oliver, M.A., 2001: Geostatistics for environmental Scientist. 271 pp. John Wiley and Sons Ltd. England.

H.C. Barlebo, V. Ernstsen, P.R. Jacobsen, E. Nygaard, S. Torp, H. Vosgerau, I. Møller, M.H. Greve, B.V. Iversen, O H. Jacobsen, F.P. Winther, L. Elsgaard, U.C. Brinch, C.S.Jacobsen, R.Juhler og S.E. Olesen, 2002. Undersøgelses- og analysemetoder anvendt i forbindelse med undersøgelser af sandlokaliteter: Hvilke metoder er anvendt, og hvilke overvejelser er gjort? Koncept for Udpegning af Pesticidfølsomme Arealer, Rapport nr. 2, Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelse, Miljøministeriet, 62 pp.

Bilag side 44

# Bilag 3B. Variabilitet baseret på humus indholdet og det samlede ler-silt indhold

## GEUS: Per Rosenberg

Gennem projektets undersøgelser er det vist, at de jordegenskaber, der bærer det klareste udsagn om den generelle grad af følsomhed overfor udvaskning af pesticid, er indholdene af humus (organisk kulstof / 0,57), silt og ler: de primære zoneringsparametre. Det er disse jordegenskaber, der ligger til grund for de overvejelser og eksempler på karakterisering og zonering af profiler og arealer, som er vist i det foregående. Med oplysninger om indholdet af humus, silt og ler i den øverste meter af jordbunden kan den følsomhed, som hidrører fra jordens transport og bindingsegenskaber karakteriseres i kategorierne "særlig følsom" og "ikke særlig følsom", samt i nogle tilfælde også i en mellemkategori af "muligvis særlig følsom". Det er som omtalt muligt konkret at detaljere denne karakteristik ved at inddrage yderligere data, fx. vedrørende nedbrydning, og simulere udvaskningen af konkrete stoffer. Denne detailkarakterisering kan eventuelt resultere i at et "særligt følsomt" profil fx. flyttes ned i en mindre kritisk kategori. Resultaterne viser imidlertid at det er den zonering, som baserer sig på indholdet af humus, silt og ler, der regionalt vil kunne foretages som en samlet ensartet, komprimeret indsats.

Derfor er den følgende variabilitetsanalyse netop koncentreret om variationen i indholdet af humus, silt og ler.

Figurerne i dette bilag er placeret efter teksten.

#### Rammer og forudsætninger for de følgende variabilitetsberegninger:

Variabilitetsundersøgelserne er gennemført for projektets variationsmarker, hvor der er udtaget og karakteriseret prøver fra jordbundshorisonterne A (muldlaget) og B (udfældningslaget). Der er etableret "variationsmarker" på 6 af de 8 undersøgte landskabselementer.

For hver af de to horisonter er der lavet tre variable. De to første variable er:

- 1. Humusindholdet.
- 2. Summen af ler, finsilt og grovsilt (kaldes herefter "ler og silt").

Indholdet af disse to variable er summeret indenfor den øverste meter af jordbunden på følgende måde:

humus = CA\*tykkelseA\*VolvægtA+CB\*(1-tykkelseA)\*VolvægtB

ler og silt = ler og siltA\*tykkelseA\*VolvægtA+ler og siltB\*(1-tykkelseA)\*VolvægtB

hvor "CA og CB" er de oprindelige (eventuelt summerede) humusindhold i hhv. A- og Bhorisonterne (organisk kulstof, C = humus x 0,57);

" ler og siltA" og "ler og siltB" er de oprindelige (eventuelt summerede) indhold af de fine fraktioner i hhv. A- og B-horisonterne;

"tykkelseA" er A-horisontens gennemsnitlige tykkelse i kvadratnetsprofiler i sandjord = 28 cm (dette indebærer en beregningsmæssig gennemsnitlig tykkelse af B-horisonten på 72 cm); "VolvægtA" og "VolvægtB" er A- og B-horisonternes gennemsnitlige volumenvægt på hhv. 1,41 g/cm<sup>3</sup> og 1,46 g/cm<sup>3</sup> i kvadratnetsprofiler i sandjord.

Ved denne beregning etableres der gennemsnitlige værdier, som udgør et fælles grundlag for vurdering af variabiliteten i de samlede profildybder og gør det muligt at give et meget groft estimat af den relative udvaskning ved hjælp af den etablerede korrelation. Beregningen er en tilnærmelse på grund af anvendelsen af gennemsnitsværdier for A- og B-horisonternes tykkelser og fordi B-horisonten beregningsmæssigt indeholder den del af C-horisonten som eventuelt ligger indenfor den øverste meter af jordprofilet.

3. Tredje variabel er den relative udvaskning, som er beregnet ved hjælp af korrelationsmodellen for kvadratnetsprofilerne, figur 3B.1 (se kapitel 3.3), hvor outliers er indikeret med rødt.

For at få et førsteordensestimat af udvaskningen er marginale prøver, der passer dårligt til korrelationsmodellen fjernet. Det drejer sig om ca. 10 prøver. Det er ikke nærmere undersøgt, hvorfor disse prøver er outliers. (Der er sandsynligvis en række individuelle årsager). Statistisk er det ikke nødvendigvis forkert at fjerne sådanne prøver, idet formålet kun er at skabe en grov udvaskningsmodel, der kan bruges til relativt at rangordne jordene på variabilitetsmarkerne imod hinanden. Ved tolkningen skal der imidlertid tages hensyn til dette forhold.

For at gøre det muligt at vurdere heterogeniteten indenfor den enkelte undersøgelsesmark illustreres middelværdi og spredning, både for hvert cluster af dataindsamlingspunkter (5 punkter tæt ved hinanden) og for marken som helhed, for hver samhørende værdi af humus, ler og silt, og modelleret relativ udvaskning. Middelværdi og spredning giver i de fleste tilfælde et acceptabelt estimat af variabiliteten (sammenfald mellem middelværdi og medianværdi), til trods for at værdierne ikke kunne forventes at være normalfordelte, fx. figur 3B.5.

Variabiliteten for hver af markerne er vist på et "kort", hvor hvert punkt (dataindsamlingspunkt) er afsat med UTM koordinater, og hvor farvekoden angiver den pågældende variabels værdi. Værdierne er opnået ved en såkaldt Delaunay triangulation, hvor hvert punkt er forbundet gennem et sæt linier til sine naboer. Det medfører at marken inddeles i trekanter, indenfor hvilke der foretages lineær interpolation mellem hjørnepunkterne. Metodens forudsætninger er ikke fuldstændig opfyldt i herværende sammenhæng, idet den forudsætter og tillægger lineært interpolerede udvaskningsværdier for kombinationer af jordegenskaber, hvilke relationer ikke er konkret dokumenterede. Metoden fungerer imidlertid stedse bedre jo tættere punkterne ligger, og jo lavere variabilitet der er mellem punkterne, og er derfor vurderet anvendelig til variabilitetsvurderingen.

Endelig benyttes der kort med angivelse af EM38 målingerne for de pågældende marker.

#### Forenklinger i forbindelse med variabilitetstolkningen.

Resultaterne, baseret på indhold af humus, og ler og silt, beskriver alene variabiliteten for overjord og underjord (samlet for A- og B-horisonterne). Variabilitet der skyldes forskelle i horisonternes tykkelse eller forskelle i jordens volumenvægt (kompakteringen) er elimineret med de anvendte gennemsnitsværdier (baseret på kvadratnetsprofilerne). Betydningen af en eventuel/sandsynlig C-horisont indenfor den øverste meter er ikke indkalkuleret, idet der ikke er taget prøver fra C-horisonten på variabilitetsmarkerne.

Den korrelerede relative udvaskning har en betydelig usikkerhed (mere end 20%), og kan kun anvendes i en grov tolkning af markens variabilitet. Det vil naturligvis altid være mest korrekt at vurdere direkte på grundlag af de målte variable. Til gengæld vil de overordnede tendenser, som fremstår <u>til trods</u> for denne usikkerhed, have væsentlig udsagnskraft.

De kort, som er produceret, viser en sammenhæng mellem udvaskning, humus, og ler og silt. Dette er ikke overraskende, da udvaskningen netop er predikteret ud fra disse værdier. Mens de sammenhænge, som er illustreret i kortene, således er indbyggede og ikke viser ny viden, kan kortene imidlertid anvendes til at vurdere den indbyrdes betydning af disse variable i forskellige scenarier.

### Variation mellem marker

Der er beregnet gennemsnit og 95% konfidensinterval for hhv. humusindhold, indhold af ler og silt, og beregnet udvaskning på de 6 marker:

*Humus, figur 3B.2.* Det gennemsnitlige humus indhold varierer mellem ca. 12 og 22 kg/m<sup>2</sup>. Ulsted marken har det laveste gennemsnitlige humusindhold, men en betydeligt variation, mens Sjørup marken har næsten tilsvarende lavt humusindhold og den mindste variation. Alle marker, undtaget Ulsted, adskiller sig signifikant fra Sjørup. Der er ikke signifikante forskelle mellem de øvrige marker, som har en gennemsnitsværdi på ca. 18 kg/m<sup>2</sup> og en betydelig spredning, ved samlet vurdering af alle data fra markerne.

Ler og silt, figur 3B3. Indholdet af ler og silt varierer fra under 100 kg/m<sup>2</sup> til ca. 350 kg/m<sup>2</sup> i gennemsnit. Stubkær, Simmelkær og Kølvrå har både de laveste indhold og mindste variationer i ler og silt indhold. Sjørup, Astrup og Ulsted adskiller sig signifikant fra Stubkær, Simmelkær og Kølvrå markerne. Der er en betydelig spredning og et relativt lavt gennemsnitsindhold indenfor Ulsted marken, mens gennemsnitsindholdene i Sjørup og Astrup markerne er højere (og ligeledes med en betydelig spredning).

Udvaskning, figur 3B4. Det er Ulsted, Kølvrå og Simmelkær markerne der har de højeste beregnede udvaskninger, hvilket især er sammenfaldende med/afledt af lavt ler og silt indhold. I Ulsted er der den største variation både i humus, og ler og silt indholdet, hvilket tilsammen medfører at Ulsted er den mest følsomme lokalitet. For Kølvrå og Simmelkær er der et lavt og ensartet indhold af ler og silt, mens humus indholdet ligger i mellemområdet.

Sjørup og Astrup markerne har relativt lave gennemsnitlige udvaskninger. I Sjørup er lavt humusindhold kompenseret af de højeste indhold af ler og silt. I Astrup forudskikker både højt humus-, og ler og silt indhold den lave udvaskning.

Der er en klar tendens til at variationen i relativ udvaskning stiger med gennemsnitsværdien, hvilket betyder at de lokaliteter, som samlet set er mest heterogene, gennemsnitligt er de mest følsomme, hvilket er en meget væsentlig egenskab i zoneringsøjemed.

#### Dokumentation af variabiliteten for de primære kortlægningsparametre på undersøgelsesmarkerne

<u>Ulsted</u>: Figurerne 3B.5-7 viser de primære kortlægningsparametres værdier, gennemsnitsværdier og 95% konfidensintervaller for hhv. de fire clustre (hvor der er kort afstand mellem 5 prøvetagningssteder) og for marken som helhed. Figurerne 3B.8-11 illustrer variabiliteten på tematiske kort.

Ulsted er præget af betydelig heterogenitet for såvel humus som ler og silt. Variationen er på markskala, idet variationen indenfor de enkelte clustre er betydeligt lavere. Generelt er marken præget af et intermediært indhold af ler og silt, men med et lokalt indslag af højt ler og silt indhold, og med betydelig variation, omkring cluster 4, figur 3B.6. Humus indholdet varierer betydeligt indenfor marken, men er forholdsvis ensartet indenfor de enkelte clustre.

Samlet set medfører dette en betydelig variation i relativ udvaskning. Cluster 2 har højest udvaskning, figur 3B.7, forårsaget af meget lavt indhold af ler og silt, og lavt humus indhold. Også udvaskningen varierer mest, når marken vurderes som helhed, idet der, bortset fra cluster 2, er meget lille variation indenfor clustrene, figur 3B.7. Samlet set varierer udvaskningen mellem 0 og 1.4 baseret på/i forhold til kvadratnetprofilerne, hvilket betyder at selve marken (marken som helhed) er mere heterogen end sandjordsprofilerne i kvadratnettet.

Udvaskningskortet, figur 3B.10, viser et område, som strækker sig fra sydøsthjørnet ind over midten af kortet, med relativ høj udvaskning, medens der de øvrige steder på marken er lav beregnet udvaskning. Området med relativt høj udvaskning afspejles især på humus kortet,

figur 3B.8, men også i mindre omfang på ler og silt kortet. Em38 kortet, figur 3B.11, viser en resistivitetsfordeling som nogenlunde svarer til fordelingen af ler og silt. Denne fordeling fremgår dog kun vagt af kortet for ler og silt, da skalaen er fælles for alle ler og silt kort. EM38 kortet afspejler kun svagt forskellene i humusindhold (EM38 er ikke særlig følsom overfor lave og middelhøje humusindhold). Lavt humus indhold er sammenfaldende med lavt indhold af ler og silt, hvilket forstærker indslagene med høj udvaskning i figur 3B.10.

Den store heterogenitet i udvaskningen på Ulsted marken, der understøttes af EM38 målingerne, medfører at der her er behov for at udtage relativt mange prøver, hvis størrelse og fordeling af sårbarheden skal bedømmes på dette grundlag Imidlertid er det kun et lille antal datapunkter, hvor den beregnede udvaskning er særligt høj, som en afspejling af variationen i humus-, og ler og silt indhold. Kortlægning af følsomheden indenfor Ulsted-lignende arealer kan derfor foretages på basis af EM38, suppleret med støttepunkter for humusindhold. Variation på EM38 kan i nogen grad, suppleret af kendskab til landskabselementet og variationerne i humusindhold i overjorden, hjælpe til udvælgelsen af disse datapunkter for humusindhold.

<u>Stubkær</u>: Figurerne 3B12-14, viser parametrenes værdier, gennemsnitsværdier og 95% konfidensinterval for hhv. de fire clustre og for marken som helhed.

Stubkær er overordentlig homogen, især for ler og silt indholdet, og også det relativt høje humusindhold er ret ensartet fordelt. Marken er præget af et ret lavt indhold af ler og silt, mens humusindholdet til gengæld er det højeste indenfor de undersøgte marker. Variationen i ler og silt indhold findes generelt på markniveau, idet markens variation er af samme størrelse som clustrenes variation. For humusindholdet gælder næsten samme forhold, idet markens variation dog er noget større end clustrenes. Resultatet er at også den simulerede udvaskningen er lav og udviser tilsvarende homogenitet på et relativt lavt niveau (især forårsaget af det relativt høje indhold humus).

Kortene, figur 3B.15-18, illustrerer ovennævnte variabilitet.

Kortene over EM38 og ler og silt indhold udviser begge homogenitet og lave værdier. Humuskortet viser nogen variabilitet, især omkring den nordøstlige afgrænsning, figur 3B.15. Denne variabilitet er dog stærkt præget af et enkelt punkt, og derfor ikke signifikant. Fordelingen af humus i figur 3B.15 svarer til fordelingen i udvaskningen, figur 3B.17, hvorfor det for Stubkær vil det være simpelt at kortlægge sårbarheden.

<u>Kølvrå</u>: Figurerne 3B.19-21, viser parametrenes værdier sammen med gennemsnit og 95% konfidensinterval for hhv. de fire clustre og samlet for variationsmarken.

Bortset fra cluster 1 for humus og cluster 4 for ler og silt, er Kølvrå marken meget homogen, figur 3B.19 og 3B.20. Variationen omkring clustrene er således, med de nævnte undtagelser, betydeligt mindre end variationen for marken som helhed. Variationen af humus i cluster 1 afspejles i udvaskningen, figur 3B.21, hvor denne svarer til den største variation og er med til at præge variationen på marken som helhed. Indholdet af ler og silt er relativt lavt, figur 3B.20, mens humusindholdet ligger på et gennemsnitligt niveau. Dette medfører at udvaskningen gennemgående er forholdsvis lav, med en relativt lille spredning og kun enkelte meget høje værdier, figur 3B.21.

Kortene, figur 3B.22-25, illustrerer den nævnte variabilitet.

Em38-kortet, figur 3B.25, bekræfter det ensartede indhold af ler og silt. Derfor er det variationen i humusindhold, der styrer variationen i udvaskning, hvilket fremgår tydeligt af kortene (sammenlign figur 3B.22 og 3B.24).

Det vil, ligesom for Stubkær, være forholdsvis enkelt at vurdere fordelingen af følsomheden overfor udvaskning af pesticid i områder svarende til Kølvrå, idet humusindholdet syntes at være afgørende.

<u>Simmelkær</u>: Figurerne 3B.26-28, viser parametrenes værdier sammen med gennemsnit og 95% konfidensinterval for hhv. de fire clustre og for variationsmarken som helhed.

Vedrørende humusindholdet er der på marken fortrinsvis et gennemsnitligt humus indhold, suppleret med en population med noget højere indhold, figur 3B.26 og 3B.29. Denne fordeling afspejles i at der er to clustre med meget stor spredning og to med ringe. For ler og silt er indholdet generelt lavt og spredningen er lille, figur 3B.27 og 3B.30. Clustervariationen er sammenlignelig med markvariationen.

Spredningen i humusindholdet afspejles i fordelingen af udvaskningen, om end øjensynlig i en afdæmpet form, figur 3B.28 og 3B.31. Den relative udvaskning er forholdsvis lille og spredningerne indenfor clustrene og for marken som helhed er i samme størrelse, og systematisk varierende over marken.

Kortene, figur 3B.29-32, illustrerer den beskrevne variabilitet.

Generelt udviser EM38 samme høje grad af homogenitet som ler og siltindholdet. Der er imidlertid høje EM38 værdier langs sydøstkanten, som ikke afspejles i indholdet af ler og silt, hvilket må skyldes fx. kabler langs skel, figur 3B.32.

Som i de øvrige tilfælde, hvor der er homogene fordelinger af indholdet af ler og silt, er det variationerne i humusindholdet, der bestemmer variationerne i simuleret, relativ udvaskning. Effekten af det relativt lave humusindhold i den ene ende af marken slår igennem som relativt høj udvaskning i denne ende af marken, hvor der systematisk er relativt højere udvaskning, figur 3B.31.

<u>Astrup</u>: Figurerne 3B.33-35, viser parametrenes værdier sammen med gennemsnit og 95% konfidensinterval for hhv. de fire clustre og for variationsmarken som helhed.

Astrup marken har både relativt højt humus-, og ler og silt indhold. Variationen i indhold af ler og silt indenfor clustrene er af samme størrelsesorden som variationen indenfor marken, figur 3B.34. For to af clustrene er der for humus en betydeligt ringere variation en for de to øvrige clustre og for marken som helhed. Umiddelbart virker det som om der for humusindholdet er to populationer: en høj og en lav, figur 3B.33 og 3B.36.

Generelt er udvaskningen meget lav, bortset fra et strøg med højere værdier, som tilskrives et relativt lavt indhold af ler og silt, sammenlign figur 3B.35 og 3B.38. Variationen i udvaskning indenfor clustrene er i samme størrelse som for marken som helhed.

Kortene, figur 3B.36-39, illustrerer den beskrevne variabilitet.

Variationen i indholdet af ler og silt afspejles ikke entydigt i EM38 målingerne, sammenlign figur 3B.37 og 3B.39. Det er relativt få punkter der bærer variationen og markerne er meget homogene. Humusindholdet afspejles ikke i udvaskningen, som er styret af det højeste indhold af ler og silt (om end ler og silt indholdet generelt er lavt og ensartet).

<u>Sjørup</u>: Figurerne 3B.40-42, viser parametrenes værdier sammen med gennemsnit og 95% konfidensinterval for hhv. de fire clustre og for variationsmarken som helhed.

Sjørup er (sammen med Ulsted, figur 3B.2) marken med det laveste indhold af humus, som desuden er særdeles ensartet fordelt, figur 3B.40. Variationen indenfor variationsmarken er noget højere end indenfor de enkelte clustre. Til gengæld er der i Sjørup et meget højt indhold af ler og silt, med betydelig variation, der er i samme størrelse indenfor marken som helhed og indenfor clustrene, figur 3B.40. Resultatet er at Sjørup marken har den næst laveste udvaskning, omend med nogen variation, der (i lighed med fordelingen af ler og silt) er af samme størrelse for marken som helhed og indenfor clustrene.

Kortene, figur 3B.43-46, illustrerer den nævnte variabilitet.

Variationen i indhold af ler og silt afspejles tildels i EM38 kortet, sammenlign figur 3B.44 og 3B.46.
Humusindholdet er overordentlig ensartet fordelt, figur 3B.43, og de relativt små variationer i udvaskningen, figur 3B.45, skyldes altovervejende indholdet af ler og silt, figur 3B.44.

## Konklusion:

Astrup-, Sjørup- og Stubkærmarkerne er de mindst sårbare af de undersøgte marker, som også udmærker sig ved at variabiliteten er temmelig lav.

Indenfor Ulsted marken er der en betydelig variation i udvaskningen og marken er samlet set den mest følsomme af lokaliteterne. Dette skyldes et delområde på marken med lavt humus-, og ler og silt indhold. Relativt vurderes Ulsted marken at være et særligt følsomt område, indenfor hvilket der er delområder, som relativt er meget følsomme. De lokale meget følsomme områder er sammenhængende, figur 3B.10, hvilket gør dem relativt nemme at identificere/kortlægge.

Også Kølvrå og Simmelkær markerne er relativt følsomme overfor (relativ, simuleret) udvaskning, men har forholdsvis ringe variation i udvaskning og ingen særligt følsomme delområder indenfor markerne.

Med henblik på dokumentation af følsomheden overfor udvaskning (gennem analyse) vil det kun for Ulsted-situationens vedkommende være nødvendigt med en tæt prøvetagning. Kendskab til variationerne i humusindhold i A-horisonten vil, sammen med EM38 målinger, kunne give et fingerpeg om den nødvendige prøveudtagningstæthed.

På grundlag af variabilitetsanalysen af de primære zoneringsparametre er det de områder som er mest heterogene mht. indholdet af især ler og silt, men også humus, som er de mest følsomme overfor udvaskning af pesticid. Dersom et områdes store variabilitet er kendt i forvejen kan det afgrænses og dets særligt følsomme karakter fastlægges på grundlag af en "værst mulig" karakteristik. Alternativt kan delområder med forskellige grader af følsomhed overfor pesticidudvaskning kortlægges gennem tæt prøvetagning.

Følsomheden overfor udvaskning af pesticid kan, for de øvrige undersøgte lokaliteter, som alle er relativt mindre følsomme end Uldsted marken, karakteriseres ved hjælp af EM38 og relativt få prøver.

De marker, som ikke er særligt følsomme overfor udvaskning af pesticid, er relativt homogene med få outliers i korrelationen af relative udvaskning.

Ud fra de profiler som projektet har undersøgt synes de mest heterogene områder, især på ler-silt fraktionen men også på humus, også at være de mest følsomme, og at disse enten kan vælges ud alene ud fra et kendskab til stor heterogenitet på pågældende landskabstype, eller at disse kan prøvetages meget tæt. De øvrige lokaliteter kan udvælges ud fra et meget begrænset antal prøver/observationer.



*Figur 3B.1.* Sammenhængen mellem simuleret og korreleret udvaskning for et kunstigt stof med udgangspunkt i MCPA's bindingsegenskaber.



Figur 3B.2. Variationen i humusindhold indenfor projektets undersøgelsesmarker.



Figur 3B.3. Variationen i ler og siltindhold indenfor projektets undersøgelsesmarker



Figur 3B.4. Variationen i korreleret relativ udvaskning indenfor projektets undersøgelsesmarker.



**Figur 3B.5.** Variationen i humusindhold for hele undersøgelsesmarken og de fire tætte clustre af undersøgelsespunkter.



**Figur 3B.6.** Variationen i ler- og siltindhold for hele undersøgelsesmarken og de fire tætte clustre af undersøgelsespunkter.



**Figur 3B.7.** Variationen i korreleret relativ udvaskning hele undersøgelsesmarken og de fire tætte clustre af undersøgelsespunkter.



Figur 3B.8. Ulsted. Variationen i humusindhold for hele undersøgelsesmarken.



Figur 3B.9. Ulsted. Variationen i ler- og siltindholdet for hele undersøgelsesmarken.



Figur 3B.10. Ulsted. Variationen i korreleret relativ udvaskning for hele undersøgelsesmarken.



**Figur 3B.11.** Ulsted. Variationen i EM38-værdier for hele undersøgelsesmarken. Skalaen er tilpasset for at vise maksimal variation.



**Figur 3B.12.** Variationen i humusindhold for hele undersøgelsesmarken og de fire tætte clustre af undersøgelsespunkter.



**Figur 3B.13.** Variationen i ler- og siltindhold for hele undersøgelsesmarken og de fire tætte clustre af undersøgelsespunkter.



**Figur 3B.14.** Variationen i korreleret relativ udvaskning for hele undersøgelsesmarken og de fire tætte clustre af undersøgelsespunkter.



Figur 3B.15. Stubkær. Variationen i humusindhold for hele undersøgelsesmarken.



Figur 3B.16. Stubkær. Variationen i ler- og siltindhold for hele undersøgelsesmarken.



Figur 3B.17. Stubkær. Variationen i korreleret relativ udvaskning for hele undersøgelsesmarken.



**Figur 3B.18.** Stubkær. Variationen i EM38-værdier for hele undersøgelsesmarken. Skalaen er tilpasset for at vise maksimal variation.



**Figur 3B.19.** Variationen i humusindhold for hele undersøgelsesmarken og de fire tætte clustre af undersøgelsespunkter.



**Figur 3B.20.** Variationen i ler- og siltindhold for hele undersøgelsesmarken og de fire tætte clustre af undersøgelsespunkter.



**Figur 3B.21.** Variationen i korreleret relativ udvaskning for hele undersøgelsesmarken og de fire tætte clustre af undersøgelsespunkter.



Figur 3B.22. Kølvrå. Variationen i humusindhold for hele undersøgelsesmarken.



Figur 3B.23. Kølvrå. Variationen i ler- og siltindhold for hele undersøgelsesmarken.



Figur 3B.24. Kølvrå. Variationen i korreleret relativ udvaskning for hele undersøgelsesmarken.



**Figur 3B.25.** Kølvrå. Variationen i EM38-værdier for hele undersøgelsesmarken. Skalaen er tilpasset for at vise maksimal variation.



**Figur 3B.26.** Variationen i humusindhold for hele undersøgelsesmarken og de fire tætte clustre af undersøgelsespunkter.



**Figur 3B.27.** Variationen i ler- og siltindhold for hele undersøgelsesmarken og de fire tætte clustre af undersøgelsespunkter.



**Figur 3B.28.** Variationen i korreleret relativ udvaskning for hele undersøgelsesmarken og de fire tætte clustre af undersøgelsespunkter.

## Bilag 4. Geokemiske og fysiske parametre - repræsentativitet GEUS: Vibeke Ernstsen

I forbindelse med feltarbejdet på de udvalgte KUPA lokaliteter blev der indsamlet jordog sedimentprøver til analyse i laboratoriet. Prøverne blev behandlet og analyseret som beskrevet i Barlebo et al. (2002). I det følgende beskrives middelværdien for udvalgte fysiske, kemiske og jordtype parametre for hvert af de 8 landskabselementer, der har været behandlet i undersøgelsen. Beskrivelsen af landskabselementerne knytter sig derfor udelukkende til data indsamlet i forbindelse med dette projekt. Analyse- og jordtype parametre fremgår af tabel 4.1, der bygger på værdier fra de supplerende tekstur- og geokemi tabeller, som følger efter hovedteksten , hvor der foruden de her viste data findes oplysninger om de fysiske og kemiske forhold indenfor de enkelte landskabselementer med angivelse af prøveantal, middel-, minimums- og maximums-værdi for henholdsvis A-, B-, og C-horisonter.

Indholdet af ler, silt og sand giver anledning til en opdeling af de undersøgte landskabselementer i tre hovedgrupper, bestående af 1) yoldia fladen, 2) hedeslette aflejringer samt 3) morænesands-aflejringer. Yoldia fladen er således karakteriseret ved forholdsvis høje indhold af grovsilt, fint sand og fint mellemsand (63-200 µm). Hedeslette aflejringerne på Karup- og Tinglev hedesletter består overvejende af groft mellemsand og groft sand (200-2000 μm). Ligeledes er hedeslette-aflejringerne på henholdsvis Skovbjerg og Esbjerg bakkeø karakteriseret ved et betydeligt indhold af groft mellemsand (200-500 µm) men dog ved et mindre indhold af groft sand (500-2000 µm). De supplerende oplysninger om indholdet af groft sand viser imidlertid et stærkt varierende indhold af denne fraktion (2-37 %) på denne landskabstype, hvorfor det stadig vil være rimeligt at opretholde hedeslettesedimenterne som en gruppe. Den tredje gruppe, omfattende morænesandsaflejringer, indeholder ligesom alluvial fladens aflejringer betydeligt mere fint sand og fint mellemsand (63-200 µm) end hedeslettens aflejringer. Hertil kommer, specielt for morænesand af Weichsel-alder, et forholdsvis højt indhold af grovsilt (20-63 μm) og for morænesandet fra Vendsyssel analogt betydelige mængder finsilt og ler (< 20 μm).

Den nævnte gruppering viser sig ligeledes i jordtypen bestemt ved JB klassificeringen, idet de undersøgte profiler på Yoldia fladen er af JB-type 2-3, mens profilerne på hedesletten er JB-type 1-2 og profilerne med morænesand typisk er JB-type 3-4.

Indholdet af organisk stof variere mellem 1,53 og 2,24 % C i A-horisonterne på de undersøgte landskabselementer, hvorefter indholdet aftager markant i B-horisonterne til mellem 0,29 og 0,56 % C, for yderligere at aftage til middelværdier på 0,02-0,30 % C for C-horisonterne. De højeste indhold forekommer i de kalkholdige sedimenter af morænesand indsamlet i Djursland og Vendsyssel og det kan derfor ikke udelukkes at de forholdsvis høje indhold skyldes analyse-tekniske forhold knyttet til prøvernes indhold af kalk. Det reelle indhold af organisk stof må forventes at være lavere. Ses der bort fra resultaterne for kalkholdige morænesandsprøver er middelværdierne for de typiske indhold i C-horisonterne på mellem 0,02 og 0,09 % C. En svagt forhøjet middelindhold i prøverne fra C-horisonterne på yolidiafladen kan bl.a. skyldes at prøverne her er udtaget ned til maximalt 1,50 meters dybde og derfor løbende modtager organisk materiale fra overfladen.

Arealudnyttelsen, hvor der i forbindelse med dyrkning tilføres kalk/mergel betyder, at pH-værdien samt indholdet af ombytteligt calcium og ombyttelig surhed, specielt i A- og B-horisonterne, løbende reguleres og i høj grad er bestemt af den pågældende landmands dyrkningspraksis samt tidspunktet for sidste opkalkning. I prøverne fra Chorisonterne er de laveste pH-værdi (målt i CaCl<sub>2</sub>) målt på alluvialkeglen på hedesletten og i prøver af smeltevandssand på bakkeøen. Basemætning, som samleparametre for fordelingen af baser og surhed, er omkring 50 % i de undersøgte A-horisonter og omkring 20 % for B-horisonterne på de unge hedesletteaflejringer, 44 % for morænesandet i Vendsyssel og 28 % for resten af landskabselementerne. I prøverne fra C-horisonter fremstår profilerne på de unge Weichsel-aflejringer ved en basemætning lige over 50 %, hvor den på Yoldia fladen er omkring 30 %, mens den på de resterende landskabselementer typisk er 15-20 %. De her viste middelværdier spænder over store forskelle (se de supplerende tekstur- og geokemi tabeller), med minimums- og maximums-værdier på henholdsvis 2-4 % og 33-45 % for hedeslette aflejringerne. De tilsvarende værdier er henholdsvis 17 og 97 % for morænesand i Himmerland/Djursland, hvor nogle af de undersøgte prøver indeholder op mod 10 % kalk.

Fordelingen af forskellige former for jern og aluminium på de forskellige undersøgelseslokaliteter er ligeledes påvirket af opdyrkningen hvor bl.a. pløjning (herunder også dybdepløjning) har medført en opblanding af materiale fra A- og B-horisonterne. I de dybereliggende C-horisonter er indholdet af aluminium bestemt ved ekstraktion med henholdsvis dithionit-citrat-bicarbonat (Fe<sub>DCB</sub>) og oxalat (Fe<sub>oxalat</sub>) ikke markant forskellige for de forskellige landskabselementer, idet indholdet dog er relativt lavt i prøver af morænesand fra Himmerland og Djursland. Dette er i god overensstemmelse med at nogle af disse prøver ligeledes er beskrevet som kalkholdige. Som det fremgår af tabel 4.1, 4.7 og 4.11 dækker de i tabellen viste middelværdier over betydelige forskelle, hvor bl.a. den proximale og distale hedeslette på Karup - og Tinglev hedesletter står for de højeste minimums- og maximumværdier. Indholdet af jern i C-horisonterne er betydeligt højere på lokaliteterne med morænesand på bakkeøerne, i morænesandet i Vendsyssel og tildels også på alluvial keglen end for de øvrige landskabselementer. Fordelingen af jern er påvirket af dels forvitringsprocesser dels lokale hydrologiske forhold, som bedst beskrives ved dybdeprofiler for de enkelte lokaliteter ( projekt rapporter 3-10).

**Tabel 4.1.** Fysiske, kemiske og jordtype parametre bestemt på prøver indsamlet på otte forskellige landskabselementer. Tabellen viser middelværdien for jord- og sedimentprøver fra A-, B- og C-horisonten. Sidstnævnte repræsentere prøver indsamlet i den del af den umættede zone, der findes under B-horisonten. Den maksimale dybde for prøveindsamling på den pågældende type landskabselement (dybde) fremgår af tabellen. Flere data, inkl. prøveantal pr. horisont, miniumums- og maksimumsværdier findes i de supplerende tekstur- og geokemi tabeller.

Parameter	Voldia	Alluvial	Provimal	Distal	Bakkeø – DS	Bakkeø - MS	Diurs/Him	Vendsyssel
Turumeter	fladen	kegle	Hedeslette	hede-	smeltevands	moræne-	moræne-	moræne-
	muuth	negre	1100000000	slette	sand	sand	sand	sand
Dybde (cm)	150	750	200	300	475	775	725	330
Ler	A: 4.2	A: 4.8	A: 3.9	A: 4.0	A: 5.2	A: 4.7	A: 5.5	A: 7.6
(%)	B: 3,5	B: 3,5	B: 3,0	B: 2,8	B: 5,1	B: 7,5	B: 5,4	B: 13,5
	C: 5,5	C: 2,1	C: 1,8	C: 1,6	C: 2,9	C: 8,2	C: 5,6	C: 13,3
Finsilt	A: 6,1	A: 4,2	A: 3,3	A: 3,5	A: 5,6	A: 5,6	A: 6,2	A: 10,2
(%)	B: 1,5	B: 2,1	B: 1,3	B: 1,4	B: 3,7	B: 5,8	B: 5,6	B: 9,8
	C: 3,9	C: 1,3	C: 1,0	C: 0,9	C: 2,4	C: 4,5	C: 4,2	C: 11,4
Grovsilt	A: 9,4	A: 4,7	A: 1,7	A: 2,6	A: 4,7	A: 6,0	A: 10,3	A: 16,1
(%)	B: 8,3	B: 5,0	B: 1,0	B: 1,2	B: 8,8	B: 6,8	B: 12,6	B: 15,3
	C: 12,8	C: 2,1	C: 1,5	C: 1,4	C: 6,5	C: 6,8	C: 10,1	C: 15,4
Fint sand	A: 30,8	A: 6,1	A: 3,8	A: 5,0	A: 8,8	A: 18,8	A: 15,0	A: 23,6
(%)	B: 33,5	B: 3,5	B: 1,2	B: 1,7	B: 12,1	B: 14,4	B: 15,7	B: 23,0
	C: 40,3	C: 4,0	C: 1,1	C: 2,0	C: 11,1	C: 12,2	C: 15,4	C: 25,1
Fint mel-	A: 26,9	A: 7,8	A: 7,9	A: 12,1	A: 9,2	A: 15,6	A: 15,8	A: 14,5
lemsand (%)	B: 30,6	B: 4,1	B: 4,5	B: 6,1	B: 7,5	B: 18,1	B: 15,6	B: 16,2
	C: 31,4	C: 8,2	C: 3,8	C: 7,4	C: 7,3	C: 13,9	C: 16,9	C: 18,5
Groft mel-	A: 17,2	A: 46,1	A: 50,5	A: 55,1	A: 53,5	A: 39,3	A: 33,9	A: 20,0
lemsand (%)	B: 12,8	B: 38,2	B: 45,2	B: 66,1	B: 54,9	B: 37,7	B: 33,1	B: 16,2
	C:5,3	C: 45,6	C: 55,7	C: 66,5	C: 55,7	C: 42,9	C: 33,6	C: 12,8
Groft sand	A: 2,0	A: 17,0	A: 25,5	A: 14,9	A: 10,0	A: 5,5	A: 10,7	A: 5,3
(%)	B: 1,1	B: 31,1	B: 43,2	B: 19,8	B: 8,1	B: 8,7	B: 11,3	B: 5,4
	C: 0,5	C: 32,7	C: 34,9	C: 20,1	C: 13,8	C: 11,3	C: 12,6	C: 3,5
Jordtype	A: 2,3	A: 1,9	A: 1,3	A: 1,3	A: 2,3	A: 1,7	A: 3,2	A: 4,0
(JB nr.)	B: 2,7	B: 1,3	B: 1,2	B: 1,0	B: 1,7	B: 3,6	B: 3,0	B: 3,0
	C: 3,0	C: 1,0	C: 1,0	C: 1,0	C: 1,0	C: 4,0	C: 3,0	C: 6,0
Organisk stof	A: 1,66	A: 2,24	A: 2,01	A: 1,89	A: 1,80	A: 2,05	A: 1,53	A: 1,60
(% C)	B: 0,29	B: 0,37	B: 0,39	B: 0,56	B: 0,40	B: 0,51	B: 0,50	B: 0,39
ana	C: 0,14	C: 0,05	C: 0,07	C: 0,09	C: 0,02	C: 0,09	C: 0,30	C: 0,06
CEC	A: 11,20	A: 15,18	A: 12,82	A: 10,62	A: 13,79	A: 14,73	A: 10,15	A: 14,33
(meqv./100g)	B: 5,29	B: 5,61	B: 5,86	B: 5,79	B: 6,49	B: 9,47	B: 6,00	B: 9,24
	C: 4,41	C: 1,63	C: 2,04	C: 2,13	C: 2,32	C: 5,20	C: 4,71	C: 6,53
Ombyttelig Ca	A: 4,8/	A: 5,73	A: 5,34	A: 4,35	A: 7,70	A: 6,82	A: 4,01	A: 6,36
(cmol/kg)	B: 1,29	B: 0,89	B: 0,87	B: 1,11	B: 1,62	B: 0,47	B: 1,30	B: 3,46
Ombarttal's U	C: 1,10	C: 0,23	C: 0,25	C: 0,41	C: 0,22	C: 1,27	C: 2,3	C: 2,1
Ombyttelig H	A: 5,79	A: 8,91	A: 0,84	A: 5,54	A: 5,52	A: 7,21	A: 5,70	A: 0,89
(cmoi/kg)	D: 5,76	D: 4,33	D: 4,09	D: 4,08	D: 4,00 C: 2,02	D: 0,67	Б: 4,30 С: 2.0	D: 3,11 C: 2,2
Pasamotning	C. 2,07	C. 1,01	C. 1,50	C. 1,75	C. 2,02	C.3,37	C. 2,0	C. 3,2
(%)	A. 47 B. 28	A. 41 B. 18	A. 40 B. 22	A. 40 B. 23	A. 00 B. 28	A. 51 B. 28	A. 42 B: 28	A. 51 B. 44
(70)	D. 20 C: 31	D. 16 C: 15	D. 22 C·19	D. 25 C: 15	D. 20 C: 15	D. 26 C: 25	D. 20 C: 54	D. 44 C: 53
$pH(C_{2}C_{1}^{2})$	A: 5 53	A: 5 37	A: 5.09	Δ: 195	Δ · 5 9/	A: 5.73	A: 5.48	A: 5 79
pri(CaCi2)	R: 5,55	R: 5.44	R: 477	R: 5.02	R: 5 38	B: 5 20	R: 5.18	B: 5 38
	C: 5.17	$C \cdot 4.68$	$C \cdot 4.91$	$C \cdot 4.80$	C: 4 77	$C \cdot 434$	$C \cdot 5.91$	$C \cdot 4.78$
Al(oxalat)	A: 1327	A: 1276	A: 1041	A: 1035	A: 1662	A:1169	A: 1355	A: 1647
(mg/kg)	B: 1622	B: 1835	B: 1216	B: 1731	B: 1785	B: 2328	B: 1669	B: 1642
(	C: 938	C: 534	C: 696	C: 708	C: 668	C: 620	C: 446	C: 533
A1 (DCB)	A:1522	A: 1374	A: 1048	A: 1084	A: 1826	A: 1246	A: 1266	A: 1568
(mg/kg)	B: 2167	B: 1804	B: 1705	B: 1608	B: 1744	B: 2375	B: 1435	B: 1426
	C: 950	C: 491	C: 621	C: 609	C: 698	C: 610	C: 371	C: 537
Fe(oxalat)	A: 1619	A: 2357	A: 1693	A: 1670	A: 2571	A: 3798	A: 2654	A: 2861
(mg/kg)	B: 1171	B: 1235	B: 783	B: 850	B: 1412	B: 3899	B: 1740	B: 2682
	C: 833	C: 1089	C: 894	C: 675	C: 539	C: 1469	C: 726	C: 1435
Fe(DCB)	A: 2947	A: 3280	A: 2353	A: 2492	A: 3972	A: 3505	A: 2729	A: 3760
(mg/kg)	B: 2603	B: 3828	B: 1617	B: 1523	B: 3305	B: 4470	B: 2037	B: 2845
	C: 1780	C: 2287	C: 1603	C: 1393	C: 1128	C: 3044	C: 1436	C: 3667

På baggrund af de kemiske data fremkommet ved analyser af prøver indsamlet på de otte landskabselementer har det således vist sig relevant at underopdele nogle af de grupper der alene er baseret på fordelingen af ler, silt og sand.

Opdelingen omfatter herefter følgende landskabselementer:

- yoldia aflejringer
  - yoldiasand
- hedeslette aflejringer

- alluvialkegle
- proximal og distal hedeslette
- hedeslette på bakkeø
- morænesandsaflejringer
- morænesand af Weichsel-alder
- morænesand på bakkeø

## Referencer

H.C. Barlebo, V. Ernstsen, P.R. Jacobsen, E. Nygaard, S. Torp, H. Vosgerau, I. Møller, M.H. Greve, B.V. Iversen, O H. Jacobsen, F.P. Winther, L. Elsgaard, U.C. Brinch, C.S.Jacobsen, R.Juhler og S.E. Olesen, 2002. Undersøgelses- og analysemetoder anvendt i forbindelse med undersøgelser af sandlokaliteter: Hvilke metoder er anvendt, og hvilke overvejelser er gjort? Koncept for Udpegning af Pesticidfølsomme Arealer, Rapport nr. 2, Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelse, Miljøministeriet, 62 pp.

## Supplerende geokemiske og fysiske data fra projektlokaliteterne

Resultaterne for de kemiske parametre vises for hvert enkelt landskabselement. Desuden er udvalgte fysiske parametre relateret til jordens og sedimenternes kornstørrelsessammensætning medtaget hvor de har betydning for analysen af de kemiske parametre. Resultaterne for prøver fra A-horisonter findes i tabel 4.1-4.4, for prøver fra Bhorisonter i tabel 4.5-4.8 og for prøver fra C-horisonter i tabel 4.9-4.12. For hver parameter er anført hvor mange prøver der er analyseret samt en middelværdi, en minimumsværdi og en maximumsværdi for parameteren i disse prøver. **Tabel 4.1.** Indhold af ler (< 2  $\mu$ m), finsilt (2-20  $\mu$ m), grovsilt (20-63  $\mu$ m), fint sand (63-125  $\mu$ m), fint mellem sand (125-200  $\mu$ m), groft mellem sand (200-500  $\mu$ m) og groft sand (500-2000  $\mu$ m) beregnet som % af fraktionen mindre end 2 mm i prøver (n) udtaget i A-horisonter. For hver parameter er anført middelværdi, minimums-s- (min) og maximums- (max) værdi.

Landskabselement		ler (<	2 µm)			finsilt	(2-20 µm)			grovsilt	(20-63 µm)	)		fint sand	(63-125 µn	ı)
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-vær-	min	max
		værdi				værdi				værdi				di		
		(% af <	2mm frak	tion)		(% af <	< 2mm frakt	tion)		(% af	< 2mm frak	tion)		(% af -	< 2mm frak	tion)
Yoldia	7	4,2	3,2	5,8	7	6,1	3,8	8,2	7	9,4	5,3	14,2	7	30,8	22,0	37,1
alluvial-kegle	7	4,8	3,6	5,7	7	4,2	2,8	7,2	7	4,7	1,0	10,4	7	6,1	3,3	9,2
distal	7	4.0	3.2	5.8	7	3.5	14	67	7	26	1.0	10.1	7	5.0	2.5	11.3
hedeslette	'	4,0	5,2	5,0	'	5,5	1,4	0,7		2,0	1,0	10,1	'	5,0	2,5	11,5
proximal hedeslette	7	3,9	2,6	4,6	7	3,3	2,9	4,8	7	1,7	1,0	5,0	7	3,8	1,8	4,8
bakkeø-DS	3	5,2	4,2	5,8	3	5,6	3,3	8,2	3	4,7	1,4	9,6	3	8,8	6,5	10,5
bakkeø-MS	7	4,7	3,2	6,2	7	5,6	4,3	8,8	7	6,0	2,5	11,9	7	18,8	11,3	22,9
MS-Djursland/Himmerland	9	5,5	4,7	6,3	9	6,2	4,7	7,7	9	10,3	5,8	12,3	9	15,0	10,6	20,1
MS-Vendsyssel	3	7,6	5,9	9,5	3	10,2	8,1	11,6	3	16,1	11,4	20,4	3	23,6	20,2	27,1

Landskabselement	İ	fint mellem sar	nd (125-20	0 µm)		groft mellem	nt (200-500	μm)		groft sand	(500-2000	µm)
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max
		værdi				værdi				værdi		
		(% af <	2mm frak	tion)		(% af <	< 2mm frakt	tion)		(% af	< 2mm frak	tion)
Yoldia	7	26,9	20,0	29,7	7	17,2	11,9	24,0	7	2,0	0,9	14,1
alluvial-kegle	7	7,8	4,7	11,6	7	46,1	34,4	59,0	7	17,0	13,3	25,0
distal	7	12,1	4,4	17,9	7	55,1	34,2	60,2	7	14,9	3,9	26,7
hedeslette												
proximal hedeslette	7	7,9	2,4	16,0	7	50,5	39,5	60,6	7	25,5	9,7	37,0
bakkeø-DS	3	9,2	4,9	15,3	3	53,5	47,2	65,1	3	10,0	9,5	10,6
bakkeø-MS	7	15,6	4,6	24,5	7	39,3	30,3	62,5	7	5,5	3,6	7,4
MS-Djursland/Himmerland	9	15,8	7,3	19,1	9	33,9	25,9	53,2	9	10,7	6,0	13,5
MS-Vendsyssel	3	14,5	10,7	16,6	3	20,0	12,6	24,3	3	5,3	2,7	10,5

Landskabselement		fint grus (	( <b>2-6,3 mm</b> )	)		grus, sten, blo	okke (> 6,3	mm)		JI	B type	
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max
		værdi				værdi				værdi		
		(% a	f totalprøv	e)		(% :	af totalprøve	e)				
Yoldia	7	0,4	0	1,3	7	0	0	0,3	7	2,3	2	4
alluvial-kegle	7	6,4	1,8	6,7	7	8,8	2,6	18,2	7	1,9	1	3
distal	7	2,0	0,5	2,5	7	2,0	0	4,0	7	1,3	1	3
hedeslette												
proximal hedeslette	7	3,9	3,0	6,1	7	3,6	0	7,4	7	1,3	1	3
bakkeø-DS	3	4,2	0,6	8,5	3	3,4	2,4	5,2	3	2,3	1	3
bakkeø-MS	7	1,9	1,0	2,7	7	4,6	0,9	8,7	7	1,7	1	3
MS-Djursland/Himmerland	9	3,7	1,5	5,2	9	4,7	0,1	9,8	9	3,2	1	4
MS-Vendsyssel	3	1,7	0,5	3,7	3	1,4	0	2,4	3	4,0	4	4

**Tabel 4.2.** Indhold af fint grus (2-6,3 mm), grus, sten og blokke (> 6,3mm) samt jordtype (JB type) bestemt efter Den danske Jordklassificering for prøver (n) udtaget i A-horisonter. For hver parameter er anført middelværdi, minimums-- (min) og maximums- (max) værdi.

**Tabel 4.3.** Indhold af organisk stof, pH målt i vand (pH-H2O), pH målt i calciumchlorid (pH-CaCl2), kalk, jern extraheret med oxalat (Fe-oxalat), aluminium ekstraheret med oxalat (Al-oxalat), jern ekstraheret med dithionit-citrat-bicarbonat (Fe-DCB) og aluminium ekstraheret med dithionit-citrat-bicarbonat for prøver (n) udtaget i A-horisonter. For hver parameter er anført middelværdi, minimums- (min) og maximums- (max) værdi.

Landskabselement		Orga	nisk C			pН	-H2O			pН	-CaCl2			kalk	indhold	
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-vær-	min	max
		værdi				værdi				værdi				di		
			(% C)											(*	% CaCO3)	
Yoldia	7	1,66	0,96	2,93	7	6,27	5,44	7,05	7	5,53	4,74	6,44	7	0	0	0
alluvial-kegle	7	2,24	1,18	3,86	7	5,81	5,49	6,44	7	5,37	4,24	6,33	7	0	0	0
distal	7	1,89	1,01	3,20	4	6,36	5,26	6,96	7	4,95	4,14	5,59	7	0	0	0
hedeslette																
proximal hedeslette	7	2,01	1,30	3,99	7	5,98	5,52	6,21	7	5,09	4,66	5,58	7	0	0	0
bakkeø-DS	3	1,80	1,6	2,0	3	6,49	6,37	6,70	3	5,94	5,65	6,18	3	0	0	0
bakkeø-MS	7	2,05	1,3	2,88	7	6,26	5,93	6,56	7	5,73	5,37	6,51	7	0	0	0
MS-Djursland/Himmerland	9	1,53	0,3	4,6	9	5,97	5,60	6,65	9	5,48	4,79	5,92	9	0	0	0
MS-Vendsyssel	3	1,60	1,1	1,84	3	6,45	5,90	6,74	3	5,79	5,37	6,02	3	0	0	0
	1				1								i			
Landskabselement		Fe-o	oxalat	1		Al-	oxalat	r		Fe	e-DCB			Al	-DCB	
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-vær-	min	max
		værdi				værdi				værdi				di		
		(1	ng Fe/kg)	1		(	mg Al/kg)	r			(mg Fe/kg)			(	mg Al/kg)	
Yoldia	7	1619	1159	2292	7	1327	1030	1678	7	2947	1627	8119	7	1522	952	3454
alluvial-kegle	7	2357	289	4291	7	1276	523	2524	7	3280	546	5708	7	1374	682	2670
distal	7	1670	857	3307	7	1035	571	2094	7	2492	1236	5658	7	1084	616	2236
hedeslette																
proximal hedeslette	7	1693	254	2739	7	1041	704	1337	7	2353	337	3972	7	1048	687	1405
bakkeø-DS	3	2571	817	3829	3	1662	414	3078	3	3972	1534	5653	3	1826	424	3436
bakkeø-MS	7	3798	2686	4522	7	1169	654	1860	7	3505	1912	4617	7	1246	618	1740
MS-Djursland/Himmerland	9	2654	1861	3793	9	1355	1011	1732	9	2729	1916	3495	9	1266	896	1364
MS-Vendsyssel	3	2861	1947	4377	3	1647	1108	2034	3	3760	3582	3945	3	1568	1021	1922

**Tabel 4.4.** Ombyttelige baser, calcium (ombyttelig Ca), magnesium (ombyttelig Mg), kalium (ombyttelig K), natrium (ombyttelig Na) samt ombyttelige sure ioner (ombyttelig H), kationombytningskapacitet (CEC) og basemætningsgraden (basemætning) prøver (n) udtaget i A-horisonter. For hver parameter er anført middelværdi, minimums- (min) og maximums- (max) værdi.

Landskabselement		Ombyt	telig Ca			Omby	ttelig Mg			Omb	yttelig K			Omby	ttelig Na	
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-vær-	min	max
		værdi				værdi				værdi				di		
		(0	cmol/kg)			-	(cmol/kg)				(cmol/kg)			(	(cmol/kg)	
Yoldia	7	4,87	3,02	9,20	7	0,26	0,10	0,36	7	0,19	0,10	0,27	7	0,02	0	0,03
alluvial-kegle	7	5,73	3,02	9,31	7	0,22	0,05	0,55	7	0,27	0,10	0,36	7	0,05	0,02	0,05
distal	7	4,35	1,38	7,14	7	0,44	0,22	1,44	7	0,14	0,03	0,28	7	0,16	0,01	0,32
hedeslette																
proximal hedeslette	7	5,34	3,18	9,22	7	0,34	0,20	0,51	7	0,15	0,08	0,23	7	0,15	0,01	0,28
bakkeø-DS	3	7,70	6,00	10,18	3	0,39	0,27	0,61	3	0,15	0,12	0,17	3	0,03	0,02	0,05
bakkeø-MS	7	6,82	4,70	9,25	7	0,49	0,19	0,81	7	0,16	0,10	0,22	7	0,05	0	0,07
MS-Djursland/Himmerland	9	4,01	0,70	5,50	9	0,19	0,0	0,3	9	0,19	0,10	0,3	9	0,04	0	0,1
MS-Vendsyssel	3	6,36	5,60	6,87	3	0,39	0,02	0,7	3	0,34	0,23	0,4	3	0,07	0,02	0,1

Landskabselement		Ombyt	telig H+			0	CEC			Base	mætning	
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max
		værdi				værdi				værdi		
		(	cmol/kg)				(cmol/kg)				(%)	
Yoldia	7	5,79	4,40	8,05	7	11,20	7,87	14,70	7	47	31	67
alluvial-kegle	7	8,91	4,77	16,92	7	15,18	8,22	27,11	7	41	26	48
distal	7	5,54	2,63	6,94	7	10,62	6,68	14,52	7	48	33	61
hedeslette												
proximal hedeslette	7	6,84	5,57	8012	7	12,82	10,08	18,03	7	46	34	56
bakkeø-DS	3	5,52	3,70	7,08	3	13,79	10,17	18,01	3	60	56	64
bakkeø-MS	7	7,21	3,75	10,54	7	14,73	9,15	20,75	7	51	44	56
MS-Djursland/Himmerland	9	5,76	4,20	8,8	9	10,15	5,3	13,20	9	42	16	51
MS-Vendsyssel	3	6,89	3,80	9,9	3	14,33	12,5	16,10	3	51	39	61

**Tabel 4.5.** Indhold af ler (< 2  $\mu$ m), finsilt (2-20  $\mu$ m), grovsilt (20-63  $\mu$ m), fint sand (63-125  $\mu$ m), fint mellem sand (125-200  $\mu$ m), groft mellem sand (200-500  $\mu$ m) og groft sand (500-2000  $\mu$ m) beregnet som % af fraktionen mindre end 2 mm i prøver (n) udtaget i B-horisonter. For hver parameter er anført middelværdi, minimums- (min) og maximums- (max) værdi.

Landskabselement		ler (<	2 µm)			finsilt (	2-20 µm)			grovsilt	(20-63 µm)	)		fint sand	(63-125 μm	ı)
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-vær-	min	max
		værdi				værdi				værdi				di		
		(% af <	2mm frak	tion)		(% af <	< 2mm frakt	ion)		(% af	< 2mm frak	tion)		(% af -	< 2mm frakt	tion)
Yoldia	6	3,5	1,5	4,1	6	1,5	0,9	1,9	6	8,3	1,5	17,6	6	33,5	15,0	41,2
alluvial-kegle	9	3,5	1,5	6,7	9	2,1	0,9	7,3	9	5,0	1,0	30,5	9	3,5	0,7	18,5
distal	8	2,8	2,0	3,6	8	1,4	0,9	3,5	8	1,2	1,0	2,5	8	1,7	0,7	3,2
hedeslette																
proximal hedeslette	9	3,0	2,0	4,1	9	1,3	0,9	2,4	9	1,0	1,0	1,4	9	1,2	0,2	2,7
bakkeø-DS	3	5,1	4,1	6,6	3	3,7	1,9	3,4	3	8,8	5,7	10,8	3	12,1	9,5	14,3
bakkeø-MS	7	7,5	3,0	11,9	7	5,8	0,9	9,1	7	6,8	1,5	10,5	7	14,4	5,6	20,3
MS-Djursland/Himmerland	6	5,4	4,6	8,3	6	5,6	2,9	7,2	6	12,6	4,7	22,1	6	15,7	12,6	21,2
MS-Vendsyssel	4	13,5	6,9	21,7	4	9,8	6,2	11,3	4	15,3	8,1	25,2	4	23,0	13,6	25,6

Landskabselement	1	fint mellem san	d (125-20	0 µm)		groft mellem	nt (200-500	μm)		groft sand	(500-2000	um)
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max
		værdi				værdi				værdi		
		(% af <	2mm frak	tion)		(% af <	< 2mm frakt	tion)		(% af	< 2mm frak	tion)
Yoldia	6	30,6	22,0	43,9	6	12,8	4,1	25,0	6	1,1	0,2	0,9
alluvial-kegle	9	4,1	1,0	11,4	9	38,2	20,9	68,4	9	31,1	7,5	53,4
distal	8	6,1	1,0	11,7	8	66,1	49,8	76,1	8	19,8	1,4	37,3
hedeslette												
proximal hedeslette	9	4,5	0,4	10,7	9	45,2	32,4	57,6	9	43,2	20,2	60,9
bakkeø-DS	3	7,5	3,3	12,7	3	54,9	14,7	67,0	3	8,1	2,4	13,8
bakkeø-MS	7	18,1	13,0	28,1	7	37,7	26,4	69,7	7	8,7	3,6	11,1
MS-Djursland/Himmerland	6	15,6	12,3	18,0	6	33,1	24,0	41,5	6	11,3	7,4	14,3
MS-Vendsyssel	4	16,2	11,9	21,6	4	16,2	9,5	31,0	4	5,4	1,9	15,6

Landskabselement	1	fint grus (	(2-6,3 mm)	)		grus, sten, bl	okke (> 6,3	mm)		JI	B type	
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max
		værdi				værdi				værdi		
		(% a	f totalprøv	e)		(% :	af totalprøve	e)				
Yoldia	6	0,2	0	1,1	6	0,3	0	1,9	6	2,7	1	4
alluvial-kegle	9	15,5	3	34,6	9	9,9	3,6	20,6	9	1,3	1	4
distal	8	1,0	0	1,1	8	1,0	0	5,9	8	1,0	1	1
hedeslette												
proximal hedeslette	9	6,5	0,8	11,3	9	4,0	0	10,7	9	1,2	1	3
bakkeø-DS	3	6,5	0,1	17,1	3	8,4	0,1	13,8	3	1,7	1	3
bakkeø-MS	7	3,1	0,4	5,1	7	3,4	0,1	11,4	7	3,6	1	5
MS-Djursland/Himmerland	6	5,6	3,6	9,2	6	6,9	3,0	13,1	6	3,0	1	4
MS-Vendsyssel	4	3,5	0,4	11,7	4	4,2	3,1	6,1	4	5,3	3	7

**Tabel 4.6.** Indhold af fint grus (2-6,3 mm), grus, sten og blokke (> 6,3mm) samt jordtype (JB type) bestemt efter Den danske Jordklassificering for prøver (n) udtaget i B-horisonter. For hver parameter er anført middelværdi, minimums- (min) og maximums- (max) værdi.

**Tabel 4.7.** Indhold af organisk stof, pH målt i vand (pH-H2O), pH målt i calciumchlorid (pH-CaCl2), kalk, jern extraheret med oxalat (Fe-oxalat), aluminium ekstraheret med oxalat (Al-oxalat), jern ekstraheret med dithionit-citrat-bicarbonat (Fe-DCB) og aluminium ekstraheret med dithionit-citrat-bicarbonat for prøver (n) udtaget i B-horisonter. For hver parameter er anført middelværdi, minimums- (min) og maximums- (max) værdi.

Landskabselement		Orga	nisk C			pН	-H2O			pН	-CaCl2			kalk	indhold	
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-vær-	min	max
		værdi				værdi				værdi				di		
			(% C)											()	% CaCO3)	
Yoldia	6	0,29	0,13	0,66	6	6,59	6,39	7,05	6	5,57	5,18	6,02	6	0	0	0
alluvial-kegle	9	0,37	0,17	0,77	9	6,06	5,28	6,49	8	5,44	4,82	6,03	9	0	0	0
distal	8	0,56	0,15	0,99	5	6,06	5,55	6,61	7	5,02	5,46	5,81	7	0	0	0
hedeslette																
proximal hedeslette	9	0,39	0,1	0,99	9	5,83	5,23	6,49	9	4,77	4,18	5,31	9	0	0	0
bakkeø-DS	3	0,40	0,3	0,6	3	6,22	5,88	6,60	3	5,38	5,10	5,71	3	0	0	0
bakkeø-MS	7	0,51	0,23	1,07	7	6,09	5,85	6,37	7	5,20	4,54	5,63	7	0	0	0
MS-Djursland/Himmerland	6	0,50	0,2	0,8	6	6,01	5,60	6,65	6	5,18	4,73	5,70	6	0	0	0
MS-Vendsyssel	4	0,39	0,1	0,9	4	6,30	6,00	6,80	4	5,38	5,14	5,85	4	0	0	0

Landskabselement		Fe-o	xalat			Al-	oxalat			Fe	-DCB			Al	-DCB	
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-vær-	min	max
		værdi				værdi				værdi				di		
		(n	ng Fe/kg)			(	mg Al/kg)				(mg Fe/kg)	_		(	mg Al/kg)	
Yoldia	6	1171	218	2197	6	1622	1034	2633	6	2603	483	8268	6	2167	944	7126
alluvial-kegle	8	1235	582	2194	8	1835	623	3601	8	3928	1515	4200	9	1804	404	3206
distal	7	850	378	1613	7	1731	1040	3240	7	1523	655	2914	7	1608	856	2094
hedeslette																
proximal hedeslette	9	783	84	1840	9	1216	657	1895	9	1617	364	4947	9	1705	633	5998
bakkeø-DS	3	1412	910	1845	3	1785	1323	2190	3	3305	2142	5436	3	1744	1335	2082
bakkeø-MS	7	3899	1288	8013	7	2328	1012	4954	7	4470	1750	11218	7	2375	1302	5408
MS-Djursland/Himmerland	6	1740	562	3624	6	1669	538	2660	6	2037	1322	2565	6	1435	491	2127
MS-Vendsyssel	4	2682	1607	5039	4	1642	657	2908	4	2845	2561	4393	4	1426	664	2565

**Tabel 4.8.** Ombyttelige baser, calcium (ombyttelig Ca), magnesium (ombyttelig Mg), kalium (ombyttelig K), natrium (ombyttelig Na) samt ombyttelige sure ioner (ombyttelig H), kationombytningskapacitet (CEC) og basemætningsgraden (basemætning) prøver (n) udtaget i B-horisonter. For hver parameter er anført middelværdi, minimums- (min) og maximums- (max) værdi.

Landskabselement	Ombyttelig Ca					Omby	ttelig Mg		Ombyttelig K					Ombyttelig Na			
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-vær-	min	max	
		værdi				værdi				værdi				di			
		(cmol/kg)				(	(cmol/kg)		(cmol/kg)					(cmol/kg)			
yoldia	6	1,29	0,3	1,68	6	0,07	0	0,2	6	0,08	0	0,16	6	0,01	0	0,02	
alluvial-kegle	9	0,89	0,1	2,18	9	0,05	0,01	0,09	9	0,08	0,01	0,27	4	0,06	0,01	0,17	
distal	8	1,11	0,1	1,89	8	0,10	0,06	0,19	8	0,04	0,01	0,10	8	0,09	0	0,24	
hedeslette																	
proximal hedeslette	9	0,87	0,22	1,74	9	0,08	0,02	0,24	9	0,04	0,02	0,07	8	0,19	0,02	0,39	
bakkeø-DS	3	1,62	1,18	2,39	3	0,11	0,08	0,16	3	0,09	0,05	0,13	3	0,01	0	0,02	
bakkeø-MS	7	0,47	0,47	4,28	7	0,18	0,05	049	7	0,14	0,06	0,22	7	0,02	0	0,04	
MS-Djursland/Himmerland	6	1,30	0,6	1,7	6	0,10	0	0,2	6	0,12	0,1	0,2	6	0,02	0	0,1	
MS-Vendsyssel	4	3,46	1,9	6,5	4	0,35	0,1	0,8	4	0,18	0,09	0,2	4	0,18	0,01	0,5	

Landskabselement		Omby	ttelig H		CEC					Basemætning				
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max		
		værdi				værdi				værdi				
		(cmol/kg)					(cmol/kg)			(%)				
Yoldia	6	3,78	2,2	7,66	6	5,29	3,2	10,47	6	28	13	40		
alluvial-kegle	9	4,55	1,5	9,37	9	5,61	1,6	10,42	9	18	6	29		
distal	8	4,08	0,52	9,39	8	5,79	2,02	11,65	8	23	6	27		
hedeslette														
proximal hedeslette	9	4,69	2,03	12,09	9	5,86	2,4	13,65	9	22	10	38		
bakkeø-DS	3	4,66	4,16	5,08	3	6,49	5,64	7,34	3	28	22	35		
bakkeø-MS	7	6,87	3,27	9,58	7	9,47	4,23	17,25	6	28	12	44		
MS-Djursland/Himmerland	6	4,50	2,4	7,7	6	6,00	3,74	9,41	6	28	12	43		
MS-Vendsyssel	4	5,11	3,2	8,74	4	9,24	7,1	11,20	4	44	20	71		

**Tabel 4.9.** Indhold af ler (< 2  $\mu$ m), finsilt (2-20  $\mu$ m), grovsilt (20-63  $\mu$ m), fint sand (63-125  $\mu$ m), fint mellem sand (125-200  $\mu$ m), groft mellem sand (200-500  $\mu$ m) og groft sand (500-2000  $\mu$ m) beregnet som % af fraktionen mindre end 2 mm i prøver (n) udtaget i C-horisonter. For hver parameter er anført middelværdi, minimums- (min) og maximums- (max) værdi.

Landskabselement	ler (< 2 μm)					finsilt (	2-20 µm)		grovsilt (20-63 μm)					fint sand (63-125 µm)			
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-vær-	min	max	
		værdi				værdi				værdi				di			
		(% af < 2mm fraktion)				(% af < 2mm fraktion)				(% af	< 2mm frak	tion)		(% af < 2mm fraktion)			
Yoldia	10	5,5	1,0	20,6	10	3,9	0,9	14,4	10	12,8	1,0	38,3	10	40,3	16,0	63,5	
alluvial-kegle	19	2,1	1,0	6,1	19	1,3	0,9	4,3	19	2,1	1,0	12,0	19	4,0	0,8	34,2	
distal	13	1,6	1,0	2,6	13	0,9	0,9	1,0	13	1,4	1,0	3,2	13	2,0	0,2	3,4	
hedeslette																	
proximal hedeslette	12	1,8	1,0	4,1	12	1,0	0,9	1,4	12	1,5	1,0	2,6	12	1,1	0,1	1,8	
bakkeø-DS	7	2,9	1,0	7,2	7	2,4	0,9	6,8	7	6,5	1,3	17,5	7	11,1	1,3	30,9	
bakkeø-MS	21	8,2	1,0	17,8	21	4,5	0,9	8,6	21	6,8	1,2	13,4	21	12,2	1,7	31,5	
MS-Djursland/Himmerland	20	5,6	2,5	8,7	20	4,2	0,9	10,3	20	10,1	1,4	43,9	20	15,4	2,2	40,7	
MS-Vendsyssel	7	13,3	3,1	19,6	7	11,4	1,4	18,1	7	15,4	2,5	29,7	7	25,1	21,2	31,3	

Landskabselement	t	fint mellem san	d (125-20	0 µm)		groft mellen	nt (200-500	μm)	groft sand (500-2000 μm)				
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	
		værdi				værdi				værdi			
		(% af < 2mm fraktion)				(% af < 2mm fraktion)				(% af < 2mm fraktion)			
Yoldia	10	31,4	1,5	70,5	10	5,3	1,0	14,4	10	0,5	0,1	2,2	
alluvial-kegle	19	8,2	0,6	24,4	19	45,6	17,1	68,5	19	32,7	5,2	64,2	
distal	13	7,4	1,7	16,7	13	66,5	45,8	76,5	13	20,1	1,5	43,8	
hedeslette													
proximal hedeslette	12	3,8	0,9	8,9	12	55,7	33,2	81,3	12	34,9	11,7	54,0	
bakkeø-DS	7	7,3	2,1	12,3	7	55,7	17,7	76,9	7	13,8	2,3	37,0	
bakkeø-MS	21	13,9	4,9	25,4	21	42,9	28,2	82,5	21	11,3	2,0	43,8	
MS-Djursland/Himmerland	20	16,9	5,0	38,0	20	33,6	3,4	58,1	20	12,6	0,3	38,6	
MS-Vendsyssel	7	18,5	9,4	34,6	7	12,8	3,0	20,7	7	3,5	0,4	12,1	
Landskabselement	1	fint grus (	(2-6,3 mm)	)		grus, sten, bl	okke (> 6,3	mm)		JB type			
-------------------------	----	-------------	-------------------	------	----	-------------------	-------------	------	----	---------	-----	-----	--
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	
		værdi				værdi				værdi			
		(% a	(% af totalprøve)			(% af totalprøve)							
Yoldia	10	0,1	0	0,2	10	0,0	0	0,2	10	3	2	7	
alluvial-kegle	19	9,2	0,1	20,5	19	5,6	0	25,2	19	1	1	3	
distal	13	1,5	0	4,7	13	1,3	0	9,0	13	1	1	1	
hedeslette													
proximal hedeslette	12	4,1	0	11,8	12	1,8	0	6,5	12	1	1	1	
bakkeø-DS	7	1,2	0	6,3	7	1,5	0	7,9	7	1	1	3	
bakkeø-MS	21	3,3	0,2	7,2	21	2,0	0	7,7	21	4	1	7	
MS-Djursland/Himmerland	20	5,8	0	19,0	20	6,8	0	21,2	20	3	1	4	
MS-Vendsyssel	7	2,0	0,3	10,2	7	0,7	0	3,9	7	6	2	7	

Yoldia

**Tabel 4.10.** Indhold af fint grus (2-6,3 mm), grus, sten og blokke (> 6,3mm) samt jordtype (JB type) bestemt efter Den danske Jordklassificering for prøver (n) udtaget i C-horisonter. For hver parameter er anført middelværdi, minimums- (min) og maximums- (max) værdi.

**Tabel 4.11.** Indhold af organisk stof, pH målt i vand (pH-H2O), pH målt i calciumchlorid (pH-CaCl2), kalk, jern extraheret med oxalat (Fe-oxalat), aluminium ekstraheret med oxalat (Al-oxalat), jern ekstraheret med dithionit-citrat-bicarbonat (Fe-DCB) og aluminium ekstraheret med dithionit-citrat-bicarbonat for prøver (n) udtaget i C-horisonter. For hver parameter er anført middelværdi, minimums- (min) og maximums- (max) værdi.

Landskabselement		Orga	nisk C			pH	-H2O			pH	-CaCl2		Kalkindhold			
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-vær-	min	max
		værdi				værdi				værdi				di		
			(% C)											(*	% CaCO3)	
Yoldia	10	0,14	0,02	0,40	10	6,18	5,50	6,78	10	5,17	4,63	5,93	10	0	0	0
alluvial-kegle	19	0,05	0	0,41	18	5,67	4,95	6,41	19	4,68	3,91	5,62	19	0	0	0
distal	13	0,09	0	0,19	6	5,57	5,05	6,29	14	4,80	4,31	5,82	14	0	0	0
hedeslette																
proximal hedeslette	12	0,07	0,06	0,20	12	5,88	5,37	6,30	13	4,91	4,62	5,43	13	0	0	0
bakkeø-DS	7	0,02	0	0,5	9	5,96	5,30	6,36	9	4,77	4,19	5,23	9	0	0	0
bakkeø-MS	21	0,09	0,01	0,40	21	5,33	4,80	5,80	20	4,34	3,76	6,32	20	0	0	0
MS-Djursland/Himmerland	20	0,3	0	1,2	20	7,41	5,50	9,55	20	5,91	4,51	7,80	20	1,5	0	9,8
MS-Vendsyssel	7	0,06	0	0,13	7	5,91	5,44	6,80	7	4,78	4,52	5,52	7	0	0	0
				•			•									-
Landskabselement		Fe-oxalat			Al-oxalat			Fe-DCB				Al-DCB				
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-vær-	min	max
		værdi				værdi				værdi				di		
		(mg Fe/kg)			(mg Al/kg)			(mg Fe/kg)			(mg Al/kg)					

alluvial-kegle	19	1089	221	5127	19	534	85	1959	19	2287	855	8593	19	491	80	2530
distal	14	675	226	1446	14	708	410	1287	14	1393	481	3264	14	609	296	1328
hedeslette																
proximal hedeslette	13	894	257	1943	13	696	341	1673	13	1603	556	4132	13	621	194	1604
bakkeø-DS	9	539	65	1269	9	668	180	1311	9	1128	272	5442	9	698	290	1431
bakkeø-MS	20	1469	73	4009	20	620	66	1138	20	3044	269	9423	20	610	92	1312
MS-Djursland/Himmerland	20	726	52	1310	20	446	13	1610	20	1436	128	2932	20	371	26	1369
MS-Vendsyssel	7	1435	301	2777	7	533	88	1166	7	3667	1300	5466	7	537	83	1073

**Tabel 4.12.** Ombyttelige baser, calcium (ombyttelig Ca), magnesium (ombyttelig Mg), kalium (ombyttelig K), natrium (ombyttelig Na) samt ombyttelige sure ioner (ombyttelig H), kationombytningskapacitet (CEC) og basemætningsgraden (basemætning) prøver (n) udtaget i C-horisonter. For hver parameter er anført middelværdi, minimums- (min) og maximums- (max) værdi.

Landskabselement		Ombyttelig Ca			Ombyttelig Mg				Ombyttelig K				Ombyttelig Na			
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-vær-	min	max
		værdi				værdi				værdi				di		
		(0	cmol/kg)			(	(cmol/kg)				(cmol/kg)			(	(cmol/kg)	
Yoldia	10	1,16	0,3	4,55	10	1,26	0	0,55	10	0,09	0	0,34	10	0,05	0	0,30
alluvial-kegle	18	0,23	0	1,71	18	0,03	0	0,19	18	0,03	0,01	0,07	15	0,02	0	0,12
distal	13	0,41	0	2,54	13	0,03	0,01	0,11	13	0,03	0,01	0,07	13	0,06	0	0,32
hedeslette																
proximal hedeslette	12	0,25	0,01	0,24	12	0,04	0	0,11	12	0,03	0,01	0,06	12	0,09	0	0,34
bakkeø-DS	9	0,22	0,07	0,50	9	0,02	0,01	0,05	9	0,04	0,01	0,07	9	0,01	0	0,04
bakkeø-MS	21	1,27	0	2,01	21	0,42	0,01	3,02	21	0,11	0	0,36	21	0,02	0	0,18
MS-Djursland/Himmerland	13	2,3	0,4	11,4	13	0,3	0	1,6	13	0,1	0,1	0,2	20	1,1	0	6,6
MS-Vendsyssel	7	2,1	1,0	3,5	7	1,04	0,15	1,60	7	0,1	0	0,2	7	0,1	0,01	0,10

Landskabselement		Omby	ttelig H			(	CEC			Basemætning			
	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	n	middel-	min	max	
		værdi				værdi				værdi			
		(0	cmol/kg)				(cmol/kg)				(%)		
Yoldia	10	2,87	1,30	5,39	10	4,41	2,10	10,47	10	31	9	53	
alluvial-kegle	18	1,61	0,56	5,74	14	1,63	0,58	6,61	14	15	3	35	
distal	13	1,73	0,98	3,15	12	2,13	1,08	3,87	12	15	2	45	
hedeslette													
proximal hedeslette	12	1,56	0,19	2,68	12	2,04	1,04	3,82	12	19	3	39	
bakkeø-DS	9	2,02	0,94	4,38	9	2,32	1,06	4,76	9	15	4	33	
bakkeø-MS	21	3,37	0,61	6,91	21	5,20	0,74	12,57	21	25	4	82	
MS-Djursland/Himmerland	13	2,0	0,4	4,4	13	4,71	2,8	12,22	13	54	17	97	
MS-Vendsyssel	7	3,2	0,8	4,91	7	6,53	2,2	9,9	7	53	30	72	

Bilag side 88

# Bilag 5. Hydrauliske parametre - Repræsentativitet -

DJF: Ole Hørbye Jacobsen, Bo Vangsø Iversen, Christen Børgesen

#### Hydraulisk ledningsevne

I databaser findes der kun meget begrænsede data vedrørende hydrauliske parametre. Derfor kan man ikke ud fra målingerne i projektet udtale sig direkte om repræsentativiteten. De hydrauliske parametre i Ap-horisonten er i høj grad styret af jordens indhold af organisk stof. I de underliggende horisonter er det i højere grad partikelstørrelsesfordelingen, der er bestemmende. En analyse af repræsentativiteten af tekstur og humusindhold giver derfor et godt fingerpeg om repræsentativiteten af de hydrauliske parametre.

Figur 5.1 viser vandretentionsmålinger for de forskellige landskabselementer målt i Ap-, B- og C-horisonten. Sammenligner man de tre horisonter er der en tydelig tendens til, at jo dybere man kommer ned i profilen desto mere afviger de tre landskabselementer relaterende til Wei-



#### chsel morænesand sig

**Figur 5.1**. Vandretentionsmålinger for de forskellige landskabselementer. De enkelte punkter er middelværdier for samtlige målinger i Ap-, B- og C-horisonterne fra hver af de tre lokaliteter, der knytter sig til hvert landskabselement. A er muldhorisonten, Ap er den del af muldhorisonten som udgør pløjelaget, B er udfældningshorisonten under muldlage. Under B ligger den relativt upåvirkede C horisont.

fra landskabselementerne relaterende til smeltevandssand. Det samme gør sig til dels gældende for målingerne fra Yoldiafladen. I Ap-horisonten er det høje indhold af organisk stof med til at udviske effekten af forskellene i teksturfordelingen mellem de forskellige landskabselementer. I C-horisonten træder teksturfordelingen mellem landskabselementerne tydeligt frem. De dårligt sorterede morænesandjorde har en jævn afdræning svarende til en ligelig porestørrelsesfordeling i jorden. De tre landskabselementer på hedesletten (Alluvial, Proximal og Distal) samt smeltevandssand på bakkeø har en kraftig afdræning til omkring pF 1,7, hvilket svarer til et højt indhold af grovporer (>60 µm) i jorden. Den finsandede, velsorterede Yoldiajord afdrænes markant mellem pF 1,7 og pF 2,2 svarende til en meget ligelig porestørrelsesfordeling i området mellem 20 og 60 µm (ækvivalent porediameter). I B-horisonten (udfældningshorisonten) er tendensen til en adskillelse mellem smeltevandssand, morænesand og Yoldiafladen knap så udtalt som i C-horisonten, hvilket sandsynligvis forklares ved et moderat indhold af organisk stof i disse horisonter.



**Figur 5.2.** Vandretentionsmålinger for forskellige landskabselementer i relation til kvadratnetsprofilerne. De enkelte punkter er middelværdier for målinger i Ap-, B- og C-horisonterne. "Hedeslette" indeholder landskabselementerne Proximal, Distal og Alluvialkegle.

For vandretentionsmålinger fra kvadratnetsprofil punkterne (figur 5.2) er forskellen mellem de forskellige horisonter knap så markant. Der ses dog en svag tendens til at målinger for Yoldiafladen samt Weichsel morænesand afviger mere fra hedesletten jo dybere man kommer ned i profilet.

Figur 5.3 viser værdierne for den mættede hydrauliske ledningsevne ( $K_s$ ) for de forskellige landskabselementer målt i Ap-, B- og C-horisonten på projektets lokaliteter. Billedet svarer meget til vandretentionsmålingerne med en mere markant forskel mellem landskabselementerne hørende til morænesand og landskabselementerne hørende til smeltevandssand jo dybere, man komme ned i profilet. I C-horisonten skiller Weichsel MS og Bakkeø MS sig tydeligt ud fra Alluvialkegle samt Proximal og Distal hedeslette. Samtidig er der en tendens til at variabiliteten mellem målingerne på morænesandslokaliteterne stiger med dybden, hvorimod variabiliteten mellem de tilsvarende målinger på hedesletten falder.



**Figur 5.3.** Mættet hydraulisk ledningsevne ( $K_s$ ) for de forskellige landskabselementer målt på store kolonner (6280 cm<sup>3</sup>). Punkterne er middelværdier for samtlige målinger i Ap-, B- og C-horisonterne fra de tre lokaliteter, der knytter sig til hvert landskabselement. Fejllinierne er  $\pm 1$  standard afvigelse.

De målte retentionskurver, samt mættet og umættet hydraulisk ledningsevne er optimeret i et neuralt netværk for at finde sammenhængen mellem de simple jordegenskaber og målte hydrauliske data.

Der er optimeret for forskellige kombinationer af jordegenskaber for at finde de der er mest betydningsfulde (mindste Root Mean Square Error). Den bedste forklaring med færrest mulige parametre blev opnået ved at benytte retentionskurve, kornstørrelsesfordeling, volumenvægt, organisk kulstofindhold, dybde og landskabselement. I det følgende forklares disse inputparametre til det neurale netværk.

De hydrauliske forhold i jorden er i projektet beskrevet ved de hydrauliske funktioner foreslået af Jarvis, (1991) baseret på Brooks and Corey, (1964) og Mualem, (1976). Funktionsudtrykkene beskriver et dobbeltdomæne. Retentionskurven beskrives ved

$$S_{e} = \begin{cases} \left(\frac{\theta - \theta_{r}}{\theta_{b} - \theta_{r}}\right) = \left(\frac{h}{h_{b}}\right)^{\lambda} & h \le h_{b} \\\\ \left(\frac{\theta - \theta_{b}}{\theta_{s} - \theta_{b}}\right) = \left(1 - \frac{h}{h_{b}}\right) & h > h_{b} \end{cases}$$

hvor  $S_e$  er effektiv mætning,  $\theta$  er volumetrisk vandindhold , h er trykpotentialet og  $\lambda$  er en porestørrelsesfordelingsfaktor. Subskripterne r, s og b står for residual, mættet og grænsen mellem de to domæner. Hydraulisk ledningsevne beskrives ved

$$k(S_{e}) = \begin{cases} k_{b}(S_{e})^{n} & h \leq h_{b} \\ \\ k_{b} + (k_{s} - k_{b})(S_{e})^{n^{*}} & h > h_{b} \end{cases}$$

hvor *k* er den umættede hydrauliske ledningsevne [cm day<sup>-1</sup>],  $n = 2 + 2\frac{1}{2}$  og  $n^*$  er en empirisk parameter (sat til 5 som foreslået af Jarvis, (1991)).

I figur 5.4 vises hvor godt parametrene blev optimeret. Resultatet ser tilfredsstillende ud for de fleste parametre. Residual vandindhold er ikke særligt godt bestemt, men da pesticidudvaskning kun foregår, når jorden er fugtig er det heller ikke den vigtigste. For nogen af parametrene er der ret stor usikkerhed på målingerne og således vil variationsintervallet på outputtet fra det neurale netværk være mindre end de fittede målte data. Desuden er parametrene indbyrdes korreleret således at når den ene parameter er lav er en korreleret parameter måske lidt højere og kompenserer for det. Det ses da også af figur 5.5 at vi for langt de fleste målte horisonter har en meget lav Root Mean Square Error.



**Figur 5.4.** Hydrauliske modelparametre. Figuren viser sammenhængen mellem parametrene "fittede" til målte data fra KUPA-profilerne og de tilsvarende parametre modelleret ved neurale netværk. A: porestørrelsefordelingskoefficient ( $\lambda$ ); B: reciprokke grænsetension mellem mikroog makroporer (1/ $h_b$ ); C: porøsitet ( $\theta_s$ ); D: vandindhold ved tension  $h_b$  ( $\theta_b$ ); E: residualt vandindhold ( $\theta_r$ ); F: mættet hydraulisk ledningsevne ( $k_s$ ); G: hydraulisk ledningsevne ved tension  $h_b$ ( $k_b$ ).



*Figur 5.5.* Root Mean Square Error mellem de målte retentionsdatapunkter og de som er prædikterede med "neuralt netværk" plottede i stigende rækkefølge.

#### Referencer

Brooks, R. H. and Corey, A. T., 1964: Hydraulic properties of porous media. Hydraulic Paper #3, Colorado State University, Ft. Collins, Co.,

Jarvis, N., 1991: MACRO - A Model of Water Movement and Solute Transport in Macroporous Soils. Swedish University of Agricultural Sciences. Department of Soil Sciences. Reports and Dissertations 9.

Mualem, Y., 1976: A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. Water Resour. Res. 12:513-522

# Bilag 6. Nedbrydning af pesticid GEUS: Jim Rasmussen

Nedbrydning af et pesticid kan ske delvist under dannelse af nedbrydningsprodukter (målt som DT50) eller fuldstændigt under dannelse af kuldioxid, vand og uorganiske næringssalte (målt som MT50). Fuldstændig nedbrydning kaldes for mineralisering og er den eneste proces, hvor pesticidet fjernes fuldstændigt fra miljøet.

Mineralisering af pesticider er en mikrobiologisk proces, hvor mikroorganismerne anvender stoffet som energi- og kulstofkilde til celleopbygning. Mineraliseringshastigheden kan bestemmes ved brug af radioaktivt mærkede pesticider (<sup>14</sup>C), hvor mikroorganismernes produktion af radioaktivt mærket kuldioxid måles. Når mikroorganismerne mineraliserer pesticidet vil en del af kulstofatomerne indgå i celleopbygningen og en del vil blive udskilt som kuldioxid. Andelen af <sup>14</sup>C udskilt som <sup>14</sup>CO<sub>2</sub> vil derfor sjældent blive 100%. MT50 værdien udtrykker tiden der går indtil 50% af det maksimale niveau for udskillelse af kuldioxid er nået. Ofte bliver 50% af det radioaktivt mærkede kulstof udskilt som kuldioxid, hvorfor MT50 værdien i så tilfælde angiver tiden der går indtil 25% af det tilsatte radioaktivt mærkede kulstof er udskilt.

Hvis et pesticid ikke nedbrydes fuldstændigt vil der ikke blive observeret nogen udskillelse af radioaktivt mærket kuldioxid. Alligevel kan pesticidet godt forsvinde fra jordvæsken, idet der kan ske en

binding af pesticidet til jordens faste bestanddele,

fordampning af pesticidet

delvis omdannelse ved mikrobiologiske eller abiotiske processer. Den tid der går indtil halvdelen af et tilført pesticid er forsvundet fra jordvæsken udtrykkes ved DT50 værdien (Dissipation time).

Forskellen mellem de to værdier, DT50 og MT50, ligger i, at der ved bestemmelse af DT50 værdien udelukkende fokuseres på, hvornår pesticidet forsvinder fra jordvæsken. Forsvinder pesticidet fra jordvæsken på grund af nedbrydning kan det altså ske enten både som en fuldstændig nedbrydning (MT50), eller ved dannelse af stabile nedbrydningsprodukter, som eventuelt kan udgøre et forureningsproblem for grundvandet.

Som eksempel på problemstillingen med dannelse af stabile nedbrydningsprodukter kan nævnes pesticidet dichlobenil, som hurtigt nedbrydes til det stabile nedbrydningsprodukt 2,6dichlorbenzamid (BAM). Forsvindingstiden for dichlobenil er således ganske kort (lav DT50 værdi), selvom stoffet i mange jorde slet ikke mineraliseres (høj MT50 værdi).

Bilag side 96

# **Bilag 7: Sammenhænge mellem simple jordegenskaber** GEUS: Jim Rasmussen

Hensigten med dette bilag er at illustrere de vigtigste almindeligt kendte sammenhænge mellem simple jorddata, som kan eftervises med KUPA datasættet. Desuden gives en beskrivelse af volumen vægt og målene for den biologiske aktivitet. Alle de illustrerede jordegenskaber rummer selvstændig information i tilgift til sammenhængen med andre jorddata.

Der er opbygget et stort og sammenhængende datasæt for danske sandjorde. Flere almindeligt kendte sammenhænge mellem jordegenskaber er illustreret med dette datasæt. Disse sammenhænge underbygger datasættets troværdighed og mindsker antallet af kritiske jordegenskaber der i den aktuelle sammenhæng rummer selvstændig information, jævnfør følgende eksempler:

### pН

Det fremgår af litteraturen at pH (målt i 0,01M CaCl<sub>2</sub>) forventes at være lidt lavere end pH målt i en opslemning med vand (H<sub>2</sub>O). Denne sammenhæng bekræftes af projektets resultater (figur 7.1).



**Figur 7.1**.  $pH_{H^{2}O}$  mod  $pH_{CaCl^{2}}$  for 218 prøver i datasættet viser at  $pH_{CaCl^{2}}$  generelt er lavere end for  $pH_{H^{2}O}$ .

Ombytteligt brint repræsenteret gennem pH<sub>CaCl2</sub>



Ombyttelig H<sup>+</sup> (% af CEC)

*Figur 7.2.* Ombytteligt brint (% af CEC) mod pH<sub>CaCl2</sub> for 218 prøver i projektets datasæt.

Jordens kornstørrelsesfordeling og indholdet af organisk kulstof rummer tilsammen indirekte information om jordens kationombytningsegenskaber (CEC) og (hvis yderligere pH tages i betragtning) om andelen af ombytteligt brint. Kationombytningskapaciteten angiver summen af basiske (Ca<sup>2+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, K<sup>+</sup> og Na<sup>+</sup>) og sure (Al<sup>3+</sup> og H<sup>+</sup>) kationer. Fordelingen mellem basiske og sure ioner afhænger af jordens pH, idet faldende pH medfører en faldende basemætning. Jordens CEC-værdi kan derfor beregnes (prædikteres) med det opbyggede datasæt.

Mængden af ombyttelige brintioner (ombyttelig  $H^*$ ) stiger med aftagende pH-værdi, hvor ombyttelige baser i stigende omfang skiftes ud med brintioner (Schroeder, 1978), figur 7.2. I sure jorde med pH-værdier på omkring 3,5 (målt i CaCl<sub>2</sub>) vil ombytteligt brint sammen med ombytteligt aluminium stort set svare til CEC-værdien, mens denne andel aftager til omkring 0 % ved en pH-værdi på omkring 8. På baggrund af jordens pH-værdi vil det således være muligt at anslå andelen af ombyttelig brint.

Udskiftelighed af dithionit ekstraherbart jern og aluminium med oxalat ekstraherbart



Figur 7.3. AI\_DCB mod AI\_oxalat for 351 prøver i projektets datasæt.



Figur 7.4. Fe\_DCB mod Fe\_oxalat for 493 prøver i projektets datasæt.

En ekstraktionsvæske virker ikke nødvendigvis specifikt over for en enkelt forbindelse som ønskes ekstraheret. Med de her valgte ekstraktionsmetoder med oxalat og dithionit-citratbicarbonat-opløsning (DCB) forventes de følgende puljer af aluminium og jern at blive bestemt (jfr. bl.a. Holm et al, 2003):

• Al\_oxalat, som omfatter organisk kompleksbundet aluminium samt dårligt krystalliserede aluminiumoxider og –silikater.

- Al\_DCB, som anses for at omfatte organisk kompleksbundet aluminium, dårligt krystalliserede aluminiumoxider og -silikater samt aluminium bundet ved isomorf substitution i krystallinske jernoxider
- Fe\_oxalat, som omfatter organisk kompleksbundet jern samt dårligt krystalliserede jernoxider og -silikater
- Fe\_DCB, som omfatter ikke krystallinske jernforbindelser og dårligt krystalliserede jernoxider og -silikater

Som det fremgår af figur 7.3 foreligger der for langt de fleste prøver en meget pæn korrelation mellem de fundne indhold af aluminium ekstraheret med henholdsvis oxalat og DCB, og dette tyder på, at de organisk bundne former kommer med ved begge metoder. De få afvigelser, som falder udenfor korrelationen, kan således bl.a. skyldes et indhold af aluminium bundet ved isomorf substitution i jernoxider.

For jern bestemt ved henholdsvis oxalat og DCB ekstraktion foreligger ikke samme fine sammenhæng som for aluminium, figur 7.4, idet der ved oxalatekstraktionen vil ekstraheres organisk bundet jern, hvilket ikke gør sig gældende for puljen bestemt ved DCB. Alt andet lige må det således forventes, at der foreligger en bedre sammenhæng mellem puljer for sedimenter med lave indhold af organisk kulstof end for sedimentprøver med forholdsvis høje indhold af organisk kulstof.

Det opbyggede datasæt viser at jordens indhold af aluminium, ekstraheret med oxalat  $(Al_{oxalat})$  og dithionit  $(Al_{DCB})$  er stærkt korrelerede. De to mål for ekstraherbart aluminium kan dermed erstatte hinanden ved beskrivelse af modelparametrenes afhængighed af jordegenskaber. Der er ikke en lignende simpel sammenhæng i datasættet for de tilsvarende mål for ekstraherbart jern, Fe<sub>DCB</sub> og Fe<sub>oxalat</sub>, som derfor ikke kan erstatte hinanden.

# Kation ombytningskapacitet (CEC)

CEC er et mål for jordens ionbytningsevne og har derigennem betydning for tilbageholdelsen af positivt ladede molekyler i jorden. Det undersøges om CEC kan beskrives ud fra indholdet af organisk kulstof, kornstørrelsesfordelingen, figur 7.5a-b, og indholdet af aluminium, figur 7.6a- b og jern.



**Figur 7.5a**. Målt (Measured Y) CEC mod modelleret (predicted Y) CEC med PLS-model baseret på C-total og de fine tekstur klasser. Varians forklaret: X: 96%; Y: 89%; 2 PLSkomponenter; Outliers: 9/220.



*Figur 7.5b.* Betydende parametre for prædiktion af CEC med PLS-model baseret på C-total og de fine tekstur klasser. Silt klassen dækker finsilt fraktionen.

Almindeligvis antages CEC-værdien primært at være bestemt ved indholdet af organisk kulstof (C-total) og lerindholdet, der begge kan tilbageholde kationer. På sandjorde vil indholdet af organisk kulstof spille en speciel stor rolle i A horisonten (og i B horisonten, hvis der er store mængder organisk kulstof til stede her (bl.a. for Bh eller Bhs horisonter). Indholdet af jern- og

aluminiumoxider anses ligeledes at kunne spille en rolle for CEC-værdien og, som vist i figur 7.6a og 7.6b opnås en forbedret prædiktionsevne for korrelationen, når data om oxalat ekstraherbart aluminium inddrages.



*Figur 3.6a*. Målt (Measured Y) CEC mod modelleret (predicted Y) CEC med PLS-model baseret på ler, C-total og Al<sub>oxalat</sub>. Varians forklaret: X: 68%; Y: 94%; 2 PLS-komponenter; Outliers: 5/217.



*Figur 7.6b*. Betydende parametre for prædiktion af CEC med PLS-model baseret på Ctotal, ler og Al<sub>oxalat</sub>.

Inddragelse af Al<sub>oxalat</sub> betyder at finsilt kan fjernes fra modellen, samtidig med at der bliver færre outliers. Såfremt CEC skal prædikteres, vil det i de tilfælde, hvor der eksisterer oplysninger om indholdet af oxalat ekstraherbart aluminium, være en fordel at anvende den sidste model. CEC kan altså beskrives indirekte ved hjælp af indholdet af organisk kulstof og de fine tekstur klasser.

#### Specifik overflade repræsenteret gennem organisk kulstof og ler indholdet

Ved det specifikke overflade areal forstås en måling af overfladen af de faste partikler i sedimentprøven, dvs. et summeret udtryk for alle grænseflader, som dermed også er et udtryk for bl.a. sedimenternes sorptive (bindings-) egenskaber. I nærværende undersøgelse er det specifikke overfladeareal målt på fraktionen < 2mm.

Det undersøges ved en korrelationsanalyse om den specifikke overflade kan beskrives ud fra indholdet af organisk kulstof, kornstørrelsesfordelingen, samt indholdet af jern og aluminium, figur 7.7a-b.



**Figur 7.7a**. Målt (Measured Y) specifik overflade areal mod modelleret (predicted Y) specifik overlade areal, med PLS-model baseret på ler og C-total. Varians forklaret: X: 51%; Y: 89%; 1 PLS-komponent; Outliers: 6/108.



overflade model..., (Y-var, PC): (Overflade i m2/g,1) BOW = -0.090937 **Figur 7.7b**. Betydende parametre for prædiktion af specifik overflade areal for PLS-model baseret på ler og C-total.

Det er ler der bidrager til overfladen, mens den negative indflydelse af organisk kulstof stammer fra sedimentprøver indsamlet fra muldhorisonten, hvor det organiske stof formodes at danne mikroaggregater med mineralkornene, hvorved det specifikke overfladeareal mindskes.

Ovenstående model kan forbedres under inddragelse af dithionit ekstraherbart jern ( $Fe_{DCB}$ ), figur 7.8a-b.



*Figur 7.8a*. Målt (Measured Y) specifik overflade areal mod modelleret (predicted Y) specifik overlade areal for model baseret på ler, Fe<sub>DCB</sub> og C-total. Varians forklaret: X: 88%; Y: 93%; 2 PLS-komponent; Outliers: 9/108.



*Figur 7.8b.* Betydende parametre for prædiktion af specifik overflade areal for PLS-model baseret på ler, Fe<sub>DCB</sub> og C-total.

Inddragelse af Fe<sub>DCB</sub> viser, at jern samme med ler danner det specifikke overflade areal. Også i dette tilfælde har indholdet af organisk kulstof negativ betydning.

Jordens specifikke overflade er godt beskrevet, når indholdet af organisk kulstof og de fine tekstur klasser er kendt.

## Volumen vægt

Jordens volumen vægt indeholder information om blandt andet porøsiteten, som har betydning for jordens hydrauliske egenskaber. Umiddelbart kan det forventes at volumen vægten i nogen grad vil afhænge af kornstørrelsesfordelingen, idet en jord med en blanding af forskellige kornstørrelser vil kunne pakkes tættere end fx. en jord med stort indhold af de grove kornstørrelser. I første omgang har en regressionsanalyse vist at volumenvægten ikke kan beskrives ud fra indholdet af organisk kulstof og kornstørrelsesfordelingen. I stedet undersøges sammenhængen i data ved en principal component analyse (PCA), hvor korrelationer mellem variable træder frem, figur 7.9a-b.



**Figur 7.9a**. Score plot med PC1 mod PC2 for PCA på 206 prøver fra projektets datasæt. Tallene angiver dybden, hvori prøven er udtaget, og farveskalaen viser variationen i volumen vægten (volumen vægten er stigende fra blå mod rød). De anvendte jorddata fremgår af figur 3.8b. Varians forklaret: PC1: 42%; PC2: 20%.



Figur 7.9b. Loading plot med PC1 mod PC2 for PCA på 206 prøver fra projektets datasæt.

Tolkning af en PCA-model sker ved at betragte score og loading plots i sammenhæng. På figur 7.9a og b angiver den vandrette akse udstrækningen for den første principal komponent (PC1). Prøver der på score plottet (figur 7.9a) ligger langt mod højre, har et højt indholdet af grovsand1 og 2, hvilket kan ses på loading plottet (figur 7.9b), hvor disse to variable ligger mod højre. Grovsand1 og grovsand2 er positivt korrelerede med hinanden, idet de ligger tæt sammen på loading plottet. Grovsand er derimod negativt korrelerede til de fine kornstørrelser som ligger til venstre på loading plottet. Ved tolkningen af PCA-modellen fortæller forklarings-graden for den enkelte principal komponenten. I tolkningen af sammenhængen mellem volumen





**Figur 7.10a**. Score plot med PC2 mod PC3 for PCA på 206 prøver fra projektets datasæt. Tallene angiver dybden hvori prøven er udtaget og farveskalaen viser variationen i volumen vægten (volumen vægten er stigende fra blå mod rød). De anvendte jorddata fremgår af figur 3.9b. Varians forklaret: PC2: 20%; PC3: 17%.



Den multivariate dataanalyse af simple jordegenskaber og volumenvægten viser at det ikke er muligt at opstille en korrelationsmodel, der beskriver volumenvægten. Det betyder at datasættet ikke indeholder tilstrækkeligt med information til at volumen vægten er beskrevet med andre data. Volumenvægten betragtes derfor som en selvstændig information der ikke kan substitueres. Principal komponent analysen fortæller at volumenvægten er positivt korreleret med indholdet af de fine kornstørrelser og negativt korreleret til indholdet af organisk kulstof (Ctotal).Volumen vægten er på både PC1 og PC2 positivt korreleret med ler, silt og grovsilt. I forhold til C-total er volumen vægten på PC2 og PC3 negativt korreleret, hvilket fremgår af figur 7.10b, hvor C-total ligger i modsatte hjørne i forhold til volumenvægten. Betydningen af C-total hænger snævert sammen med dybde 1 (A-horisonten), hvilket kan ses ved at sammenholde score plottet med PC2 og PC3 (figur 7.10a) med det tilhørende loading plot (figur 7.10b), hvor de blå ettaller (A-horisonterne) ligger samme sted i diagrammerne som C-total.

# **Biologiske aktivitet**

I projektet er der, udover bakterietællinger, fire mål for jordens biomasse og biologiske aktivitet. I felten måles den basale respiration (IRGA) og i laboratoriet anvendes tre metoder, SIR, ASA og FDA, som fortæller om biomassen og den biologiske aktivitet. Mål for den biologiske aktivitet kan ikke repræsenteres ved øvrige jordegenskaber. Den biologiske aktivitet kan bestemmes i felten.

#### Feltmåling af basal in situ respiration (IRGA)



*Figur 7.11*. Basal in situ respiration (IRGA) målt i cirka 50 punkter for hver af de seks marker, hvor variabiliteten er undersøgt. Måling af IRGA fandt for mark 1 sted ultimo november, for mark 4, 7 og 10 ultimo marts, mens måling for mark 13 blev foretaget ultimo august og for mark 19 medio september.

Måling af den basale respiration i felten (IRGA) forventes at være afhængig af årstiden, idet den biologiske aktivitet påvirkes af temperaturen. Dette bekræftes gennem IRGA målt i projektet, hvor forskellen i tidspunkt på året for feltmålingen afspejler sig i værdierne for IRGA for de seks marker, hvor variabiliteten er undersøgt, figur 7.11. Figuren viser at mark 13 og 19 giver væsentlig højere værdier end mark 1, 4, 7 og 10, hvilket kan forklares med at mark 13 og 19 er målt i sensommeren, mens de øvrige marker er målt i henholdsvis tidlig forår og sen efterår.

På grund af den store årstidsafhængighed af IRGA er denne parameter ikke anvendt i forbindelse med korrelationsanalyserne.

## Biologisk aktivitet og biomasse bestemt i laboratoriet

Resultaterne af de tre mål for biomasse og biologisk aktivitet (SIR, ASA og FDA bestemt i laboratoriet) danner alle to grupper, hvor A-horisonten har høje værdier, mens de dybere horisonter generelt har lave værdier. For A-horisonterne er der en vis sammenhæng mellem værdierne indenfor de fire landskabselementer: Yoldia flade, hedeslette, bakkeø og Weischel moræne. I det følgende vises figurer af SIR/ASA/FDA mod C-total (figurerne 7.12 – 7.17), hvilket illustrerer, at der er tendens til en positiv sammenhæng mellem indholdet af organisk kulstof og biomasse/biologisk aktivitet. Der er tale om en tendens, som er bedst illustreret for ASA, mens tendensen for FSA er meget svag eller ikke eksisterende. Det bemærkes at der <u>ikke</u> er tendens til negativ afhængighed mellem indholdet af organisk kulstof og målene for biomasse/biologisk aktivitet.

Der har ikke kunnet etableres en korrelation mellem øvrige simple jordegenskaber og målene for biomasse/biologisk aktivitet, hvorfor det i sammenhæng med nedenstående illustrationer kan konstateres at SIR, ASA og FDA indeholder selvstændig information, der ikke kan erstattes af de øvrige jordegenskaber.



#### Substrat Induceret Respiration (SIR)

*Figur 7.12.* C-total mod SIR for prøver fra A-horisont på Yoldia flade (blå **\_**), Hedeslette (grøn **▲**); Bakkeø (gul ◆) og Weischel (rød ●).



Figur 7.13. C-total mod substratinduceret respiration, SIR, for prøver fra dybde horisonter



**Figur 7.14**. C-total mod arylsulfatase aktivitet, ASA, for prøver fra A-horisont på Yoldia flade (blå **f**irkant), Hedeslette (grøn **A**trekant); Bakkeø (gul **>** diamant) og Weischel (rød **e**cirkel).



Figur 7.15. C-total mod arylsulfatase aktivitet, ASA, for prøver fra dybde horisonter.



*Figur 7.16.* C-total mod flourescein diacetat hydrolyse, FDA, for prøver fra A-horisont på Yoldia flade (blå firkant), Hedeslette (grøn *A*trekant); Bakkeø (gul *<* diamant) og Weischel (rød *C*irkel).



Figur 7.17. C-total mod flourescein diacetat hydrolyse, FDA, for prøver fra dybe horisonter.

## Referencer

Schroeder, D. 1978. Bodenkunde in Stichworten. Verlag Ferdinand Hirt, Kiel, Tyskland. 154 sider.

Holm, P.E., H. Rootzén, O.K. Borggaard, J.P. Møberg og T.H Christensen. 2003. Correlation of cadmium distribution coefficients to soil characteristics. Journal of Environmental Quality, 32: 138-145.

Bilag side 114

# Bilag 8. Omregning af $K_d$ til $K_f$ GEUS: Jim Rasmussen

Bindingen bestemt som fordelingskoefficienten  $K_d$ . I forbindelse med simulering af udvaskning med MACRO modellen anvendes Freundlich funktionen til beskrivelse af bindingen:

l denne lineære udgave af Freundlich funktionen, er  $C_{aq}$  koncentrationen af pesticid i jordvæsken,  $C_s$  er koncentrationen af pesticid på jorden (den faste fase), K<sub>f</sub> er Freundlich koefficienten og n<sub>f</sub> er Freundlich eksponenten.

 $\log C_s = \log K_f + n_f * \log C_{aq}$ 

Freundlich koefficienten, K<sub>f</sub>, beskriver (i analogi med K<sub>d</sub>) fordelingen af pesticid mellem væskefasen og den faste fase, mens Freundlich eksponenten, n<sub>f</sub>, beskriver mætningsgraden af binding ved stigende koncentration af pesticid. Ved n<sub>f</sub> på 1 er K<sub>f</sub> lig K<sub>d</sub>, mens en n<sub>f</sub> mindre end 1 betyder, at den relative binding falder med stigende pesticid koncentration. Jordens bindingssteder er altså mættede.

De omregnede  $K_d$ -værdier er anvendt i forbindelse MACRO simuleringerne og ved korrelation af øvrige jordegenskaber til binding.

#### Isotermer bestemt for A- og C-horisont fra tre lokaliteter

Omregning af  $K_d$  for MTA, MTB, glyphosat og MCPA er foretaget i forhold til isotermer bestemt for prøver fra A- og C-horisonten på de tre lokaliteter. De tre lokaliteter repræsenterer landskabselementerne Yoldia flade (Ulsted), Hedeslette (Simmelkær) og Weischel moræne (Sjørup). Bestemmelsen af isotermerne er sket med 5 koncentrationer af pesticid efter samme forskrifter, som er fulgt ved bestemmelser af fordelingskoefficienten, K<sub>d</sub>. Resultaterne er herunder illustreret for hvert af pesticiderne:

### MTA, figurerne 8.1 og 8.2, samt tabel 8.1.



*Figur 8.1*. Lineær afbildning af isotermer for MTA i A-horisont fra Ulsted (blå **□**), Simmelkær (grøn **▲**) og Sjørup (rød **●**).



*Figur 8.2*. Lineære afbildning af isotermer for MTA i C-horisont fra Ulsted (blå ■), Simmelkær (grøn ▲) og Sjørup (rød ●).

Tabel 8.1.	Isotermer for MTA.	Omregningsværdi fo	r n <sub>f</sub> er middelværd	dien for de tre lokali-
teter.				

Lokalitet		A-horisont		C-horisont					
	$K_{f}$	n <sub>f</sub>	$R^2$	K <sub>f</sub>	n <sub>f</sub>	$R^2$			
Ulsted	32,5	0,67	0,9909	118,6	0,57	0,9967			
Simmelkær	147,4	0,58	0,9894	38,9	0,53	0,9993			
Sjørup	11,6	0,70	0,9982	21,3	0,63	0,9995			
omregningsværdi		0,65			0,58				

MTB, figurerne 8.3 og 8.4, samt tabel 8.2.



*Figur 8.3.* Lineær afbildning af isotermer for MTB i A-horisont fra Ulsted (blå **□**), Simmelkær (grøn **▲**) og Sjørup (rød **●**).



*Figur 8.4*. Lineær afbildning af isotermer for MTB i C-horisont fra Ulsted (blå **□**), Simmelkær (grøn **▲**) og Sjørup (rød **●**).

Tabel 8.2. Isotermer for MTB.	Omregningsværdi for n <sub>f</sub>	f er middelværdien for de tre lokaliteter.
		<i>i</i>

Lokalitet		A-horisont		C-horisont				
	K <sub>f</sub>	n <sub>f</sub>	R <sup>2</sup>	K <sub>f</sub>	n <sub>f</sub>	R <sup>2</sup>		
Ulsted	1,7	0,91	0,9993	0,05	1,01	0,9883		
Simmelkær	1,8	0,90	0,9988	0,04	1,00	0,9808		
Sjørup	1,3	0,90	0,9994	0,03	1,00	0,9781		
omregningsværdi		0,90			1,00			

MCPA, figurerne 8.5 og 8.6, samt tabel 8.3.



*Figur 8.5.* Lineær afbildning af isotermer for MCPA i A-horisont fra Ulsted (blå **□**), Simmelkær (grøn **▲**) og Sjørup (rød **●**).



*Figur 8.6.* Lineær afbildning af isotermer for MCPA i C-horisont fra Ulsted (blå □), Simmelkær (grøn ▲) og Sjørup (rød ●).

**Tabel 8.3**. Isotermer for MCPA. Omregningsværdi for  $n_f$  er middelværdien for de tre lokaliteter.

Lokalitet		A-horisont		C-horisont					
	K <sub>f</sub>	N <sub>f</sub>	$R^2$	K <sub>f</sub>	n <sub>f</sub>	$R^2$			
Ulsted	4,6	0,79	0,9997	0,4	0,90	0,9983			
Simmelkær	10,1	0,82	0,9977	0,5	0,88	0,9987			
Sjørup	2,2	0,83	0,9987	0,1	0,85	0,8623			
omregningsværdi		0,81			0,88				

Glyphosat, figurerne 8.7 og 8.8, samt tabel 8.4.



*Figur 8.7*. Lineær afbildning af isotermer for glyphosat i A-horisont fra Ulsted (blå □), Simmelkær (grøn ▲) og Sjørup (rød ●).



*Figur 8.8*. Lineær afbildning af isotermer for glyphosat i C-horisont fra Ulsted (blå **□**), Simmelkær (grøn **▲**) og Sjørup (rød **●**).

Lokalitet	A	\-horisont		C-horisont					
	K <sub>f</sub>	n <sub>f</sub>	R <sup>2</sup>	K <sub>f</sub>	n <sub>f</sub>	R <sup>2</sup>			
Ulsted	1170	0,79	0,9953	3740	0,80	0,9906			
Simmelkær	1100	0,80	0,9928	860	0,72	0,9904			
Sjørup	480	0,78	0,9883	1630	0,57	0,9805			
omregnings- værdi		0,79			0,70				

**Tabel 8.4**. Isotermer for glyphosat. Omregningsværdi for n<sub>f</sub> er middelværdien for de tre lokaliteter.

Opsamling

Generelt er der for alle fire stoffer tale om gode bestemmelser af Freundlich isotermerne. Freundlich eksponenterne er for MTB og MCPA stort set ens for de tre lokaliteter i hhv. A- og Chorisonterne. For glyphosat er Freundlich eksponenterne i A-horisonten ens, mens eksponenterne i C-horisonterne er forskellige, hvilket betyder at omregningsværdien er usikkert bestemt. For MTA er der en vis forskel på de tre lokaliteter i både A- og C-horisonterne, hvilket medfører usikkerhed på omregningsværdierne.

Isotermerne for de fire stoffer bekræfter at MTA og glyphosat bindes meget stærkt til jorden, mens MCPA og MTB bindes mindre stærkt, hvor specielt bindingen i C-horisonten er meget svag.

# 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 stofspecifikke 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	Metode	Resultat
			kørsler		
1 <sup>a,b</sup>	Identificering af vigtige	Fuldprofiler	12 x 250 <sup>1</sup>	Følsomhedsanalyse vha. Latin Hypercube Sampling (Monte-Carlo) <sup>2</sup>	sorption og nedbrydning er mest følsomme parametre <sup>3</sup>
2 <sup>a,b</sup>	Kvantificering af aktuel udvaskning (ingen kalibre- ring <sup>4</sup> )	Fuldprofiler	3 stoffer x 24 prof.	Deterministiske kørsler med mål- te/estimerede Data <sup>5</sup>	MTB udvaskes <sup>6</sup> , MCPA, MTA og Glyphosat ikke
3 <sup>⊳</sup>	Som 2	Fuldprofiler	3 x 24	Som 2, men med fastholdt nedbryd- ning <sup>7</sup>	som 2
4 <sup>a,b</sup>	Som 1	Kvadratnet profiler <sup>8</sup>	175 x 100 <sup>9</sup>	som 1	som 1
5⁵	Identificering af sårbare jord for kK <sub>f</sub> -kombinationer	Kvadratnet profiler	9 kombi- nationer x 175 prof.	9 forskellige kombinationer af ned- brydning og sorption simuleret for kvadratnettet	Geografisk placering af sårbare jord for diverse stoffer
6 <sup>b</sup>	Kvantificering af indflydel- se af A-horisonten på udvaskning	Udvalgte fuldprofiler <sup>10</sup>	10 profiler x 10 tykkel- ser	Metribuzin simulering med 10 for- skellige 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).
- Variationen i simuleret pesticidudvaskning er mest f
  ølsom overfor nedbrydning og sorption hhv. DT50 og K<sub>f</sub>. Dette resultat bekr
  æftes af lignende engelsk unders
  øgelse for sand (Dubus & Brown, 2002).
- 4: Ingen data for modelkalibrering er tilgængelig.
- 5: Hydrauliske data er estimeret fra tekstur data, stofspecifikke modelparametre fra laboratoriemålinger.
- 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% fraktil laveste k ('worst case') værdi udfra 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 randbetingelse 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 pesticidanvendelse. 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.

<u>Kvadratnet profil simuleringer (simulering 4 i tabel 9.1).</u> 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<sub>f</sub>) ikke er målt for kvadratnet profilerne, benyttes værdier beregnet ved hjælp af korrelationsmodeller udfra simple jordegenskaber som tekstur og pH (se kapitel 4.3 i hovedteksten), idet disse er kendte i profilerne. Udover K<sub>f</sub> 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 randbetingelse, grundvandsspejlets dybde, varieres.

<u>Simuleringer med forskellige kombinationer af DT50(k) og K<sub>f</sub> (simulering 5 i tabel 9.1).</u> 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<sub>f</sub> 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<sub>f</sub>.

Intervallerne for DT50 (k) og K<sub>f</sub> 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<sup>-1</sup>] og for K<sub>f</sub>: 0-5 [cm<sup>3</sup> g<sup>-1</sup>]. 9 forskellige kombinationer af DT50 (k) og K<sub>f</sub> i A- og B-horisonten er kørt på alle de 175 kvadratnet profiler (tabel 9.2).

kK <sub>f</sub> -kombination	k (øvre)	k (nedre)	K <sub>f</sub> (øvre)	K <sub>f</sub> (nedre)
	[d-1]	[d-1]	[cm <sup>3</sup> g <sup>-1</sup> ]	[cm <sup>3</sup> g <sup>-1</sup> ]
1	1.10 <sup>-3</sup>	0	5	1
2	1.10 <sup>-3</sup>	1.10 <sup>-3</sup>	5	0
3	1.10 <sup>-3</sup>	0	5	0
4	1.10 <sup>-2</sup>	0	1	1
5	1.10 <sup>-2</sup>	1.10 <sup>-3</sup>	1	0
6	1.10 <sup>-2</sup>	0	1	0
7	1.10 <sup>-3</sup>	0	1	1
8	1.10 <sup>-3</sup>	1.10 <sup>-3</sup>	1	0
9	1.10 <sup>-3</sup>	0	1	0

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

De ni kombinationer af DT50 (k) og K<sub>f</sub> kan ikke betragtes som (reelle) stoffer, idet der ikke er nogen sammenhæng mellem DT50 (k) og K<sub>f</sub> 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<sub>f</sub>. Der forventes en sammenhæng da resultaterne fra Monte-Carlo type simuleringerne (se Resultater af modelleringen, herunder) har vist, at netop K<sub>f</sub> 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 zoneringssammenhæng. For at kvantificere betydningen af A-horisontens tykkelse på udvaskningen fra en 2 meter dyb profil, er tykkelsen i modellen varieret for 10 udvalgte fuld-profiler, 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.

Profilnummer	Landskabselement	A-horisont	A-horisont
		Målt tykkelse	Max tykkelse
		[cm]	[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

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

### **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 udfra 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 simuleringsresultater.



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

<u>Resultater fra følsomhedsanalyse af modelparametre mht. total udvaskning (simulering 1 i tabel 9.1).</u> 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 (SRRC). 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 stofspecifikke 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 der tilstrømmer B-horisonten) og 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 parametrisk test for ikke normaltfordelte 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

<u>Resultater fra fuldprofil simuleringer (simulering 2 og 3 i tabel 9.1).</u> 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% fraktil 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<sup>3</sup>]. 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 stofspecifikke 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<sub>f</sub> 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.



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.

<u>Resultater fra kvadratnet profil simuleringer (simulering 4 i tabel 9.1).</u> 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 stofspecifikke input-parametre, dvs. sorptions- og nedbrydningsegenskaber i form af parametrene Freund (Freundlich exponent i isotermen), 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.



<u>Resultater fra simuleringer med k-Kf kombinationer (simulering 5 i tabel 9.1).</u> Der er simuleret 9 forskellige kombinationer af værdier for sorption (K<sub>f</sub>) 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<sup>3</sup>], hvilket resulterer i en koncentration [mg m<sup>3</sup>]. Der anvendes Tylstrup klima. For en vurdering af klimaets betydning for de simulerede resultater anvendes også Estrup klima som øvre randbetingelse.

l figur 9.6 vises, at de 9 forskellige kK<sub>f</sub>-kombinationer resulterer i en udvaskning, hvis absolutte niveau afhænger af den valgte kK<sub>f</sub>-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<sub>f</sub>-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<sub>f</sub>-kombination nr. 2 og 4 for 2 klimatyper.



**Figur 9.9**. Den relative koncentration i 2 meter af de ni kK<sub>r</sub>-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<sub>f</sub>-kombinationer. Figuren indikerer, at med de valgte værdier for DT50 (k) og K<sub>f</sub> (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<sub>f</sub> 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 9.11.* 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 zoneringssammenhæng 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 Ahorisont 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: <u>http://www.mv.slu.se/bgf/Macrohtm/info.htm</u>

Kjær, J., M. Ullum, P. Olsen, P. Sjelborg, A. Helweg, B. Mogensen, F. Plauborg, R. Grant, I.S. Fomsgaard, and W. Brüsch. 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.

# **Bilag 10. Korrelationsmetoder og resultater** GEUS: Jim Rasmussen, Per Rosenberg

I dette bilag beskrives først de to metoder anvendt ved korrelationsanalyserne, efterfølgende gennemgås fremgangsmåde ved datafortolkningen og til slut gives en uddybende dokumentation for resultaterne i hovedteksten.

### Korrelationsmetoder

I korrelationsanalyser undersøges det om der eksisterer sammenhænge mellem forskellige variable, således at oplysninger om den ene type variable kan bruges til at forudsige værdierne af den anden type variable (kovarians), for eksempel mellem simple jorddata og bindingen af et bestemt pesticid til den pågældende jordtype. Det kan dreje sig om enkle situationer, hvor værdierne af to målte variable testes mod hinanden (bivariat sammenhænge) eller komplicerede undersøgelser, hvor mange variable sammenholdes på én gang (multivariat sammenhænge). I naturlige systemer er det yderst sjældent der findes generelt anvendelige bivariate sammenhænge mellem variable der ikke er direkte afledt af hinanden. Korrelationsanalyserne er i projektet brugt dels til at vurdere, om der er indbyrdes sammenhænge mellem de variable som direkte karakteriserer pesticidudvaskningen (modelparametrene), dels til at afklare om modelparametrenes værdier kan fastlægges ved en regressionsanalyse ved hjælp af simple jorddata. Disse variable kan efterfølgende bruges til at kortlægge udvaskningsforholdene, og dermed være med til at pege på et areals følsomhed. En anden meget vigtig anvendelse af korrelationsanalyser er til studier af sammenhænge mellem variable. Gennem en undersøgelse af strukturerne i et datasæt kan de mest betydende variable udpeges og der kan opnås forståelse af hvilke variable der kan undværes. Brugt proaktivt kan dette anvendes til optimering af analysestrategier i et projekt.

En række variable er bestemt gennem analyser udført på delprøver af samme jordprøve. Hermed er der opbygget et samlet sæt af oplysninger om jordprøvens simple jordparametre (bl.a. pH, indhold af organisk stof, sand og ler), jordprøvens evne til at tilbageholde vand, potentialet for nedbrydning og binding af pesticid. To metoder til undersøgelse af sammenhængene i data er anvendt i projektet, neurale netværk og partial least square regression (PLS).

<u>Neurale netværk.</u> Neurale netværk er karakteriseret ved en algoritme der ved hjælp af et læredatasæt, det vil sige et datasæt hvor udfaldsrummet er kendt, kan opbygge en sammenhæng mellem input data og output data (resultatet). Neural netværksteknik er her brugt til at beskrive de hydrauliske modelparametre.

Styrken i neurale netværk er at der ikke behøver at eksistere eller forudskikkes en lineær sammenhæng mellem input variable og resultat. Til gengæld fordres der normalt et stort læresæt, og det er ikke muligt direkte at beskrive datasammenhængen og dermed, hvordan netværket er kommet frem til resultatet.

Anvendelsen af neurale netværk er veletableret, og almindeligt anerkendt, i forbindelse med prædiktion af hydrauliske inputdata til modeller som f.eks. MACRO.

Partial Least Squares Regression (PLS). I analysen bruges et princip om at finde kombinationer af variable (latente variable) til at beskrive tendenserne i et datasæt. Normalt er variable ikke indbyrdes uafhængige, hvilket gør en metode som Multible Lineær Regression (MLR) uegnet. For at komme ud over dette problem, projiceres variablene ind på retninger der er indbyrdes uafhængige, såkaldte latente variable. Latente variable er således linearkombinationer af de oprindelige variable, med det krav at de skal være vinkelrette på hinanden (uafhængige). I et XY-plot mellem to variable kan der tegnes en regressionslinie, som beskriver sammenhængen mellem de to variable. Ved at gøre dette, er det muligt at bruge regressionslinien eller regressionsvektoren som latent variabel i beregningerne i stedet for de oprindelige to variable. Hermed er et todimensionelt problem reduceret til et endimensionelt. Fejlen ved at gøre dette svarer til afstanden mellem de enkelte punkter og regressionslinien. Denne fejl minimeres ved en mindste kvadraters metode. Hvis der er mange variable er fremgangsmåden mere kompliceret, figur 10.1. Med analogi til XY-plottet angives først den mest udtalte retning i datastrukturen. Herefter angives en ny retning som beskriver datasættet bedst, samtidigt med at den er vinkelret på retningen af den første latente variabel. Denne proces fortsættes indtil antallet af frihedsgrader er opbrugt eller at beskrivelsen af datasættet ikke øges yderligere. Ved PLS optimeres udvælgelsen af latente variable således at der både tages hensyn til beskrivelsen af de variable, der indgår i korrelationen (de uafhængige variable), og evnen til at beskrive den afhængige y variabel efter en veldefineret og standardiseret algoritme. Der henvises til Brereton (1990) eller Esbensen (2002) for en mere uddybende beskrivelse af meto-den.



**Figur 10.1.** Et datasæt med tre variable kan illustreres perspektivistisk; princippet i illustrationen gælder også for et vilkårligt højere antal variable (i denne rapport arbejdes der med op til 20 variable af gangen). Ved multivariat korrelation beregnes et lille antal lineære kombinationer af de oprindelige variable (kaldet PC1, PC2, ...), som tillader afbildning ned i et overskueligt, lavt antal dimensioner (ofte kun to eller tre). Figuren viser hvordan et tredimensionalt problem enkelt kan udtrykkes i bare to dimensioner (et plan). Projektionens fejl i forhold til det oprindelige datasæt, er den vinkelrette afstand mellem punkterne og planet udspændt af de to principal komponenter. Illustration efter Esbensen (2002, figur 3.11).

Figur 10.1 viser udspændingen af et datasæt i et tre dimensionalt rum, hvor PC1 og PC2 (principal komponent) betegner de to vigtigste retninger i 3D-rummet. PC1 og PC2 fremkommer gennem en projektion af det oprindelige datasæt, hvor de indre sammenhænge i et datasæt bestående af en række prøver (objekter) og en række parametre (variable) undersøges. I projektet er anvendt multivariat regression, specielt PLS, som giver mulighed for at se på sammenhænge mellem to datasæt. De to datasæt kan f.eks. bestå af vanskeligt tilgængelige DT50 værdier i det ene sæt, og simple billige analyseparametre i det andet sæt. ... Ved at reducere antallet af dimensioner i det ene datasæt ved hjælp af latente variable, kan der etableres en simpel regressionsrelation mellem det ene og det andet datasæt. Denne korrelation kan så anvendes til at prædiktion af f.eks. DT50 værdier ud fra simple jorddata, og altså medføre at dyre og vanskelige analyser kan erstattes med simple og billige.

Regressions metoden anvendt i dette projekt kaldes for Partial Least Squares Regression og forkortes PLS-R eller blot PLS. Metoden udmærker sig ved at optimere udvælgelsen af latente variable, sådan at de bedst beskriver både det uafhængige datasæt og det afhængige datasæt.. Det betyder at korrelationerne ofte kommer til at bestå af færre latente variable end ved andre metoder og dermed bliver mere simple og lette at fortolke. De latente variable i denne metode kaldes for "PLS-komponenter" analogt med "principal komponenter" ved principal component regression og analyse. PLS-regressionsmetoden er begrænset til at beskrive lineære sammenhænge. Dette betyder at rådata i situationer med ikke lineære sammenhænge må transformeres, f.eks. ved en log transformation, for at kunne anvende metoden. Er det ikke muligt af finde en passende transformation, kan det være nødvendigt f.eks. at anvende neurale netværk til at beskrive sammenhængen..

Korrelationerne er i projektet valideret ved krydsvalidering enten efter "leave one out" eller segment principperne. Validerings principperne går alle ud på, iterativt og ved forskellige udvælgelses metoder at fjerne variable eller objekter for regressionskorrelationen. Herefter laves ny korrelation og virkningen af udeladelsen undersøges. Krydsvalidering anvendes når det ikke er muligt eller er for dyrt at designe undersøgelserne således at der kan etableres både et læredatasæt og et valideringsdatasæt.

Identifikation af outliers er sket ved at vurdere den enkelte prøves indflydelse (leverage) på korrelationen i sammenhæng med korrelationens (manglende) evne til at prædiktere værdien for prøven (Y residual, fejl på de enkelte y prædiktioner). På figur 10.2 er vist et plot af "leverage mod Y residual", hvor det ses at prøve 14 er en outlier. Prøve 14 udviser en relativ stor fejl på prædiktionen af prøvens værdi samtidigt med at prøven har høj indflydelse på korrelationen (leverage). Prøve 3 derimod er ikke en outlier, idet prøven på trods af den dårlige prædiktion (høj Y residual) ikke har indflydelse på korrelationen. I sidstnævnte tilfælde ville det være forkert at fjerne prøven, idet denne er med til at beskrive usikkerheden på prædiktionerne ved hjælp af korrelationen.

Outliers opstår sædvanligvis ved at nogle prøver udviser en unormal "adfærd" for eller imellem de variable der har betydning for korrelationen. Er det f.eks. sædvanligt at prøver med højt ctotal indhold også har et højt lerindhold, og har disse to variable stor betydning i korrelationen, vil prøver med f.eks. højt indhold af c-total og lavt lerindhold typisk være outliers. Outliers kan også opstå hvis de ligger i yderkanten af den variationsbredde der er defineret i gennem korrelationen, hvis det er en eller få prøver der giver en ekstra udstrækning af variationsbredden for korrelationen. Endeligt kan outliers opstå ved analysefejl eller prøveudtagningsfejl. I sådanne tilfælde skal outliers fjernes helt fra datasættet. Det er meget væsentligt at bemærke at outliers i en korrelation, ikke nødvendigvis er outliers i en anden korrelation. Korrelationerne vil udvise forskellig afhængighed af de samme variable, og en "skæv" variationsbredde i en korrelation vil måske slet ikke slå igennem i en anden.

Selv om man naturligvis kan få nogle ideer til årsagen til at pågældende prøver er outliers ved at studere rådata, f.eks. tabel 10.2, er det ikke altid muligt at få en entydig årsag, idet outliers netop defineres i en multivariat sammenhæng. I stedet kan man projicere outliers ind på korrelationen, se hvordan de plotter i forhold til de prøver der indgår i korrelationen, samt forsøge at tolke deres egenskaber i det reducerede variabel rum ved hjælp af en forståelse af de latente variables betydning. Dette er illustreret i figur 10.7 og figur 10.8.



**Figur 10.2.** Prøvernes indflydelse (Leverage) på korrelationen mod fejlen i korrelationsevnen ved prædiktion af prøvens værdi (Y Residual). Plottet bruges ved udpegning af outliers i forbindelse med en PLS korrelationsanalyse

.



**Figur 20a**. Simuleret koncentration i 2 meters dybde (4.rod) mod korreleret koncentration i 2 meters dybde (4.rod) for MTB fra de 24 fuldprofiler. Baseret på målt binding og forsvinding. Varians forklaret: X: 51%; Y: 87%; 3 PLS-komponenter. Outliers: 2/24. Outlier identifikation: se tabel 10.10 i bilag 10.

*Figur 10.3.* Eksempel på figur i hovedteksten der viser korrelationens prædiktionsevne. De tilføjede fremhævelser er forklaret yderligere i teksten herunder.

Resultaterne fra korrelationsanalyserne illustreres i figurer med korrelationens evne til at prædiktere prøvernes værdi (figur 10.3), og de uafhængige variables betydning regnet med fortegn for korrelationen (regressionen), se figur 10.4. På de to figurer er der er taget udgangspunkt i et konkret eksempel fra rapporten, og vist korrelationen af de vigtigste jorddata til den simulerede udvaskning af MTB.

Figur 10.3 gengiver prædiktionsplottet for korrelationen af centrale jorddata til udvaskningen af MTB. På x-aksen vises den målte værdi (i dette tilfælde en simuleret koncentration), mens der på y-aksen vises den korrelerede værdi. I figurteksten angives det hvor godt korrelationen forklarer variationen (hvor stor en del af variationen der er forklaret i modellen) i henholdsvis uafhængige (X) og afhængige (Y) variable (rødt). Det er vigtigt at notere at jo højere/bedre forklaringen er af Y, jo bedre er korrelationen. På denne måde gives også et billede af usik-kerheden ved prediktionen. Det angives hvor mange PLS-komponenter korrelationen benytter (grønt) og endelig oplyses antallet af outliers (2 ud af 24 prøver), samt hvor der kan indhentes yderligere information om outliers. Den grønne linie på figuren angiver den ideelle regressionslinie for korrelationen; jo tættere prøverne ligger på denne linie, jo større overensstemmelse mellem den målte og den korrelerede værdi.



*Figur 20b.* Den relative betydning af jorddata (regressionsvektorer for PLS-model) for simuleret koncentration i 2 meters dybde af MTB baseret på målt binding og nedbrydning.

**Figur 10.4.** Eksempel på figur i hovedteksten, der viser de uafhængige variables indflydelse på korrelationens evne til prædiktion af de afhængige variable. De tilføjede fremhævelser er forklaret yderligere i teksten herunder.

Figur 10.4 viser det andet plot, regressionsplottet, der altid angives som resultat fra korrelationsanalyserne. Af regressionsplottet fremgår de uafhængige variables (markeret med grøn cirkel) indflydelse på korrelationen. Regressionsvektorerne (rød cirkel) viser størrelsen af indflydelsen, samt om der er tale om negativ eller positiv regression til den afhængige variabel. I eksemplet på figur 10.4 har C-total en negativ regression til den simulerede koncentration af MTB i 2 meter. Det betyder at en stigning i C-total vil medføre et fald i den simulerede koncentration. Modsat har Al<sub>oxalat</sub> en positiv korrelation til den simulerede koncentration af MTB. I dette tilfælde vil en stigning i Al<sub>oxalat</sub> medføre en stigning i den simulerede koncentration af MTB. Figuren viser også at indflydelsen fra C-total er større numerisk set end indflydelsen fra Al<sub>oxalat</sub>, hvilket er angivet ved barens længde.

PLS korrelationsanalyserne er udført med enten programmet Unscrambler version 8.0.5 fra CAMO eller med programmerne Matlab version 6.5 (release 13) fra Mathworks inc. med tilføjelsesprogrammet PLS\_Toolbox version 3.0 fra Eigenvector Research inc.

<u>Cluster analyse.</u> Clusteranalyse kan anvendes på samme datastrukturer som f.eks. PLS, det vil sige der skal være en række prøver, objekter, med en tilhørende række variable, og disse skal være bestemt for alle de objekter der skal indgå i cluster analysen.

Cluster analyse er et velegnet værktøj til på simpel og visuel måde at finde strukturer i datasæt baseret på de indgåede variable, det vil sige at afgøre hvor godt prøverne ligner hinanden, om der er grupperinger og om der er prøver der er afvigende i forhold til disse grupperinger.

I PLS regressionen er afhængigheden til f.eks. jorddata altid vist i et plot, fx. som det der er vist i figur 10.4, også kaldet regressionsvektoren. Plottypen kan fx. vise hvilken afhængighed der er mellem sorption og jorddata. For at undersøge om denne afhængighed mellem sorption og jorddata er vidt forskellig for forskellige pesticider, eller om der findes similariteter og grupperinger, kan der laves en cluster analyse på de regressionsvektorer der er opnået i PLS regressionen. På den måde afdækkes det i hvor høj grad de samme jorde vil være følsomme/ikke følsomme m.h.t. simuleret udvaskning overfor hovedparten af pesticiderne, og hvilke pesticider man må undersøge separat.

Clusteranalysen foregår ved en parvis beregning af hvor stor forskel der er på (afstand der er mellem) forskellige prøver (pesticider). Identiske prøver har afstanden 0. Fremgangsmåden er iterativt efter følgende princip:

- Analysen starter således med afstanden 0, som øges indtil man når afstanden mellem regressionsvektorerne for de to pesticider der ligner hinanden mest. For disse to pesticider, som udgør den første gruppe, udregnes gennemsnitssammensætningen (gennemsnitsregressionsvektoren) som indgår i den videre analyse i stedet for de to grupperede pesticiders regressionsvektorer, figur 10.5.
- 2. Dernæst øges afstanden indtil en af følgende hændelser indtræffer:
  - Et pesticid ligner den udskilte gruppes gennemsnitssammensætning, men i større afstand end for den første gruppe. Alle andre afstande er større. Pesticidet tilknyttes den første gruppe og en ny gennemsnitssammensætning for gruppen beregnes. eller
  - To pesticider som ikke er afstandsmæssigt knyttet til den første gruppe ligner hinanden med den korteste afstand mellem pesticiderne. Disse to pesticider udgør nu en ny gruppe, hvis gennemsnitssammensætning udregnes.

eller

- Afstanden mellem to grupper (to gruppers gennemsnit) er nu den korteste indenfor datasættet. De to grupper danner derfor en ny gruppe hvis gennemsnitssammensætning beregnes.
- 3. Processen fortsætter indtil alle pesticider og grupper er tilknyttet hinanden med et afstandskriterie.

Fremgangsmåden, der lyder kompliceret, kan illustreres med følgende simple konstruerede eksempel for et todimensionalt datasæt, tabel 10.1:

Pesticid	X (egenskab)	Y (egenskab)
A	1	1
В	2	1
С	2	2
D	2	-1
E	2	-3
F	-3	-3

Tabel 10.1. Tabel over konstrueret simpelt datasæt.

Afstandene mellem pesticidernes egenskaber (regressionsvektorer) kan illustreres i et XY-plot, figur 10.5.



**Figur 10.5.** XY plot der viser afstandsberegning for datasættet i tabel 10.1. De enkelte pesticiders egenskaber er angivet ved gridnettets krydspunkter. De farvede linier forbinder de pesticider eller beregnede gennemsnit af pesticiders egenskaber som successivt gennem analysen ligger hinanden nærmest, startende med den røde linie og afsluttende med den lilla. Yderligere forklaring i teksten.

Fremstillingen af resultatet af clusteranalysen i figur 10.5 bliver uanvendelig ved multivariate sammenhænge, da man ikke kan visualisere afstande i et multidimensionalt rum.. Derfor illustreres resultatet (af datasættet i tabel 10.2) i praksis i et såkaldt dendogram, figur 10.6. De farvede linier i XY plottet figur 10.5 svarer til de farvede linier i dendogrammet figur 10.6 og illustrerer identiske afstande.



**Figur 10.6.** Dendogram. Output fra clusteranalysen. Navnene på pesticiderne A-F (objekterne) fremgår i venstre side af dendrogrammet. Afstandene mellem (ligheder og forskelle mellem) pesticiderne er illustreret ved afstanden på x-aksen til den lodrette forbindelseslinie mellem to pesticider eller pesticidgrupper. Dimensionerne er bestemt af længden af de farvede linier som repræsenterer de samme afstande som i figur 10.5. Yderligere forklaring i teksten.

Pesticiderne (punkterne) A og B ligger (jævnfør ovenstående indledende forklaring) tættest og udgør den første gruppe, afstanden mellem A og B er markeret med rød linie. C ligger tættere på middelværdien af AB end de øvrige punkter og tilknyttes derfor denne gruppe, der nu består af AB og C, markeret med blå linie. Punktet D ligger tættere på E end på middelværdien af ABC, hvorfor DE udgør sin egen gruppe, markeret med sort linie. Gruppen DE ligger tættere på gruppen ABC end på punktet F, der har den største afstand både fra de øvrige pesticider (punkter) og grupper. Grupperne samles derfor i en storgruppe bestående af ABCDE. Afstanden mellem ABC og DE er markeret med grøn linie. Slutteligt findes afstanden fra F til gruppen ABCDE (markeret med magenta linie).

Grafisk kan cluster dendrogrammet tolkes som at AB og C udgør en gruppe der ligner hinanden meget. D og E ligner hinanden noget og ligner gruppen ABC mere end de ligner F, der må betegnes som forskellig fra alle de øvrige.

Metoden kan anvendes med et vilkårligt antal dimensioner af datasæt.

## Fremgangsmåde ved datafortolkning

Af dette kapitel fremgår hvilken korrelationsmetode og hvilke variable, der er anvendt ved de enkelte korrelationsanalyser.

<u>De mest betydningsfulde jorddata.</u> De jordegenskaber der kan beskrive henholdsvis hydrauliske modelparametre, binding og nedbrydning er tilsammen de jordegenskaber, der skal anvendes som grundlag for udpegning af særligt pesticidfølsomme arealer.

### Hydrauliske egenskaber

De hydrauliske egenskaber (vandretention samt umættet og mættet hydraulisk ledningsevne) beskrives ved funktionsudtryk foreslået af Brooks & Corey (1964) med Jarvis´ (1991) udvidelse til to domæner til brug i modellen MACRO. Funktionsparametrene K<sub>b</sub>, K<sub>s</sub>,  $\theta_b$ ,  $\theta_s$ ,  $\theta_r$ ,  $\lambda$  (se signaturforklaring i hovedteksten figur 18). er bestemt for data fra fuld profiler (sandede jorde) ved en kombination af statistisk optimering og "eye-fitting". For K<sub>s</sub> og  $\theta_s$ , bruges de målte værdier. Ved neural netværksprocedure er sammenhængen mellem modelparametrene og jordegenskaber som tekstur, humus, og landskabselement bestemt. Der er udviklet forskellige korrelationer under anvendelse af forskellige inputparametre efter proceduren beskrevet i Børgesen (2003). Resultaterne er rangeret efter prædiktionsevner. Usikkerheden af de prædikterede hydrauliske egenskaber er bestemt ved bootstrapping (hvor det neurale netværk gentagne gange er optimeret på tilfældig udvalgte 2/3 af data og testet på den sidste 1/3 af data).

Det optimerede neurale netværk er brugt til at beregne de hydrauliske egenskaber for kvadratnetsprofiler på sandjord.

### Binding

Korrelationsanalysen af simple jorddata til bindingen af MTB, MCPA og MTA er udført med PLS-regression. Som forklaret i hovedteksten (kapitel 4.3) har det kun været muligt at lave korrelation til tre af de fire hovedstoffer i projektet. Til brug for simuleringen af stoffernes udvaskning blev K<sub>d</sub> værdierne omregnet til K<sub>f</sub> værdier (se bilag 8). I korrelationsanalysen for de tre hovedstoffer blev de omregnede værdier for bindingen anvendt. Udgangsmatrix af simple jorddata bestod af kornstørrelsesfordelingen, pH<sub>Kd</sub> (pH målt i forbindelse med K<sub>d</sub> bestemmelsen), C-total, Fe<sub>DCB</sub>, Fe<sub>oxalat</sub>, Al<sub>DCB</sub>, Al<sub>oxalat</sub>, CEC, H<sup>+</sup> ombyttelig, samt jordens specifikke overflade. Termerne er forklaret i bilag 4.

### Nedbrydning

Korrelationsanalysen af simple jorddata til nedbrydningen af MTB, MCPA og MTA er udført med PLS-regression. Korrelationsanalysen er lavet til nedbrydningsraten (k) som er den målte størrelse og som anvendes til beregning af nedbrydningen (DT50). Udgangsmatrix af simple jorddata bestod af kornstørrelsesfordelingen, pH<sub>Kd</sub> (pH målt i forbindelse med K<sub>d</sub> bestemmelsen), C-total, Fe<sub>DCB</sub>, Fe<sub>oxalat</sub>, Al<sub>DCB</sub>, Al<sub>oxalat</sub>, CEC, H<sup>+</sup> ombyttelig, jordens specifikke overflade, samt mål for den biologiske aktivitet SIR, ASA, FDA, CFU<sub>TSA</sub> og CFU<sub>Goulds</sub>. Termerne er forklaret i bilag 4 og 3A (side 1).

<u>Vægtning af de vigtigste jordegenskabers betydning.</u> Formålet med disse korrelationsanalyser er at undersøge hvilke jordegenskaber der har indflydelse på udvaskningen, og hvilken betydning de har, når modelparametre for hydraulik, binding og nedbrydning integreres i udvaskningssimuleringer med MACRO modellen. Korrelationsanalyserne er udført med PLS-regression.

Simuleringerne med MACRO modellen består i tre trin, hvor første trin udelukkende beskriver de hydrauliske forhold (9 kK<sub>f</sub>-sæt). I det andet trin anvendes den målte bindingsevne på de pågældende jorde af pesticidet og de hydrauliske forhold (udvaskning af MTB med fastholdt nedbrydning), mens det tredje trin giver en integreret beskrivelse af hydraulik, binding og nedbrydning, idet alle målte modelparametre anvendes. Korrelationsanalyserne til hver af de tre trin er gennemført med de relevante jordegenskaber. Hvilket for eksempel betyder at korrelationen til den simulerede koncentration af MTB, hvor nedbrydning er holdt konstant, har taget udgangspunkt i de jordegenskaber der beskriver henholdsvis de hydrauliske forhold og bindingen af MTB.

<u>Følsomhed af A-horisontens tykkelse.</u> Der er lavet en følsomhedsvurdering af betydningen af A-horsisontens tykkelse. Denne er foregået ved at simulere udvaskningen for aktuelle iboende egenskaber, men lade a-horisonten variere på bekostning af b-horisonten. På den måde beskrives hvorledes den simulerede udvaskning varierer med a-horisontens tykkelse og det giver en indikation af med hvilken sikkerhed A-horisontens tykkelse skal bestemmes. Simuleringen er som i de øvrige simuleringer foretaget med fast nedbrydning, men med målt Kf værdi.

## Resultater af datafortolkningen

I dette afsnit gives en uddybende forklaring vedr. de resultater der præsenteres i hovedteksten.

<u>Vedr. hydrauliske modelparametre</u> Der henvises til hovedteksten, figur 17 kapitel 4.4.

Vedr. modelparametre for binding

Korrelationsanalyser mellem jordegenskaber og binding (Kf) for stofferne: MTB, MCPA og MTA:

### MTB

Der er identificeret outliere for korrelationen mellem jordegenskaber og binding for MTB, tabel 10.2 og figur 10.7. Bemærk at det kun drejer sig om outlier detektion i den population af prøver der har Kf værdier over 0.5. For de øvrige resultater henvises der til hovedteksten, figur 26a og 26b.

**Tabel 10.2.** Outliers i korrelation til K<sub>f</sub> for MTB. Tabellen giver oversigt over målte data for de objekter der er identificeret som outliers. Generelt set er ourlierne karakteriseret af høje indhold af ler og de to siltfraktioner.

Kupa ID	Kf	ph-kd	c-total	ler	silt	grovsilt	finsand1	finsand2	grovsand1
04-2-1-260	4.03	4.19	2.53	3.60	2.90	1.00	4.80	7.80	58.70
13-2-5-660	0.76	4.20	0.06	12.90	6.60	10.40	13.70	18.00	28.40
13-3-2-612	0.52	4.88	1.44	7.40	9.10	8.90	17.80	21.60	25.60
14-1-3-678	0.50	4.11	0.08	12.80	8.70	13.80	14.80	11.60	31.10
14-1-5-680	1.17	4.01	0.08	12.30	8.20	13.40	11.20	4.90	41.90
15-1-1-681	1.77	6.53	2.88	6.20	8.80	11.90	13.80	13.20	33.80
15-1-4-684	4.38	4.26	0.29	17.80	8.20	11.20	9.50	10.80	28.80
15-1-5-685	2.20	6.99	0.40	15.40	8.10	10.00	10.80	11.30	31.50
21-1-1-833	1.34	5.64	4.58	5.30	7.70	7.00	19.80	17.60	26.20



**Figur 10.7.** Score plot der viser projektionen af korrelationens objekter i det reducerede variabelrum beskrevet ved de tre latente variable (i tilfældet MTB findes der kun tre latente variable). De sorte punkter viser korrelationens objekter, mens de grønne stjerner viser outliernes projektion ind på korrelationen. Bemærk at procenterne angivet ved de tre score vektorer angiver forklaringen på X, ikke forklaringen på Y.



*Figur 10.8.* Loading plot der viser projektionen af variable på de tre loading vektorer. Plottet kan bruges til at vurdere betydningen (forstået som variable eller egenskaber) af de tre latente variable.

Figur 10.7 viser at de fleste outliers ligger separeret fra de prøver der indgår i korrelationen. Disse outliers har en normal første komponent, det vil sige det er ikke på første latente variabel de udskiller sig, men derimod på anden og tredje.

Figur 10.8. viser at første latente variabel primært udspænder variationen pH, de to finsand på den ene side og c-total, ler og de to silt på den anden side. Latent variabel 2 udspænder grovsand og ler på den ene side og c-total på den anden side. Tredje latente variabel, der er den mindst betydende, udspænder de to silt på den ene side og grovsand på den anden side. Det er ikke helt nemt at overskue et 3 D plot, og i praksis vendes og drejes plottet, for at anskue det i forskellige vinkler, før der drages konklusioner. Tildeling af egenskaber til de latente variable kan bruges til en kvalitativ vurdering af årsagen til at visse prøver er outliers. I andre sammenhænge kan det desuden bruges til at vurdere datastrukturen, hvilket også er gjort i dette projekt, men ikke rapporteret.

Kombineres de to plot kan det forsøges at forklare årsagen til outliers. De outlier der udskiller sig klart fra hovedpopulationen, er det primært prøver der er rige i silt/grovsilt og ler fraktionen og samtidigt fattige i c-total fraktionen. Der er desuden en tendens til at de er rige i grovsand. For en to prøvers vedkommende er der tale om et ekstremt højt lerindhold.

For prøverne 260, 612 og 681 kan det diskutteres om disse er outliers. Fjernelse af dem har forbedret korrelationen en smule, men det kan sagtens vælges at lade prøverne indgå i korrelationen.

Prøve 833 er meget høj i c-total, og ligger på det punkt udenfor korrelationens variationsområde, men udviser i øvrigt normal sammenhæng mellem iboende egenskaber og bindingsevnen.

I tilfældet MTB har outliers ingen betydning for vurderingen af udvaskningsrisikoen, idet de alle har en K<sub>f</sub> værdi der placerer dem i den ikke sårbare population i forhold til udvaskning. Bruges

C-total alene som afskæringskriterie er der 4 prøver der fejlagtigt vil blive placeret i gruppen potentielt sårbare arealer. Ønskes det at gøre afskæringen mere sikker ved at inddrage de øvrige variable, vil deres usædvanlige sammensætning træde frem, og prøverne må behandles særskilt.

## **MCPA**

Der er korreleret og identificeret outliers for korrelation mellem jordegenskaber og binding for MCPA, figur 10.9 og 10.10, samt tabel 10.3.



**Figur 10.9.** Målt binding ( $K_t$ ) mod korreleret binding ( $K_t$ ) for MCPA. Varians forklaret: X: 53%; Y: 89%. 3 PLS komponenter. Outliers: 4/435. Outlier idenfikation: se tabel 6.2.



*Figur 10.10.* Den relative betydning af jorddata (regressionsvektorer for PLS-korrelationen) for binding ( $K_i$ ) af MCPA.

Det er C-total der har størst indflydelse på bindingen af MCPA, hvor et stigende indhold af organisk kulstof medfører en øget binding. pH er negativt korreleret til MCPA, hvilket betyder at et fald i pH betyder en stigende binding. Kornstørrelsesfordelingen er ikke af væsentlig betydning for beskrivelsen af MCPAs binding.

	Kf	ph-kd	4.rod c-total	ler	silt	grovsilt	finsand1	finsand2	grovsand1
07-3-1-293	8.60	5.45	0.73	3.60	0.90	1.90	1.50	3.20	29.20
13-2-2-662	0.36	5.70	0.80	11.30	7.20	9.30	13.80	16.30	30.40
15-1-4-684	11.42	4.09	0.73	17.80	8.20	11.20	9.50	10.80	28.80
21-1-1-833	5.33	5.55	1.46	5.30	7.70	7.00	19.80	17.60	26.20

**Tabel 10.3.** Outliers i korrelationsanalysen til K<sub>f</sub> for MCPA

Laves en lignende projektion af outliers ind på korrelationen for MCPA som det skete for MTB, er det ikke muligt at pege på unormale egenskaber ved outliernes variabelsammensætning. Forsøges det at prædiktere Kf værdien for outlierne fås følgende værdier:

07-3-1-293:	$K_{f} = 1.1342$
13-2-2-662:	$K_{f} = 1.1813$
15-1-4-684:	$K_{f} = 2.0025$
21-1-1-833:	$K_f = 28.2392$

Afvigelsen mellem prædikteret Kf og målt Kf er tydeligvis årsagen til disse outliers. Denne afvigelse kan opstå som følge af at Kf kan være forkert, eller det kan skyldes at de pågældende prøver har afvigende egenskaber af betydning for Kf som der ikke er målt for. Det er ikke muligt at afgøre om den ene eller den anden forklaring er den rigtige. Imidlertid er antallet af outliers for Kf på mcpa meget lille, og kun i tilfældet med prøve 662 er der reelt en mulighed for at dømme en prøve ikke sårbar, selv om den kan være potentielt sårbar.

## MTA

Der er korreleret og identificeret outliers for korrelationen mellem jordegenskaber og binding for MTA, figur 10.11 og 10.12, samt tabel 10.4.



**Figur 10.11.** Målt binding ( $K_i$ ) mod korreleret binding ( $K_i$ ) for MTA. Varians forklaret: X: 67%; Y: 79%. 3 PLS komponenter. Outliers: 4/253. Outlier idenfikation: se tabel 10.4.



*Figur 10.12.* Den relative betydning af jorddata (regressionsvektorer for PLS-korrelationen) for binding ( $K_i$ ) af MTA.

Bindingen af MTA er stærkt negativ afhængig af pH og positivt afhængig af ler. C-total spiller ikke nogen rolle for bindingen og hvis der er en effekt, så er den svagt negativ.

Det skal bemærkes at korrelationen ikke er særlig god, Den vil kunne kunne anvendes til at vurdere om en prøves Kf værdi er høj eller lav, altså det er ikke muligt at komme med et godt estimat for Kf. I en vurdering af sårbarheden overfor MTA er det imidlertid fuldt tilstrækkelig at afgøre om en Kf værdi er høj eller lav, ligesom korrelationen kan bruges til at undersøge hvilke variable der har indflydelse på Kf.

Det skal desuden bemærkes at figur 10.11 indikerer at der er tale om to populationer der følger hver sin udvikling. Tages den ene population der hovedsageligt består af underjorde, kan der etableres en meget mere sikker korrelation. Denne er ikke vist.

14801 1011	. 0	nonoia				-	-			-
id-kupa	Kf-middel	c-total	silt	grovsilt	finsand1	finsand2	grovsand 1	grovsand 2	ler	ph-kd
01-2-3-110	89.19206	0.17	14.4	18.1	21.8	10.2	12.4	2.2	20.6	5.61
15-1-3-683	68.12055	0.14	6.2	9.1	13.2	12.1	35.3	9.6	14.3	5.09
13-1-4-654	2.180527	0.06	0.9	1.8	25.3	18	47.3	4.5	2.1	4.72
15-1-5-685	767.3062	0.4	8.1	10	10.8	11.3	31.5	12.2	15.4	6.79

Tabel 10.4. Outliers i korrelationen til K<sub>f</sub> for MTA

Igen er der fundet relativt få outliers ud af en temmelig stor population. Ingen outliers udviser lave Kf værdier og der er derfor ikke risiko fejlagtigt at bedømme disse ikke sårbare. For prøverne 110, 683 og 685 bærer den meget høje lerprocent årsagen til at de er outliers. For prøve 654 skyldes grovsand indholdet at prøven er outlier. Der er anvendt samme plots som for MTB, men med så mange punkter er det vanskeligt at illustrere disse sammenhænge, hvorfor figurerne er undladt her. Det skal bemærkes at outlierne kun er "kosmetiske", forstået på den måde at fjernelse kun gør korrelationen lidt bedre, inkludering ødelægger den ikke. Prædiktionen på de fire outliers ville kunne gøres med nogenlunde samme sikkerhed som på de øvrige objekter, altså man kan med sikkerhed afgøre om der er tale om en høj eller en lav Kf værdi.

<u>Vedr. korrelation til nedbrydningsparametre.</u> Korrelationsanalysen er lavet til nedbrydningsraten (k) for de tre stoffer: MTB, MCPA og MTA.

## MTB

Der henvises til resultater i hovedteksten, figur 17a og 17b. Her gives dog en outlier identifikation, tabel 10.5.

ruber re		101010												
	К	c-total	h-ombyt	fe2o3-	al2o3-	ler	silt	grovsilt	fin-	fin-	grov-	asa	fda	sir
				oxa	oxa				sand1	sand2	sand1			
02-1-1-128	-	1.10	5.07	2454.19	1426.70	5.80	8.20	13.60	22.60	20.50	24.70	15.9	47.4	3.68
	0.0068											3	4	
05-1-1-265	-	2.79	10.02	3367.28	1425.84	6.30	7.20	10.40	9.20	7.20	34.40	32.9	43.8	4.67
	0.0162											8	8	
11-1-1-539	0.0001	2.38	6.72	3306.95	2097.23	4.30	6.20	3.10	5.10	13.80	59.50	32.2	41.2	4.32
												8	3	

**Tabel 10.5.** Outliers i korrelationsanalysen til nedbrydningsraten (k) af MTB

I dette tilfælde er der 4 principal komponenter hvilket umuliggør 3 D plottene vist i figur 10.7 og 10.8. Imidlertid er det muligt at kombinere de to plot så både objekt strukturen og variabel strukturen kan studeres i et såkaldt bi-plot. For at afbilde de fire dimensioner er brugt to plots, figur 6.13 og 10.14.







**Figur 10.14.** Biplot for MTB korrelationen med outliers projiseret ind. Figuren viser tredje og fjerde latente variabel. Signaturer: blå firkanter er variablene, grønne stjerner er de objekter der indgår i korrelationen og sorte pletter er outliers.

Biplottene i figur 10.13 og 10.14 viser korrelationens objekter markeret med grøn stjerne, variablene markeret med blå firkant og outliers markeret med sort cirkel. Især er figur 10.13 vigtig da den repræsenterer den største varians i datasættet. Umiddelbart er det uhyre vanskeligt at knytte entydige årsager til outlierne. Formentligt har det noget med den grove fraktion at gøre, ikke mindst for prøve 539 og det omvendte for 128, men også C-total og H<sup>+</sup> ombyt syntes at spille en rolle. Årsagen til outlierne skal formentlig findes i at de alle bevæger sig i yderkanterne for korrelationens variationsbredde for en række variable, og dermed er vanskelige at korrelere.

## **MCPA**

Der er korreleret og identificeret outliers for korrelationen mellem jordegenskaber og nedbrydning for MCPA, idet der er analyseret for komplette profiler, så vel som for overog underjorde separat, figur 10.15.



*Figur 10.15.* Målt nedbrydningsrate (k) mod korreleret nedbrydningsrate (k) for MCPA ved brug af hele datasættet. Varians forklaret: X: 70%; Y: 81%. 3 PLS komponenter. Outliers: 10/44. Outlier idenfikation: se tabel 10.6



*Figur 10.16.* Den relative betydning af jorddata (regressionsvektorer for PLSkorrelationen) for nedbrydningen af MCPA ved brug af hele datasættet.

Når hele datasættet anvendes i korrelationsanalysen er det især C-total samme med ASA der har betydning for korrelationen, figur 10.16. Der er tale om en negativ afhængighed, hvilket betyder at en stigning i indholdet af organisk kulstof vil medføre en højere k-værdi (numerisk) og dermed en kortere DT50.


*Figur 10.17.* Målt nedbrydningsrate (k) mod korreleret nedbrydningsrate (k) for MCPA med prøver fra overjorde. Varians forklaret: X: 76%; Y: 94%. 2 PLS komponenter. Outliers: 3/17. Outlier idenfikation: se tabel 10.8.



*Figur 10.18.* Den relative betydning af jorddata (regressionsvektorer for PLSkorrelationen) for nedbrydningen af MCPA med prøver fra overjorde.

I en korrelation, hvor det kun er prøverne fra overjorden, figur 10.17 og 10.18, der anvendes som datagrundlag, viser det sig igen at C-total er den vigtigste parameter, suppleret med et mål for indholdet af aluminium.

	k	pH-h2o-1	c-total	ler	finsand2	grovsand	asa	fda
						1		
03-1-2-	-	7.05	0.15	2.10	43.90	4.10	0.50	12.88
134	0.1113							
04-1-1-	-	5.82	3.86	5.20	8.60	37.70	25.73	40.22
240	0.0266							
05-1-2-	-	5.63	0.77	6.70	4.80	20.90	2.87	7.59
266	0.1233							
10-1-3-	-	5.44	0.05	1.00	16.00	72.00	0.00	0.25
516	0.0706							
11-1-2-	-	6.27	0.40	3.10	10.80	76.10	1.11	2.25
540	0.1731							
12-1-2-	-	6.67	0.77	3.50	1.00	71.70	0.68	6.50
545	0.1727							
08-1-2-	-	5.63	0.77	4.10	10.70	57.60	1.10	13.93
403	0.1402							
09-1-2-	-	6.12	0.29	5.00	5.40	37.40	0.00	1.08
408	0.1530							
16-1-1-	-	6.61	2.03	5.60	15.30	47.20	33.87	46.71
686	0.2113							
20-1-2-	-	6.01	0.95	6.90	11.90	10.40	1.44	33.62
829	0.0208							

Tabel 10.6. Outliers i korrelationen til nedbrydningsraten (k) af MCPA for alle prøver

Som det fremgår af ovenstående er korrelationen "alle prøver" temmelig dårlig, hvilket også udtrykkes i at der er mange outliers, figur 10.19. Denne korrelation tjener i virkeligheden kun til at afgøre om vi har en situation med høj nedbrydning eller en situation med lav nedbrydning. I tilfældet lav nedbrydning kan der tildeles en lav værdi, f.eks. ingen nedbrydning, mens der i tilfældet høj nedbrydning korreleres efter korrelationen for overjorde, der giver et meget mere præcist estimat for nedbrydningen.



Figur 10.19. Score plot for korrelationen "alle prøver" (sorte pletter) med outliers projiceret ind (grønne stjerner)



Figur 10.20. Loading plot for korrelationen "alle prøver".

Figur 10.19 og 10.20 viser korrelationen "alle prøver" med de 10 outliers fra tabel 10.7 projiseret ind, sammen med veriablenes betydning for de tre latente variable. Figur 10.19 viser at outliers generelt ligger i yderkanten af sværmen med korrelationens prøver, og altså repræsenterer ekstremer i datasættet. For enkelte prøver er det muligt entydigt at pege på en årsag til at de er outliers. For prøverne 516, 540 og 545 skyldes forholdet grovsand, hvilket tildels også gælder for prøve 403 (de fire prøver i yderste højre del af plottet). For prøve 134 skyldes forholdet højt indhold af finsand (øverste prøve i venstre del af plottet). Prøve 686 og 240 har begge højt ASA og SIR værdi.

Hvis k-værdien prædikteres for outliers fås følgende, tabel 10.7:

**Tabel 10.7.** Prædikterede k-værdier for outliers. K-pred angiver den korrelerede (forudsagte) k værdi, mens k angiver den målte k værdi. Tabellen angiver prediktionsfejlen på k ved anvendes af korrelationsmodellen på outlierne.

	k_pred	k
03-1-2-134	0	-0.1113
04-1-1-240	-0.1868	-0.0266
05-1-2-266	-0.0739	-0.1233
10-1-3-516	-0.0024	-0.0706
11-1-2-540	-0.0349	-0.1731
12-1-2-545	-0.0794	-0.1727
08-1-2-403	-0.0444	-0.1402
09-1-2-408	-0.0566	-0.1530
16-1-1-686	-0.1442	-0.2113
20-1-2-829	-0.0722	-0.0208
	-	-

Med en afskæringsværdi på -0.04 mellem den gruppe med lav nedbrydning og den gruppe med høj nedbydning, vil prøve 240 og prøve 829 blive vurderet mere "sikker" end de er målt til, mens de øvrige enten forbliver i gruppen eller vil blive vurderet mere "usikker".

Korrelationen der beskriver overjordene alene fremgår af tabel 10.8.

**Tabel 10.8.** Outliers for korrelation hvor kun overjorde er anvendt. Den forudsagte værdi af k er medtaget k\_pred. Ikke forståeligt, for at illustrere prediktionsfejlens størrelse på outlierne.

	kpred	k	pH-h2o-1	c-total	h-ombyt	al2o3-dcb
04-1-1-240	-0.3249	-0.0266	5.82	3.86	16.92	2670.00
09-1-1-407	-0.0681	-0.1609	5.53	1.31	6.78	1405.50
16-1-1-686	-0.1324	-0.2113	6.61	2.03	7.08	1618.00



**Figur 10.21.** Biplot af korrelation for overjorde med outliers projiceret ind. Signaturer: blå firkanter er variablene, grønne stjerner er korrelationsobjekterne og sorte pletter er outliers.

I figur 10.21 fremgår det at der ikke er noget i datastrukturen der indikerer at der skulle være noget unormalt ved outliers. Årsagen skal findes i at korrelationen er meget dårlig til at prædiktere værdien af k for disse prøver, hvilket kan skyldes fejl på bestemmelse af k værdi eller en af variablene, eller det kan skyldes at der findes afhængigheder for disse prøver der ikke er beskrevet i datasættet. Prøve 240 og 686 er gengangere fra korrelationen med alle prøverne, mens 407 er en ny outlier som jo vil blive prædikteret rimeligt med den tidligere korrelation.

# MTA

Der er korreleret og identificeret outliers for korrelationen mellem jordegenskaber og nedbrydning for MTA, figur 10.22.



*Figur 10.22.* Målt nedbrydningsrate (k) mod korreleret nedbrydningsrate (k) for MTA. Varians forklaret: X: 94%; Y: 77%. 4 PLS komponenter. Outliers: 6/36. Outlier idenfikation: se tabel 10.9.



*Figur 10.23.* Den relative betydning af jorddata (regressionsvektorer for PLSkorrelationen) for nedbrydningen af MTA.

Som det fremgår af figur 10.22 er der ikke tale om nogen særlig god korrelation. At der med 94% af variationen i X matricen kun kan forklares 77% af variationen i k, kan skyldes at enten k er meget usikkert bestemt, hvilket formentligt er tilfældet da alle er meget små, eller at der findes egenskaber af betydning for k der ikke er målt i projektet.

De to vigtigste variable for k er  $Fe_{dcb}$  og FDA, figur 10.23. I modsætning til de øvrige korreleringer betyder C-total intet. Dette hænger formentligt sammen med at k jo også er en funktion af sorptionen, og at sorptionen for MTA ikke er afhængig af C-total.

**Tabel 10.9.** Outliers i korrelationen til nedbrydningsraten (k) af MTA. Den prædikterede k værdi er desuden anført (k\_pred).

	k_pred	K	pH-h2o-1	fe2o3-dcb	al2o3-dcb	fe2o3-oxa	fda	sir
12-1-1-544	0.0016	-0.0032	6.83	2898.74	1288.33	2150.00	43.21	2.79
12-1-2-545	0.0013	-0.0165	6.67	2913.61	3193.43	1570.00	6.50	0.35
07-1-2-378	-0.0159	-0.0093	5.83	4947.46	853.77	1840.02	0.21	0.00
08-1-2-403	-0.002	-0.0084	5.63	363.96	1460.21	84.00	13.93	0.71
09-1-2-408	-0.0059	0.0000	6.12	2321.51	1677.62	1454.95	1.08	0.21
18-1-1-696	-0.0097	-0.0161	6.42	5652.94	3435.58	3066.63	0.35	5.97

En gennemgang af score og loading plots hvor outliers er projiceret ind, giver ingen entydige forklaringer til outliers. Måske vil det heller ikke være vigtigt at efterfølge årsagen, idet alle målte k værdier små og følgelig behæftet med stor usikkerhed. At de alle er små værdier betyder samtidigt at der ikke er nævneværdig omsætning af pesticidet og man ville kunne tildele stoffet en konstant lille k værdi uden at lave nogen nævneværdig fejl.

### Vægtning af jordegenskaber efter betydning

### <u>Hydraulik</u>

Det neurale netværk kan i modsætning til PLS-regression lave korrelationer, hvor der er ikke-lineære sammenhænge mellem variable. Til gengæld giver neurale netværk ikke umiddelbart indsigt i de enkelte variables betydning for korrelationen. I forbindelse med vægtning af de jordegenskaber, som indgår i beskrivelsen af de hydrauliske forhold, er denne indsigt nødvendig. Ved at opdele datasættet med jordegenskaber for hydraulik og den simulerede koncentration for kK<sub>f</sub>-sæt nr. 2 kan der imidlertid muligvis opnås en opdeling af datasættet i mindre dele, hvor det er muligt at anvende PLS-regression. Dette er forsøgt i det følgende.

Den første opdeling sker på baggrund af kapitel 4.4, figur 20 (i den sammenfattende rapport), som viser at korrelationsanalysen skal ske for profiler med samme tykkelse af Ahorisonten. Det betyder at følgende korrelationsanalyse anvender de 111 profiler, hvor tykkelsen af A-horisonten er 30cm. Opdelingen sker herefter i første omgang på baggrund af TU-plottet for første PLS-komponent, som farvet efter lerindholdet viser to grupper (figur 10.24); en "høj gruppe" (trekanter) og en "lav gruppe" (cirkler). Den stiplede linie på figuren angiver hovedadskillelsen, som giver en høj gruppe på 34 profiler og en lav gruppe med 77 profiler.



**Figur 10.24.** TU-scoreplot for første PLS-komponent fra korrelationsanalyse af jordegenskaber for hydraulik til simuleret koncentration af  $kK_{f}$ -sæt nr. 2 for 111 profiler fra profildatabasen med en tykkelse af A-horisonten på 30 cm. Profilerne kan, på basis af lerindholdet, opdeles i en "høj gruppe" (trekanter) og en "lav gruppe" (cirkler). Farverne angiver det summerede lerindhold i den øverste meter: mørkeblå <30; blå: 30-40; mørkegrøn: 40-50; grøn: 50-60; gul: 60-70 og rød: >70 Kg/m<sup>2</sup>

Den "lave gruppe" (lavt lerindhold) opdeles yderligere på baggrund af TU-plottet for anden PLS-komponent fra korrelationsanalyse på de 77 profiler i gruppen. Opdelingen ses på figur 10.25, hvor den stiplede linie viser grænsen mellem "overdelen" (relativt højt lerindhold, små cirkler) og "underdelen" (relativt lavt lerindhold, store firkanter) af den "lave gruppe". "Overdelen" består af 58 profiler, mens "underdelen" består af 19 profiler, figur 10.25.

Efter denne opdeling efter lerindhold af de 111 profiler i tre datasæt på henholdsvis 34 ("høj gruppe"), 58 ("højeste fraktion af lav gruppe") og 19 profiler ("laveste fraktion af lav gruppe") gennemføres der korrelationer for hvert subsæt af de jordegenskaber der er vigtigst for fastlæggelsen af de hydrauliske parametre (ved neural netværksteknik) til den simulerede koncentration for kK<sub>f</sub>-sæt nr. 2, figur 10.26 – 10.28.



*Figur 10.25.* TU-scoreplot for anden PLS-komponent fra korrelationsanalyse af de jordegenskaber der er vigtigst for fastlæggelsen af de hydrauliske parametre ved neural netværksteknik til simuleret koncentration af kK<sub>r</sub>-sæt nr. 2 for 77 profiler i den "lave gruppe" (figur 10.24). Profilerne kan opdeles i to grupper, hvor cirkler angiver "overdelen" og firkanter "underdelen". Farverne angiver det summerede lerindhold i den øverste meter: mørkeblå <30; blå: 30-40; mørkegrøn: 40-50; grøn: 50-60 og gul: 60-70 Kg/m<sup>2</sup>



(predicted Y) kK<sub>r</sub>-sæt nr. 2 for "den høje gruppe" (figur 10.24). Varians forklaret: X: 70%; Y: 93%. 2 PLS komponenter. Outliers: 0/34.



<sup>30cm høj lergru...,</sup> (Y-var, PC): (TS/TF\_2,2) BOW = 8.665479 **Figur 10.26b.** Den relative betydning af jorddata (regressionsvektorer for PLS-korrelation) for simuleret koncentration af  $kK_f$ -sæt nr. 2 for den "høje gruppe" (figur 10.24).



**Figur 10.27.** Simuleret koncentration (measured Y) mod korreleret koncentration (predicted Y) kK<sub>f</sub>-sæt nr. 2 for "overdelen af den lave gruppe". Varians forklaret: X: 73%; Y: 78%. 3 PLS komponenter. Outliers: 6/58..



*Figur 10.28a.* Simuleret koncentration (measured Y) mod korreleret koncentration (predicted Y) kK<sub>f</sub>-sæt nr. 2 for "underdelen af den lave gruppe". Varians forklaret: X: 85%; Y: 82%. 3 PLS komponenter. Outliers: 1/19.



**Figur 10.28b.** Den relative betydning af jorddata (regressionsvektorer for PLS-korrelation) for simuleret koncentration af kK<sub>f</sub>-sæt nr. 2 for "underdelen af den lave gruppe". Tolkningen af korrelationsanalysen er beskrevet i hovedteksten, kapitel 4.4.

ydraulik og binding

Korrelationsanalysen er gennemgået i kapitel 4.5, figur 23a og 23b, i hovedteksten.

<u>Hydraulik, binding og nedbrydning</u> Korrelationsanalysen er gennemgået i kapitel 4.6, figur 26a og 26b, i hovedteksten.

<u>Følsomhed af A-horisontens tykkelse.</u> Der henvises til gennemgangen i hovedteksten under kapitel 4.7.

<u>Korrelering til udvaskning under hensyn til volumenvægt.</u> I denne korrelering er de enkelte variable divideret med volumenvægten for den pågældende profil, inden de er summeret i forhold til profilets dybde, f.eks. for C-total:

C-tot(i alt)=  $\Sigma C$ -tot(i j-profil) x dybde j-profil/volumenvægt(j-profil) hvor j er jordhorisonterne A, B og C.

Undtaget fra denne summation er pH der summeres uden division med volumenvægten. Følgelig er volumenvægten udtaget som selvstændig variabel i korreleringen, da den i modsat fald ville optræde flere gange.

## Referencer

# Brereton, 1990 – 1992, Multivariate pattern recognition in chemometrics, Elsevier isbn 0-444-89784-4

Brooks, R. H. and A. T. Corey. 1964. Hydraulic properties of porous media. Hydraulic Paper #3, Colorado State University, Ft. Collins, Co.,

Børgesen, C.D. 2003.On models Predicting Soil Hydraulic Properties and their Use in Agro Hydrological Modelling. Ph.D-thesis. Institut for Jordbrugsvidenskab. KVL.

Esbensen, K.H. 2002. Multivariate data analysis – in practice. 5<sup>th</sup> edition. CAMO Process AS, Oslo, Norway.

Jarvis, N. 1991. MACRO - A Model of Water Movement and Solute Transport in Macroporous Soils. Swedish University of Agricultural Sciences. Department of Soil Sciences. Reports and Dissertations 9.

# Bilag 11: Stofgruppering – sammenhæng mellem jorddata og binding GEUS: Jim Rasmussen, Per Rosenberg

I dette bilag vises i tabellerne 11.1 og 11.2 konklusionerne for undersøgelserne af bindingens afhængighed af simple jorddata for henholdsvis litteraturstudiet og stofgruppeundersøgelserne. I tabellerne findes information om de enkelte stoffers afhængighed af C-total, pH, ler, silt og sand, samt korrelationsmodellen forklaringsevne. De udspecificerede afhængigheder kan være en hjælp i forbindelse med tolkning af cluseranalysen, som integrerer de to stofklassestudier og undersøgelserne for de fire hovedpesticider i projektet. Kriterier for korrelationsanalysen trækkes frem, særligt for litteraturstudiet, hvor vi har gjort nogen antagelser (Kf og Kd mixes, pHvand og pHCaCl2 anvendes begge), der henvises i øvrigt til rapport 10a om litteraturstudiet, samt til rapport 10b om stofgruppeundersøgelserne.

imkorrelering ikke mulig+++/stor positiv/negativ korrelation++/medium positiv/negativ korrelati/ringe betydning0variabel ikke medtaget	Legende:	ud	utilstrækkeligt datagrundlag
+++/stor positiv/negativ korrelation++/medium positiv/negativ korrelati/ringe betydning0variabel ikke medtaget		im	korrelering ikke mulig
<ul> <li>++/ medium positiv/negativ korrelati</li> <li>/ ringe betydning</li> <li>0 variabel ikke medtaget</li> </ul>		+++/	stor positiv/negativ korrelation
<ul><li>/ ringe betydning</li><li>0 variabel ikke medtaget</li></ul>		++/	medium positiv/negativ korrelation
0 variabel ikke medtaget		/	ringe betydning
		0	variabel ikke medtaget

Bemærk Ringe Betydning (/) kategorien angiver afhængigheder med 1 plus eller 1 minus som er overordentligt usikre og derfor i princippet nemt kunne falde til modsatte side.

Tabellerne er sorteret først efter C-total, dernæst efter pH og til sidst tekstur (ler, silt sand).

**Tabel 11.1**. Bindingen af stoffer fra litteraturstudiets afhængighed af simple jorddata be-<br/>stemt ved korralationsanalyse af C-total, pH, ler, silt og sand til bindingen beskrevet ved<br/> $K_d$  og  $K_f$ .

Pesticid	C-total	pН	Sand	Silt	Ler
Dimethoat	+++	++	0	0	/
Pendimethalin	+++			/	+++
Diazinon	+++		/	+++	/
2,4-D	+++		/	/	/
Dichlorprop	+++		/	/	/
Tribenuron-methyl	+++		/	/	/
МСРА	+++		/	++	
Metsulfuron-methyl	+++		0	0	0
Metribuzin	+++	/	/	++	/
Simazin	+++	/	/	/	-(-)
Atrazin	+++	/	/	/	/
Isoproturon	+++	/	/	/	/
Linuron	+++	/	/	/	/
Metamitron	+++	/	/	/	/
Terbuthylazin	+++	/	/	/	/
Mechlorprop	+++	0	/		/
Diuron	+++	0	/	/	/
Bentazon	++		/	/	/
Cyanazin	-	/		/	+++
Chlorsulfuron	im	im	im	im	im
Glyphosat	im	im	im	im	im
DNOC	ud	ud	ud	ud	ud
Glufosinat	ud	ud	ud	ud	ud
Phendiapham	ud	ud	ud	ud	ud
Propiconazol	ud	ud	ud	ud	ud
Thifensulfuron-methyl	ud	ud	ud	ud	ud

**Tabel 11.2**. Bindingen af stoffer, undersøgt i stofgruppeundersøgelsernes, afhængighed af simple jordegenskaber bestemt ved korralationsanalyse af C-total, pH, ler, silt og sand til bindingen beskrevet ved  $K_d$ .

	C-total	рН	Sand	Silt	Ler
4-IA	+++	/	/	/	
BAM	+++	/	/	/	/
diuron	+++	/	/	/	/
dichlobenil	+++	/	/	/	/
diazinon	+++	/	/	/	/
isoproturon	+++	/	/	/	/
metamitron	+++	/	/	/	/
linuron	+++	/	/	/	/
metribuzin	+++	/	/	/	/
terbuthylazin	+++	/	/	/	/
atrazin	+++	/	/	/	/
MD-IPU	+++	/	/	/	/
tribenuron	+++		/	/	/
simazin	+++		/	/	/
bentazon	+++		/	/	/
2,4-D	++		/		++
MCPA	++		/		++
mechlorprop	++		/		++
Chlorsulfuron- *phenyl	++		/		++
Chlorsulfuron- *triazin	++		/		++
thifensulfuron- methyl	++		/		++
metsulfuron- methyl	++		/		++
triazinamin	++		/		++
MTA	++		++		+++
glyphosat			/	++	+++

#### Bilag 12. K<sub>d</sub> afhængighed af pH for de fire hovedpesticider

GEUS: Jim Rasmussen

Bindingen af glyphosat er, som illustreret på figur 22a og 22b i hovedteksten, afhængig af pH. I dette bilag illustreres afhængigheden af pH, som det er fundet for bestemmelserne af de fire hovedstoffers binding.



**Figur 12.1a**.  $K_d$  for MTA mod pH målt i forbindelse med bestemmelsen af  $K_d$ . 382 prøver er repræsenteret, hvor  $K_d$  værdier over 15 l/kg ikke kan kvantificeres.



*Figur 12.1b*.  $K_d$  < 1000 for MTA mod pH målt i forbindelse med bestemmelsen af  $K_d$ . 370 prøver er repræsenteret, hvor  $K_d$  værdier over 15 l/kg ikke kan kvantificeres.



**Figur 12.2**.  $K_d$  for MTB mod pH målt i forbindelse med bestemmelsen af  $K_d$ . 414 prøver er repræsenteret, hvor den røde linie ved  $K_d$  lig 0,2 l/kg markerer grænsen, hvorunder værdierne ikke kan kvantificeres.



**Figur 12.3**.  $K_d$  for MCPA mod pH målt i forbindelse med bestemmelsen af  $K_d$ . 360 prøver er repræsenteret, hvor de røde linier ved  $K_d$  lig 0,2 og 15 l/kg markerer grænserne udenfor hvilke værdierne ikke kan kvantificeres.



**Figur 12.4**. (lig figur 22a i hovedteksten).  $K_d$  (l/kg) for glyphosat mod pH fra  $K_d$  bestemmelsen. Blå lodret linie viser glyphosats p $K_a$  på 5,6. Rød vandret linie markerer grænsen hvorover  $K_d$  bestemmelserne ikke kan vurderes kvantitativt; grænsen ligger med den anvendte metode på 160 l/kg. 412 prøver er repræsenteret.

	pK <sub>a1</sub>	pK <sub>a2</sub>	pK <sub>a3</sub>	pK <sub>a4</sub>
MTA	?			
MTB	1			
MCPA	3,1			
Glyphosat	2	2,3	5,6	10,9

Tabel 12.1. Syrestyrke konstanter (pK<sub>a</sub>) for MTA, MTB, MCPA og glyphosat.

Bindingen af de fire hovedstoffers afhængighed af pH er mest udtalt for glyphosat, hvor faldende pH medfører at bindingen af stoffet fra cirka en pH enhed over  $pK_{a3}$  begynder at stige, hvilket betyder en stor spredning mellem prøverne i pH niveauet under 6,5. Et lignende billede ses for MTA og MCPA, figurerne 12.2 og 12.3, hvor effekten af fald i pH først indtræder ved et lavere pH niveau. For MTB ses ingen effekt af ændringer i pH niveauet. Effekten passer godt med stoffernes syrestyrke konstanter, hvor glyphosat har den tredje pK<sub>a</sub> værdi på 5,6, MCPA har en pK<sub>a</sub> på 3,1 og MTB har den laveste pK<sub>a</sub> værdi på cirka 1, tabel 12.1. Der er ikke oplysninger om værdi af en syrestyrke konstant for MTA, men et bud vil være at MTA her en pK<sub>a</sub> værdi omkring 3-4. Udover at stofferne ændrer ladning med ændret pH er det vigtigt at have in mente at også jordens pH-afhængige ladninger påvirkes af ændringer i pH niveauet. Dette kan også influere på bindingen af stofferne.

Ved korrelationsanalyse til beskrivelse af stoffernes bindings ud fra afhængighed af jorddata kan det være vigtigt at vide om stoffet skifter ladning. Når et stof skifter ladning er der i princippet tale om to forskellige stoffer, som ikke nødvendigvis har samme afhængigheder af jordegenskaber. Et stof på ladet form vil for eksempel have andre ionbytningsegenskaber end det tilsvarende stof på uladet form. For de fire hovedstoffer er ladningsændring kritisk specielt for glyphosat, men også MTA udviser tegn på stor pH afhængighed.

**Bilag 13. Udspænding af mineralisering og nedbrydning for de fire modelstoffer** GEUS: Jim Rasmussen



**Figur 13.1**. Udspænding af nedbrydning (DT50) for MTA, MTB og MCPA bestemt for prøver fra de 24 fuldprofiler. Den røde linie markerer grænsen ved 90 dage som adskiller gruppen af stoffer der nedbrydes hurtigt eller langsomt. Nedbrydningsværdier (DT50) over 500 dage kan ikke kvantificeres, men er medtaget som illustration af høje værdier.



**Figur 13.2**. Udspænding af mineralisering efter 9 ugers inkubation af MTA, MTB, MCPA og glyphosat for prøver fra fuldprofiler, markvariations- og profil linie undersøgelserne. Den røde linie markerer grænsen på 5% mineralisering (gælder for 100 dages inkubation), der adskiller stofferne i gruppen af hurtige og langsomt omsatte. Lav mineralisering af MCPA observeres særligt for de dybeste prøver, mens høj mineralisering af glyphosat specielt findes i prøver fra overjorden.

# Bilag 14. Verifikation GEUS: Ole Stig Jacobsen, Per Rosenberg

Med henblik på at afprøve gyldigheden af den karakterisering af sandjordes følsomhed overfor udvaskning af pesticid, som projektresultaterne indebærer, er der indsamlet uafhængig dokumentation på fire marker. Markerne er valgt så de ligger geografisk spredt og repræsenterer forskellige klimatiske forhold: Fladerne bæk (Karup hedeslette), Hellevad (Tinglev hedeslette), Nørager Mark (Djursland) og Poulstrup (Himmerland), figur 14.1. Der er normal landbrugsmæssige driftsforhold på markerne og en dokumenteret sprøjtehistorie over mindst 5 år. På alle markerne er der under 3 meter til grundvandet, svarende til knapt et års nedsivningsdybde.

Yderligere har markerne ringe topografi og der er ingen større vandindvindinger i nærheden. Markerne er på 3-5 ha og har en udstrækning på mindst 100 meter i grundvandets strømningsretning. Indenfor disse marker er profilerne/boringerne arrangeret i linier (boringslinier) på tværs af grundvandets strømningsretning, figur 14.2.

De indsamlede data omfatter bl.a. registrering af udbringningen af pesticid, udvaskningen til det øverste grundvand forskellige steder på marken (nedstrøms i forhold til udbringningen) og jordprofilernes sammensætning indenfor marken.

De indsamlede oplysninger er behandlet på samme måde som beskrevet i bilag 3B (Variabilitet), hvortil der henvises. Fremgangsmåden indebærer at afprøvningsmarkernes følsomhed overfor udvaskning af pesticid er blevet tolket på baggrund af indholdet af humus, og ler og silt i den øverste meter af jordprofilet, hvorefter markerne er indplaceret i den opstillede skala af følsomhed, kapitel 4.9, figur 32. De tolkede følsomheder er derefter sammenlignet med de aktuelle udvaskninger for markerne, og det vurderes, hvorvidt forskellene i målt udvaskning på markerne svarer til markernes relative indplacering på skalaen for følsomhed, figur 14.3.

Til verifikationen er der knyttet de samme forbehold og bemærkninger som til den lignende databehandling i bilag 3B, men med følgende bemærkninger. I verifikationsundersøgelsen er også C-horisontens egenskaber inddraget og de aktuelle mægtigheder af horisonterne anvendt. Dette indebærer at summationen af humus, ler og silt er foretaget ud fra aktuelt målte værdier i horisonterne, ligesom tykkelserne af horisonterne er målt i det pågældende borehul. Volumenvægten er baseret på gennemsnitsbetragtningerne.

Der er kun 10 datapunkter på verifikationsmarkerne, hvilket gør approximationen ved Delaunay triangulation mindre sikker.

For hver af de fire verifikationsmarker er der beregnet spredninger for indhold af humus, ler og silt, og relativ udvaskning (på den skala som er etableret for kvadratnetsprofilerne). Disse beregninger er udført for de enkelte boringslinier og for hver af markerne som helhed. Herudover er de samme data vist på Delaunay triangulerede kort for at muliggøre en geografisk sammenligning af fordelingen.

Supplerende tabeller og alle figurer er samlet efter teksten. For hver mark er der systematisk vist det samme sæt af figurer:

- variationen i humusindhold, x/y,
- variationen i ler og siltindhold, x/y,
- variationen i beregnet udvaskning, x/y,
- humuskort,
- ler- og siltkort,
- kort over beregnet udvaskning,

•	Fladerne bæk,	figurerne 14.4 – 14.10
٠	Hellevad, figure	rne figurerne 14.11 – 14.17

- Nørager mark figurerne 14.18 14.24
- Poulstrup figurerne 14.25 14.31

 Tabel 14.1.
 Pesticidpåvisninger for verifikationsmarkerne

	Fladerne I		Hell	Hellevad		Nørager mark		Poulstrup	
	fund	Max	fund	Max	fund	Max	fund	Max	
		conc		conc		conc		conc	
Mechlorprop	1	0,013	1	0,017	0	0	1	0,043	
MCPA	0	0	2	0,12	0	0	0	0	
Dichlorprop	0	0	0	0	0	0	0	0	
2,4-D	0	0	0	0	0	0	0	0	
DNOC	0	0	0	0	0	0	0	0	
Simazin	0	0	0	0	0	0	0	0	
Atrazin	0	0	0	0	0	0	0	0	
Dinoseb	0	0	0	0	0	0	0	0	
Dichlobenil	0	0	0	0	0	0	0	0	
4-Chlorprop	0	0	0	0	0	0	0	0	
Dicamba	1	0,015	0	0	0	0	0	0	
2,6-Dichlorprop	0	0	0	0	0	0	0	0	
Methabenzthiazuron	0	0	6	6,2	0	0	0	0	
Desisopropylatrazin	1	0,017	0	0	0	0	0	0	
Desethylatrazin	0	0	0	0	0	0	0	0	
Hydroxyatrazin	1	0,065	3	0,033	0	0	0	0	
Hydroxy-terbutylazin	0	0	1	0,022	9	0,11	0	0	
Terbutylazin	1	0,018	1	0,011	13	0,39	1	0,014	
2,6-Dichlorbenzamid (BAM)	1	0,06	0	0	0	0	0	0	
2,4,5-T	0	0	0	0	0	0	0	0	
Propyzamid	2	0,033	1	0,022	3	0,05	0	0	
Trifluralin	0	0	0	0	0	0	0	0	
Bentazon	15	0,36	4	0,046	5	0,053	0	0	
Isoproturon	0	0	0	0	0	0	7	0,14	
Linuron	0	0	0	0	0	0	0	0	
Pendimethalin	1	0,012	0	0	0	0	0	0	
Diuron	4	0,051	1	0,044	0	0	1	0,011	
Metamitron	0	0	0	0	2	0,02	1	0,068	
Chloridazon	0	0	0	0	2	0,032	1	0,017	
Hexazinon	0	0	0	0	0	0	0	0	
Cyanazin	4	0,044	7	0,17	5	0,33	7	1,2	
Dimethoat	0	0	0	0	0	0	0	0	
Bromoxynil	0	0	0	0	1	0,03	4	0,07	
Carbofuran	0	0	6	0,25	2	0,02	0	0	
Chlorsulfuron	0	0	0	0	0	0	0	0	
Desethylterbutylazin	0	0	1	0,021	6	0,45	0	0	
Ethofumesat	8	0,023	0	0	0	0	0	0	
Fenpropiomorph	0	0	0	0	0	0	0	0	
Hydroxycarbofuran	2	0,019	0	0	1	0,019	1	0,048	
Hydroxysimazin	13	0,061	0	0	0	0	0	0	
Toxynil	0	0	0	0	0	0	1	0,014	
Lenacil	0	0	2	0,15	0	0	1	0,011	
Metsulfuron methyl	2	0,07	0	0	0	0	0	0	
Metribuzin	19	23	1	0,013	0	0	0	0	
Pirimicarb	1	0,017	0	0	0	0	2	0,038	
Propiconazol	0	0	0	0	0	0	0	0	
4-chlor-2-methylphenol	0	0	0	0	0	0	0	0	
2,4-dichlorphenol	0	0	0	0	0	0	0	0	
Pentachlorphenol	0	0	0	0	1	0,011	0	0	

#### Resultater

Pesticidfundene på de fire marker er vist i tabel 14.1. Baseret på antallet af fund er Fladerne bæk den mest sårbare med 77 fund og gennemsnitsværdier omkring 0.5 mikrogram pr. liter. Hellevad har en noget lavere middelkoncentration for udvaskning, mens Nørager Mark har en relativt lav udvasket koncentration (om end antallet af påvisninger er relativt stort). Poulstrup ligger både antals- og koncentrationsmæssigt meget lavt i påvisninger, tabel 2.

	Fladerne bæk	Hellevad	Nørager Mark	Poulstrup
Total fund	77	37	50	28
Fund pr. boring	11,0	7,4	12,5	9,3
Max. Conc.	23	6,2	0,45	1,2
gennemsnits conc.	0,49	0,15	0,03	0,03

 Tabel 14.2. Sammendrag af pesticid fund på de fire demonstrationsmarker

Dette skal sammenlignes med den korrelerede relative udvaskning, baseret på jordens egenskaber og den foreslåede metode til følsomhedsanalyse. Her er Fladerne den mest følsomme mark med gennemsnitlig relativ udvaskning på godt 0.5 og med stor variation (helt op over 0.8). Hellevad har en noget lavere relativ udvaskning på ca. 0.4 og med maksimal værdier omkring 0.7. Den laveste korrelerede udvaskning findes på Nørager der ligger på ca. 0.04 og med en meget lav variation, mens Poulstrup ligger lidt højere på ca. 0.15 og udviser en højere variation, figurerne 14.8, 14.15, 14.22 og 14.29.

Ved sammenligning af fundopgørelsen og udvaskningsberegningen fremgår det at Fladerne ud fra begge betragtningsmåder er den mest følsomme mark. Fladerne har en gennemsnitlig korreleret udvaskning på godt 0.5. Den er altså intermediært følsom i forhold til hovedprojektets profiler og kvadratnetprofilerne, men relativt mere følsom end de øvrige verifikationsmarker. Fladerne er karakteriseret af et generelt lavt og forholdsvis ensartet fordelt humusindhold og et meget lavt og ensartet fordelt ler og silt indhold.

Udvaskningskortet viser at der især er to positioner hvor udvaskningen, beregnet på grundlag af jordens egenskaber, er relativt stor, figur 14.8. Det er undersøgt om denne variation (to positioner med høj beregnet udvaskning) indenfor Fladerne marken afspejles i den konkret målte udvaskning i boringsfiltrene nedstrøms for disse to profiler, figur 14.2. Når, imidlertid, grundvandets strømningsretning følges fra de to positioner med relativt høj simuleret udvaskning, passeres skiftevis positioner med relativ stor og lille påvist udvaskning. Det betyder at fordelingen af aktuelt målte koncentrationer af udvaskede pesticider på markerne, antagelig på grund af strømnings- og prøvetagningsmæssige årsager, ikke umiddelbart afspejler følsomheden for den samlede mark, tabel 14.4, og at det ssamlede udvaskningsbillede må skabes ved en samlet vurdering af hele marken, tabel 14.2.

Markerne er behandlet forskelligt (med pesticid) og er underlagt forskellige klimatiske forhold og behandlingerne af markerne er foregået med forskellige pesticider der har forskellige fysiske og kemiske egenskaber. Da der for alle markerne er lavet et meget bredt analyseprogram, tabel 14.4, med påvisninger af 30 forskellige pesticider, tabel 14.1, anses det for realistisk at vurdere følsomheden baseret på disse aktuelle målinger og gennemsnitligt udvaskede koncentrationer af alle udvaskede pesticider som kan måles i forhold til de korrelerede relative udvaskninger.

På markerne som helhed, med forbehold for forskellig behandling og forskellig klimatiske forhold, vurderes den korrelerede relative udvaskning realistisk: Fladerne er den mest følsomme, her foregår også den største udvaskning, efterfulgt af Hellevad med den næst højste udvaskning. Poulstrup og Nørager er begger særdeles godt beskyttede af højt indhold af både humus, og ler og silt. Ingen af verifikationsmarkerne udgør særligt følsomme arealer. Det kan i udgangspunktet ikke udelukkes at forskellen mellem verifikationsmarkernes beregnede følsomheder skyldes forskelle i nedbør (nettonedbør):

- Hellevad 600 mm/år
- Falderne bæk 500 mm/år
- Poulstrup 400 mm/år
- Nørager mark 300 mm/år

Som det fremgår af ovenstående liste er rækkefølgen af verifikationsmarker efter nettonedbør forskellig fra rækkefølgen efter udvaskning, selv om markerne repræsenterer trin på en skala fra lav til høj nettonedbør. Det vurderes derfor at det ikke er nettonedbøren der overordnet afgør rækkefølgen af marker i udvaskningsrækkefølgen. Denne vurdering er i overensstemmelse med resultaterne af simuleringerne i bilag 9, figur 9.8, som peger på at forskelle i nettonedbør i reglen har underordnet betydning.

Uden mulighed for opstilling af en detaljeret lokal sammenhæng, mellem påvist og beregnet udvaskning/følsomhed, er følsomheden (forudsagt gennem korrelation) således, som nævnt ovenfor, verificeret på grundlag af generelle forskelle mellem de fire verifikationsmarker. På grundlag af overensstemmelsen i denne sammenligning mellem udvaskningen på markerne, og indplacering i forhold til den beregnede relative udvaskning for kvadratnetsprofilerne, figur 14.3, vurderes den foreslåede metode til vurdering og klassifikation af følsomhed at være verificeret på et realistisk niveau.

Figurer til bilag 14.



Figur 14.1. De fire verifikationsmarkers placering og gennensnitsnedbøren



*Figur 14.2. Placeringen af prøvetagningsfiltre i boringer (røde) og jordkarakteriseringsprofiler (hvide. På de fire verifikationsmarker.* 

Grundvandets strømningsretning er angivet på figurerne 14.10, 14.17, 14.24 og 14.31.



**Figur 14.3.** Angivelser af medianværdi og variationsbredde (lodrette streger) for korrelerede udvaskninger for verifikationsmarkerne, samt de specifikt korrelerede udvaskninger for de to profiler i hver af Varslingssystemet for Pesticiders sandjordsmarker (Jyndevad og Tylstrup, punktværdier på kurven hvor den skæres af de stiplede linier). Disse værdier er sat i forhold til den simulerede relative udvaskning af MTB i kvadratnetsprofilerne (blå kurve).



**Figur 14.4.** Fladerne bæk. Spredningen i humusindhold i de to profillinier og for marken som helhed.



Figur 14.5. Fladerne bæk. Spredningen i ler- og siltindhold i de to profillinier og for marken som helhed.



Figur 14.6. Fladerne bæk. Spredningen i korreleret udvaskning i de to profillinier og for marken som helhed.



Figur 14.7. Fladerne bæk. Geografisk fordeling af humusindholdet på verifikationsmarken.



Figur 14.8. Fladerne bæk. Geografisk fordeling af ler- og siltindholdet på verifikationsmarken.



Figur 14.9. Fladerne bæk. Geografisk fordeling af korreleret relativ udvaskning på verifikationsmarken.



Figur 14.10. Fladerne bæk. EM38 målinger, boringernes placeringer og grundvandets strømningsretning.



Figur 14.11. Hellevad. Spredningen i humusindhold i de to profillinier og for marken som helhed.



Figur 14.12. Hellevad. Spredningen i ler- og siltindhold i de to profillinier og for marken som helhed.



Figur 14.13. Hellevad. Spredningen i korreleret udvaskning i de to profillinier og for marken som helhed.



Figur 14.14. Hellevad. Geografisk fordeling af humusindholdet på verifikationsmarken.


Figur 14.15. Hellevad. Geografisk fordeling af ler- og siltindholdet på verifikationsmarken.



Figur 14.16. Hellevad. Geografisk fordeling af korreleret relativ udvaskning på verifikationsmarken.



Figur 14.17. Hellevad. EM38 målinger, boringernes placeringer og grundvandets strømningsretning.



Figur 14.18. Nørager mark. Spredningen i humusindhold i de to profillinier og for marken som helhed.



Figur 14.19. Nørager mark. Spredningen i ler- og siltindhold i de to profillinier og for marken som helhed.



Figur 14.20. Nørager mark. Spredningen i korreleret udvaskning i de to profillinier og for marken som helhed.



Figur 14.21. Nørager mark. Geografisk fordeling af humusindholdet på verifikationsmarken.



Figur 14.22. Nørager mark. Geografisk fordeling af ler- og siltindholdet på verifikationsmarken.



Figur 14.23. Nørager mark. Geografisk fordeling af korreleret relativ udvaskning på verifikationsmarken.



Figur 14.24. Nørager mark. EM38 målinger, boringernes placeringer og grundvandets strømningsretning.



Figur 14.25. Poulstrup. Spredningen i humusindhold i de to profillinier og for marken som helhed.



Figur 14.26. Poulstrup. Spredningen i ler- og siltindhold i de to profillinier og for marken som helhed.



Figur 14.27. Poulstrup. Spredningen i korreleret udvaskning i de to profillinier og for marken som helhed.



Figur 14.28. Poulstrup. Geografisk fordeling af humusindholdet på verifikationsmarken.



Figur 14.29. Poulstrup. Geografisk fordeling af ler- og siltindholdet på verifikationsmarken.



Figur 14.30. Poulstrup. Geografisk fordeling af korreleret relativ udvaskning på verifikationsmarken.



Figur 14.31. Poulstrup. EM38 målinger, boringernes placeringer og grundvandets strømningsretning.

Tabel 14.3. Måleprogram fo	or pesticider p	på verifikationsmar	kerne.
----------------------------	-----------------	---------------------	--------

An	alyserede stoffer	
2,4,5-T	Dicamba	
2,4-D	Dichlobenil	MCPA
2,4-dichlorphenol	Dichlorprop	Mechlorprop
2,6-Dichlorbenzamid (BAM)	Dimethoat	Metamitron
2,6-Dichlorprop	Dinoseb	Methabenzthiazuron
4-chlor-2-methylphenol	Diuron	Metribuzin
4-Chlorprop	DNOC	Metsulfuron methyl
Atrazin	Ethofumesat	Pendimethalin
Bentazon	Fenpropiomorph	Pentachlorphenol
Bromoxynil	Hexazinon	Pirimicarb
Carbofuran	Hydroxyatrazin	Propiconazol
Chloridazon	Hydroxycarbofuran	Propyzamid
Chlorsulfuron	Hydroxysimazin	Simazin
Cyanazin	Hydroxy-terbutylazin	Terbutylazin
Desethylatrazin	Isoproturon	Toxynil
Desethylterbutylazin	Lenacil	Trifluralin
Desisopropylatrazin	Linuron	

**Tabel 14.4**. Anvendte pesticider på verifikationsmarkerne, og angivelse af om der er analyseret for indhold af dem, samt hvorvidt de er fundet ved analysen.

POULSTRUP	NØRAGER MARK
Aktivstoffer	Aktivstoffer
clopyralid	
	pendimethalin
difenzoquat metilsulfat	propyzamid
fenovaprop-p-ethyl	prosulfocarp
alvohosat	terbuthylazin
ioxynil+bromoxynil	tribenuron-methyl
Isoproturon	
metsulforon-methyl	
pendimethalin	
propiconazol+fenpropimorf	
prosulfocarp	
tribenuron-methyl	
FLADERNE BÆK	HELLEVAD
1997-2002	1997-2002
Aktivstoffer	Aktivstoffer
aclonifen	azoxystrobin
diquat-dibromid	bentazon
esfenvalerat	cyprodinil+propiconazol
fluazifop-p-butyl	fluroxypyr
fluroxypyr	ioxynil+bromoxynil
glyphosat	Isoproturon
lambda-cyhalothrin	mcpa+bentazon
linuron	metsulforon-methyl
mancozeb	pendimethalin
mcpa+bentazon	propiconazol+
metribuzin	tribenuron-methyl
propiconazol+fenpropimorf	trifluralin
tribenuron-methyl+thifensulfuron-methyl	

Anvendt ikke analyseret Anvendt ikke fundet Anvendt fundet

Bilag side 208

## Bilag 15. Eksempel på beslutningsstøtte system GEUS: Hans Jørgen Henriksen

Ved hjælp af en strukturel læringsanalyse af strukturer i et datasæt ('structural learning') kan der findes frem til hvilke sammenhænge i datasættet der er mest afgørende for følsomheden overfor udvaskning af pesticid i sandjordsområder.

I projektet er der ved modelsimuleringer skaffet kvantitative oplysninger om hvilke forhold og jordegenskaber der er afgørende for udvaskningen af pesticid. Blandt andet er variabiliteten af jordegenskaberne og korrelationen mellem dem undersøgt. I en idealsituation, hvor værdien af alle jordegenskaber af betydning for pesticidudvaskning er kendt overalt, ville transporten af pesticid gennem den umættede zone kunne beregnes absolut. Med virkelighedens spredte datagrundlag er det åbenbart at dette ikke er muligt, hvorfor der er taget udgangspunkt i en vurdering af, dels hvad der er fundet at være de mest betydningsfulde jordegenskaber, dels i en generalisering af resultaterne.

Undersøgelserne af sandjorde har således vist at det er muligt at karakterisere særligt pesticidfølsomme arealer ved hjælp af oplysninger om et begrænset antal jordegenskaber. Resultaterne viser at indholdet af organisk kulstof, ler og silt i den øverste meter af jordprofilet (indenfor de pedolgiske A-, B- og C-horisonter), kan beskrive hovedparten af jordens følsomhed overfor udvaskning af pesticid, men at der kan være samme følsomhed ved kombinationer af forskellige værdier af jordegenskaber.

Derfor demonstreres der her et beslutningsstøtte system, der kan håndtere den forskellige vægtning af jordegenskaber, idet der benyttes de data fra kvadratnetsprofiler i sandjordsområder, som er blevet brugt til at foretage multivariat korrelation mellem simuleret relativ udvaskning af pesticid og indholdet af organisk kulstof, ler og silt.

Datasættet er analyseret med henblik på at identificere "struktur" (retningsorienterede sammenhænge mellem systemvariable og betingede sandsynlighedstabeller, CPTs). Analysen omfatter:

- Strukturel analyse og læring for at opbygge et Bayesiansk net (BN) bestående af systemvariable og retningsorienterede links (pile)
- Bestemmelse af CPTs for de fastlagte strukturer (BNs) udfra datasæt
- Eksempler på anvendelsen af BNs som beslutningsstøttesystem for identifikation af betydende zoneringskriterier og pesticidsårbare profiler.

## Metode

Strukturer i datasættet kan analyseres ved hjælp af redskabet "Hugin Learning Wizard". Denne algoritme er indbygget i Hugin som er et software der kan anvendes til at konstruere BNs og som på baggrund af Bayes' sætning er i stand til efterfølgende at regne ('propagation') på nettene, givet at en eller flere variable er kendte (f.eks. målte). Der er to af disse algoritmer: en NPC ('Necessary Path Condition')og en PC ('Path condition') algoritme. Sidstnævnte benyttes i det følgende. PC algoritmen fungerer i følgende trin:

- Parvis statistisk analyse af alle variable af om de er uafhængige (undtagen for par af variable som er tillagt en begrænsende betingelse)
- Tilføjelse af retningsløse forbindelser mellem de par af variable, hvor der ikke er fundet nogen betinget uafhængighed. Den resulterende graf med angivelse af retningsløse forbindelser kaldes "skelettet" i de strukturelle sammenhænge.
- Der identificeres herefter sammenstød ('colliders'). Sammenstød er par af retningsbestemte links der mødes i et knudepunkt (systemvariabel).
- I næste trin retningsbestemmes de links, hvis retning kan udledes på baggrund af de betingede uafhængigheder og identificerede sammenstød.
- Til sidst genereres retninger til de resterende retningsløse sammenhænge, idet det sikres at retningsbestemte links ikke går i ring (en forudsætning som brugen af BNs skal opfylde for at beregningsalgoritmen kan finde en løsning).

Normalt vil PC algoritmen ikke være i stand til at fastlægge retning på alle variable, hvorfor nogle forbindelser (pile retninger) vil blive genereret tilfældigt. Det må derfor bedømmes om nogle af de strukturelle sammenhænge, som er fundet, virker ulogiske. Hvis dette er tilfældet kan man forsøge at gentage den strukturel sammenhængsanalyse, idet det er muligt *a priori* selv at definere sammenhænge og retninger, udfra en ekspertviden om mest logiske eller realistiske årsagvirkningssammenhænge.

Det er dokumenteret at traditionelle strukturelle læringsalgoritmer med begrænsende betingelser giver korrekte sammenhænge under forudsætning af at datasætttene er uendeligt store, at testene (målinger) er perfekte og at der ikke forekommer retningsorienterede links som går i ring (der kræves en såkaldt 'directed acyclic graph', DAG). Hvis datasættene derimod er begrænsede, giver disse læringsalgoritmer imidlertid ofte for mange udsagn om betingede uafhængigheder, og kan fejlagtigt undlade at identificere vigtige sammenhænge. Der skal ofte mange tusind datapunkter til en sikker bestemmelse af en BN struktur alene ud fra data, men kombineret med apriori definerede sammenhænge/links udfra ekspertviden, kan et mere begrænset datasæt som f.eks. kvadratnetsdataene give brugbare strukturer.

PC algoritmen arbejder relativt hurtigt, men for den langsommere NPC algoritmen er den resulterende graf generelt en bedre beskrivelse af de betingede uafhængighedsrelationer i data. Dette gør sig især gældende for små datasæt hvor NPC algoritmen bør foretrækkes.

De første trin i en praktisk analyse af strukturel sammenhæng består i:

- Udvælgelse af systemvariable og data som skal indgå i analysen
- Definition af tilstande for hver enkelt systemvariabel og organisering af data i samlede datasæt f.eks. udfra de intervaller som definerer de forskellige tilstande (se Figur 15.1)
- Analyse af retningsbestemte links og tilhørende CPT'er, se Figur 15.2, 15.3 og 15.4)

🔀 View I	Data									;
					Viewing	from case O	to case 1	00		
Organic co	on Clay	Silt	Coarse sil	t Fine sand 1	Fine sand 2	2 Coarse san	d pH	rel pesticide		
0 - 10	60 - 100	40 - 100	200 - 600	100 - 300	150 - 300	350 - 750	6-7	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	10 - 20	15 - 30	40 - 100	150 - 300	750 - 1500	4.5 - 5.5	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	100 - 300	200 - 600	100 - 300	150 - 300	350 - 750	7-9	0 - 0.2		
25 - 100	100 - 250	40 - 100	60 - 200	100 - 300	150 - 300	350 - 750	4.5 - 5.5	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	100 - 300	60 - 200	100 - 300	150 - 300	350 - 750	7 - 9	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	20 - 40	60 - 200	40 - 100	50 - 150	750 - 1500	6-7	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	100 - 300	200 - 600	300 - 700	50 - 150	200 - 350	5.5 - 6	0 - 0.2		
10 - 18	100 - 250	100 - 300	200 - 600	100 - 300	150 - 300	200 - 350	7 - 9	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	100 - 300	200 - 600	100 - 300	150 - 300	350 - 750	7-9	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	100 - 300	60 - 200	100 - 300	150 - 300	200 - 350	6-7	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	100 - 300	60 - 200	100 - 300	150 - 300	350 - 750	7-9	0 - 0.2		
18 - 25	60 - 100	100 - 300	200 - 600	100 - 300	150 - 300	200 - 350	7-9	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	100 - 300	60 - 200	100 - 300	150 - 300	200 - 350	5.5 - 6	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	100 - 300	200 - 600	300 - 700	150 - 300	350 - 750	6-7	0 - 0.2		
25 - 100	40 - 60	10 - 20	30 - 60	40 - 100	150 - 300	750 - 1500	6 - 7	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	100 - 300	200 - 600	100 - 300	150 - 300	200 - 350	5.5 - 6	0 - 0.2		
10 - 18	60 - 100	100 - 300	200 - 600	300 - 700	150 - 300	200 - 350	5.5 - 6	0 - 0.2		
10 - 18	100 - 250	100 - 300	60 - 200	100 - 300	150 - 300	350 - 750	4.5 - 5.5	0 - 0.2		
10 - 18	100 - 250	100 - 300	200 - 600	300 - 700	150 - 300	350 - 750	6-7	0 - 0.2		
10 - 18	60 - 100	100 - 300	200 - 600	300 - 700	150 - 300	200 - 350	6-7	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	20 - 40	200 - 600	100 - 300	150 - 300	350 - 750	5.5 - 6	0 - 0.2		
25 - 100	40 - 60	10 - 20	30 - 60	40 - 100	50 - 150	750 - 1500	4.5 - 5.5	0 - 0.2		
18 - 25	60 - 100	40 - 100	200 - 600	300 - 700	150 - 300	350 - 750	5.5 - 6	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	100 - 300	200 - 600	100 - 300	150 - 300	350 - 750	6-7	0 - 0.2		
18 - 25	60 - 100	100 - 300	60 - 200	100 - 300	150 - 300	350 - 750	6-7	0 - 0.2		
25 - 100	30 - 40	20 - 40	60 - 200	40 - 100	50 - 150	750 - 1500	4.5 - 5.5	0 - 0.2		
10 - 18	60 - 100	40 - 100	200 - 600	300 - 700	300 - 700	200 - 350	7-9	0 - 0.2		
10 - 18	100 - 250	100 - 300	60 - 200	100 - 300	300 - 700	350 - 750	7-9	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	40 - 100	200 - 600	300 - 700	150 - 300	200 - 350	6 - 7	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	100 - 300	60 - 200	100 - 300	150 - 300	350 - 750	5.5 - 6	0 - 0.2		
25 - 100	100 - 250	40 - 100	60 - 200	100 - 300	50 - 150	350 - 750	6 - 7	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	40 - 100	60 - 200	100 - 300	150 - 300	350 - 750	6-7	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	40 - 100	60 - 200	100 - 300	150 - 300	200 - 350	6-7	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	40 - 100	60 - 200	100 - 300	150 - 300	750 - 1500	5.5 - 6	0 - 0.2		
10 - 18	100 - 250	100 - 300	200 - 600	100 - 300	150 - 300	350 - 750	5.5 - 6	0 - 0.2		
25 - 100	40 - 60	40 - 100	60 - 200	100 - 300	300 - 700	350 - 750	5.5 - 6	0 - 0.2		
10 - 18	100 - 250	40 - 100	60 - 200	100 - 300	150 - 300	350 - 750	5.5 - 6	0 - 0.2		
					Reset	More Da	ta Clo	se		
			,		(				Conflict: +	ð
Start	🖄 🖏 🍝	🕑 🛛 🔁 M	icrosoft	💾 Total Co	m 🛛 🎇 Hu	ıgin Re [	🖳 Microsof	tP	<b>@{{}</b> \$\${} <b>{</b> }	14:

• Figur 15.1. Første skridt i den strukturel analyse er at udvælge systemvariable (organisk stof, ler, silt, groft silt, fint sand 1, fint sand 2, groft sand, pH og relativ pesticidudvaskning) og gruppere data i tilstande udfra fastlagte intervaller (f.eks pH 4.5-5.5, 5.5-6, 6-7 og 7-9). Konkret inddeles data for hver variabel her i fire intervaller. Dette er gjort interaktivt ved hjælp af "Hugin", og med det viste resultat. Valgte af intervaller har stor betydning for den strukturelle læring.

Indledningsvis vises blot variablene (figur 15.2), hvorefter man som bruger kan tilføje kendte afhængigheder eller uafhængigheder. Hugins forslag til sammenhænge afhænger af de valgte intervaller, hvorfor programmet fx. vil kunne foreslå usandsynlige sammenhænge mellem siltog lerindhold. I sådanne tilfælde må brugeren selv tilføje en uafhængighed mellem variablene. En anden mulighed er at brugeren ønsker at analysere betydningen af nogle parametre mens relationen mellem andre fastholdes (fx. kan de vigtige parametre organisk kulstof, ler og silt fastholdes i en relation til simuleret pesticidudvaskning mens betydningen af de øvrige parametre undersøges).

Med det relativt lille antal datasæt på ca. 150 kvadratnetsprofiler kan den statistiske analyse resultere i noget tilfældige sammenhænge frem for logiske og reelle. Derfor bør resultaterne

bedømmes kritisk undervejs mens strukturen fastlægges, evt. gennem gentagelser af operationerne i den strukturelle læring med nye forudsætninger (illustreret i figur 15.3 og 15.5), indtil et tilfredsstillende resultat foreligger, figur 15.4.

🛿 🔀 Learning Wizard			×
	Structural Constraints Please specify any known dependences BBBB	or independences in the data set. $\overline{\tau}$	
	Organic co	Clay	Silt
	Coarse silt	Fine sand 1	Fine sand 2
	Coarse sa	рН	rel pesticid
Scaled to 173%			
Help			< Back Next > Cancel
🖉 Start 🛛 🧔 😭 🏹	📀 🗌 🌉 Microsoft 🛛 💾 Total Com	Return Ro	

**Figur 15.2**. Illustration af systemvariablene før der er fastlagt sammenhænge eller uafhængigheder udfra foreliggende datasæt.



**Figur 15.3**. Programmet viser stærke retningsbestemte links (grå pile) hvor der udfra datasæt er stor årsag-virknings afhængighed mellem nogle af variablene, mens der for øvrige sammenhænge må foretages en manuel tilføjelse af retningsbestemte links.



**Figur 15.4**. Det resulterende BN efter at alle retningsbestemte links er definerede enten udfra informationsværdien i datasæt af læringsrutinen i Hugin eller ved manuelle apriori definitioner af brugeren. Der er ingen sammenhænge til pH fordi pH tilsyneladende varierer uafhængigt af alle øvrige variable.



Figur 15.5. Variablen 'rel pesticid...' (relativ pesticid udvaskning) har to styrende "ophavsparametre": 'Silt' and 'Organic co...' (organisk kulstof). Nogle af sammenhængene er ret svage

(hvilket også fremgår af tælleren "Experience" i CPT'en). CPT'en ville antagelig kunne forbedres ved også manuelt at indlægge sandsynligheder udfra ekspert viden, f.eks. der hvor tælleren viser at CPT-kolonne er baseret på et fåtal af datasæt (f.eks. organisk stof i intervallet 0-10 og silt 100-300 som har 'experience' = 0 => p = 0.25 for de fire tilstande).

Eksempler på anvendelse af BBN som beslutningsstøtte system med henblik på beskyttelse af grundvand mod udvaskende pesticid.



**Figur 15.6 A og B.** To forskellige resultater af strukturelle sammenhænge i data. I A er der tre parametre der har betydning for den relative pesticid udvaskning mens der i B er fire influerende parametre. pH har ikke direkte betydning hverken i A eller B. Dette skyldes antagelig at udvaskningen er fastlagt på grundlag af jordens bindings- og transportegenskaber, mens der

ikke er taget hensyn til den mere pH-afhængige nedbrydning i modelsimuleringerne (MA-CRO).

Det første eksempel, A i figur 15.6, er BN etableret ved en strukturel læring, hvor der er tillagt afhængigheder mellem hver af systemvariablene: 'organisk stof', 'ler' og 'silt' og 'relativ pesticidudvaskning'. Alle andre sammenhænge er blevet bestemt af Hugins strukturelle læringsalgoritme og under sideløbende interaktive input fra eksperter. I det andet eksempel, B i figur 15.6, er BN etableret under antagelse af uafhængighed mellem 'silt' og 'ler', støttet med bestemmelser ved strukturel læring af Hugin støtte af ekspertudsagn vedrørende hvilke sammenhænge, der bør inkluderes og hvilken retning de har.

I eksempel A i figur 15.6 er der kun de tre parametre 'organisk stof', 'ler' og 'silt', der har direkte indflydelse på den relative simulerede udvaskning af pesticid. 'ler' og 'silt er imidlertid ikke uafhængige af hinanden, idet lerindholdet influerer på siltindholdet, som vist med pilen. Siltindholdet influerer på andre parametre: 'fint sand 1 & 2', 'groft sand' og 'groft sand 11'. Da disse variable er forholdsvis nemme at måle vil oplysninger om dem eventuelt kunne erstatte data vedrørende siltindholdet.

I eksemplet, figur 15.6 B, er der ingen sammenhæng mellem indholdet af 'Ler' og 'Silt'. Under denne forudsætning resulterer strukturanalysen i en mere kompleks sammenhæng, hvor fire variable har indflydelse på den relative pesticidudvaskning. Også i dette eksempel viser analysen at 'silt', 'ler' og 'organisk stof' er væsentlige for forudsigelse af udvaskningen og dermed væsentlige kortlægningsparametre, men eksempel B viser yderligere at 'groft sand 1' variablen må tages i betragtning, når strukturanalysen forudskikker at der ikke er indbyrdes afhængighed mellem parametrene 'ler' and 'silt'. Variablen 'groft silt' er afhængig af både 'ler' og 'silt', og influerer selv på variablen 'fint sand 1'.

Figur 15.7 viser resultatet af den strukturelle analyse (systemvariable og retningsbestemte links) og resulterende sandsynlighedsfordelinger for samtlige variable i nettene for eksemplerne A and B (figur 15.6). Der kan nu eksperimenteres med følsomheden overfor ændringer fra at en variabel er usikkert bestemt i form af en sandsynlighedsfordeling for at antage en af de forskellige intervaller, til at tilstanden er kendt f.eks. udfra en måling og følgeeffekterne heraf for alle andre variable kan så beregnes ved hjælp af Hugin, se eksperimenter for eksempel A i figur 15.8 – 15.10.

Hvis for eksempel tilstanden for variablen 'silt' (figur 15.8) udfra målinger kan fastsættes til at ligge i det laveste interval (10-20 kg/m<sup>2</sup>) og tilstanden på 'organisk stof' til det næst laveste interval (10-18 kg/m<sup>2</sup>) så medfører det en form for alarm, hvor der er 61,8% risiko for at den relative simulerede pesticidudvaskning fra jordtyper, hvor systemvariable har de valgte tilstande (intervaller), ligger i den mest sårbare klasse, og 23,5% risiko for at sårbarheden af jordtypen ligger i den næsthøjeste klasse. Figuren viser også at de tillagte 'silt'-værdier har ændret sandsynlighedsfordelinger for 'ler', 'fint sand 1', 'groft sand 1' og 'groft silt'. Kun den oprindelige fordeling af 'fint sand 2' er uændret.

Alternativt kan BN i eksempel A bruges til at undersøge den afledte effekt i de øvrige variable ved en bestemmelse af de parametre som er lettest at måle i laboratoriet ('fint sand 1 & 2', 'groft sand 1' og 'groft silt'), figur 15.9. I det viste eksempel influerer ændringen alle variable undtagen 'organisk stof'.



**Figur 15.7 A og B**. Strukturel læring (systemvariable og retningsbestemte links) og simulerede sandsynlighedsfordelinger for tilstande for de to eksempler i figur 6.26. De jordprofiler som er mest sårbare overfor udvaskning af pesticid ligger i intervallet 0.64-1.01 (9,9 % af profilerne i eksempel A). Også følsomme, om end i mindre grad, er profiler som hører til intervallet 0.43-0.64 (9.4 % i eksempel A). Der er altså i denne beregning 18 % af de analyserede profiler som falder i de to mest pesticidfølsomme kategorier.

Den relative pesticidudvaskningsindikator ('rel pesticide leaching') viser, med oplysninger som er lagt ind i den strukturelle analyse, at der kun er ringe risiko for at jorden er følsom overfor udvaskning (= 0.01 eller 1 pct.). Der er således basis for at beslutte, hvorvidt en sådan lav procentvis risiko er acceptabel eller om der skal indsamles yderligere dokumentation om enten 'ler' eller 'organisk stof' for at gøre sandsynligheden for at jordtypen er meget sårbar endnu mindre end 1 pct.



**Figur 15.8**. Eksempel på hvordan der kan eksperimenteres med effekten af at tilføje evidens (kendskab til udvalgte systemvariable udfra fx målinger - røde bjælker) og opdatering af øvrige sandsynligheder i nettet og prognosen for sårbarheden overfor pesticid udvaskning med denne sikre viden (med udgangspunkt i BN for eksempel A).



**Figur 15.9**. BN for eksempel A hvor der er tillagt kendt tilstand for 'groft sand 1', 'fint sand 2', 'fint sand 1' og 'groft silt'. Effekten er at der er 41,4 % chance for at 'ler'indholdet ligger i intervallet 80-100 og 58,6 % chance for at det ligger i intervallet 100-250. De simulerede forhold i dette eksperiment medfører dermed at der er ringe risiko for udvaskning af pesticid.

Endelig er det muligt at indføje en sandsynlighedsfordeling (likelihood) for en eller flere udvalgte systemvariable i BN og analysere effekten på de øvrige variable under denne reviderede antagelse. Dette er eksemplificeret i figur 15.10 for BBN i eksempel A, idet det antages at der er det højeste eller næsthøjeste niveau af relativ pesticidudvaskning (enten 0.43-0.64 eller 0.84-1). Her får man et indtryk af hvilke 'intervaller' der er mest sandsynlige for de øvrige variable f.eks. 'organisk stof', 'ler' og 'silt' som i dette tilfælde har størst sandsynlighed for at være i næstlaveste interval (56 - 64 %) for de tre variable.



**Figur 15.10**. Eksempel på effekten af at indføje likelihood fordeling (fifty – fifty for næsthøjeste og højeste sårbarhedsinterval) (BN for eksempel A). Sammenfatning vedrørende anvendelse af strukturel analyse som beslutningsværktøj

Eksperimenterne med BN og algoritmen for strukturel læring i dette bilag har haft til formål at demonstrere et muligt værktøj til beslutningsstøtte. Eksemplerne er således ikke projektets resultater. De præsenterede BN-eksempler (A og B) er to alternativer ud af et større antal forsøg med forskellige sammenhænge/manglende sammenhænge. I tilfælde hvor der ikke aktivt indlægges afhængigheder mellem variable resulterer de strukturelle analyser i at to ('silt' og 'organisk stof') eller tre ('silt', 'ler' og 'organisk stof') variable til beskrivelse af relativ pesticid udvaskning, afhængig af de tillagte værdier og forbindelser/manglende forbindelser og afhængighedsretninger.

Eksemplerne er beregnet med PC algoritmen selv om NPC algoritmen muligvis ville kunne give et endnu bedre resultat på grund af det relativ begrænsede datagrundlag (150 datasæt).

De BNs som er udviklet her bør vurderes nøjere forud for en eventuel praktisk anvendelse, idet CPT'erne for nogle af sammenhængene er bestemt på et ret svagt grundlag (baseret på <5 oplysninger). Trods dette forbehold vurderes BNs imidlertid at være et fleksibelt værktøj til at analysere pesticidudvaskning idet der er mulighed for at trække på dels vidensgrundlaget fra kvadratnetsprofilerne og samtidig opdatere nettene med nye målinger fra et konkret område. Hertil kommer at kvalificerede erfaringer også kan indbygges i form af likelihood. BN ud-

gør dermed et anvendeligt værktøj til at afdække og formidle et bedste estimat for pesticidsårbarheden, og samtidig illustrere usikkerheder på dette skøn.

Det er af særlig betydning i forbindelse med zonering af særligt pesticidfølsomme arealer at BN eksplicit kan kvantificere og formidle usikkerhed. Derved er det muligt at bedømme den relative udvaskning af pesticid på grundlag af alle data indenfor et givet areal og i tilslutning hertil at kombinere denne vurdering med andre datasæt fra de landsdækkende kvadratnetsprofiler og yderligere parametre (fx. landbrugspraksis, nedbrydning af pesticider, udbringning af pesticider, grundvands moniteringsdata og socio-økonomiske forhold).

BNs er frem alt velegnet som et dialogværktøj der kan give overblik og integration, og samtidig påpege hvilke yderligere data der kan være behov for at indsamle

Bilag side 220

## Bilag 15. Eksempel på beslutningsstøtte system GEUS: Hans Jørgen Henriksen

Ved hjælp af en strukturel læringsanalyse af strukturer i et datasæt ('structural learning') kan der findes frem til hvilke sammenhænge i datasættet der er mest afgørende for følsomheden overfor udvaskning af pesticid i sandjordsområder.

I projektet er der ved modelsimuleringer skaffet kvantitative oplysninger om hvilke forhold og jordegenskaber der er afgørende for udvaskningen af pesticid. Blandt andet er variabiliteten af jordegenskaberne og korrelationen mellem dem undersøgt. I en idealsituation, hvor værdien af alle jordegenskaber af betydning for pesticidudvaskning er kendt overalt, ville transporten af pesticid gennem den umættede zone kunne beregnes absolut. Med virkelighedens spredte datagrundlag er det åbenbart at dette ikke er muligt, hvorfor der er taget udgangspunkt i en vurdering af, dels hvad der er fundet at være de mest betydningsfulde jordegenskaber, dels i en generalisering af resultaterne.

Undersøgelserne af sandjorde har således vist at det er muligt at karakterisere særligt pesticidfølsomme arealer ved hjælp af oplysninger om et begrænset antal jordegenskaber. Resultaterne viser at indholdet af organisk kulstof, ler og silt i den øverste meter af jordprofilet (indenfor de pedolgiske A-, B- og C-horisonter), kan beskrive hovedparten af jordens følsomhed overfor udvaskning af pesticid, men at der kan være samme følsomhed ved kombinationer af forskellige værdier af jordegenskaber.

Derfor demonstreres der her et beslutningsstøtte system, der kan håndtere den forskellige vægtning af jordegenskaber, idet der benyttes de data fra kvadratnetsprofiler i sandjordsområder, som er blevet brugt til at foretage multivariat korrelation mellem simuleret relativ udvaskning af pesticid og indholdet af organisk kulstof, ler og silt.

Datasættet er analyseret med henblik på at identificere "struktur" (retningsorienterede sammenhænge mellem systemvariable og betingede sandsynlighedstabeller, CPTs). Analysen omfatter:

- Strukturel analyse og læring for at opbygge et Bayesiansk net (BN) bestående af systemvariable og retningsorienterede links (pile)
- Bestemmelse af CPTs for de fastlagte strukturer (BNs) udfra datasæt
- Eksempler på anvendelsen af BNs som beslutningsstøttesystem for identifikation af betydende zoneringskriterier og pesticidsårbare profiler.

## Metode

Strukturer i datasættet kan analyseres ved hjælp af redskabet "Hugin Learning Wizard". Denne algoritme er indbygget i Hugin som er et software der kan anvendes til at konstruere BNs og som på baggrund af Bayes' sætning er i stand til efterfølgende at regne ('propagation') på nettene, givet at en eller flere variable er kendte (f.eks. målte). Der er to af disse algoritmer: en NPC ('Necessary Path Condition')og en PC ('Path condition') algoritme. Sidstnævnte benyttes i det følgende. PC algoritmen fungerer i følgende trin:

- Parvis statistisk analyse af alle variable af om de er uafhængige (undtagen for par af variable som er tillagt en begrænsende betingelse)
- Tilføjelse af retningsløse forbindelser mellem de par af variable, hvor der ikke er fundet nogen betinget uafhængighed. Den resulterende graf med angivelse af retningsløse forbindelser kaldes "skelettet" i de strukturelle sammenhænge.
- Der identificeres herefter sammenstød ('colliders'). Sammenstød er par af retningsbestemte links der mødes i et knudepunkt (systemvariabel).
- I næste trin retningsbestemmes de links, hvis retning kan udledes på baggrund af de betingede uafhængigheder og identificerede sammenstød.
- Til sidst genereres retninger til de resterende retningsløse sammenhænge, idet det sikres at retningsbestemte links ikke går i ring (en forudsætning som brugen af BNs skal opfylde for at beregningsalgoritmen kan finde en løsning).

Normalt vil PC algoritmen ikke være i stand til at fastlægge retning på alle variable, hvorfor nogle forbindelser (pile retninger) vil blive genereret tilfældigt. Det må derfor bedømmes om nogle af de strukturelle sammenhænge, som er fundet, virker ulogiske. Hvis dette er tilfældet kan man forsøge at gentage den strukturel sammenhængsanalyse, idet det er muligt *a priori* selv at definere sammenhænge og retninger, udfra en ekspertviden om mest logiske eller realistiske årsagvirkningssammenhænge.

Det er dokumenteret at traditionelle strukturelle læringsalgoritmer med begrænsende betingelser giver korrekte sammenhænge under forudsætning af at datasætttene er uendeligt store, at testene (målinger) er perfekte og at der ikke forekommer retningsorienterede links som går i ring (der kræves en såkaldt 'directed acyclic graph', DAG). Hvis datasættene derimod er begrænsede, giver disse læringsalgoritmer imidlertid ofte for mange udsagn om betingede uafhængigheder, og kan fejlagtigt undlade at identificere vigtige sammenhænge. Der skal ofte mange tusind datapunkter til en sikker bestemmelse af en BN struktur alene ud fra data, men kombineret med apriori definerede sammenhænge/links udfra ekspertviden, kan et mere begrænset datasæt som f.eks. kvadratnetsdataene give brugbare strukturer.

PC algoritmen arbejder relativt hurtigt, men for den langsommere NPC algoritmen er den resulterende graf generelt en bedre beskrivelse af de betingede uafhængighedsrelationer i data. Dette gør sig især gældende for små datasæt hvor NPC algoritmen bør foretrækkes.

De første trin i en praktisk analyse af strukturel sammenhæng består i:

- Udvælgelse af systemvariable og data som skal indgå i analysen
- Definition af tilstande for hver enkelt systemvariabel og organisering af data i samlede datasæt f.eks. udfra de intervaller som definerer de forskellige tilstande (se Figur 15.1)
- Analyse af retningsbestemte links og tilhørende CPT'er, se Figur 15.2, 15.3 og 15.4)

🔀 View I	Data									;
					Viewing	from case O	to case 1	00		
Organic co	on Clay	Silt	Coarse sil	t Fine sand 1	Fine sand 2	2 Coarse san	d pH	rel pesticide		
0 - 10	60 - 100	40 - 100	200 - 600	100 - 300	150 - 300	350 - 750	6-7	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	10 - 20	15 - 30	40 - 100	150 - 300	750 - 1500	4.5 - 5.5	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	100 - 300	200 - 600	100 - 300	150 - 300	350 - 750	7-9	0 - 0.2		
25 - 100	100 - 250	40 - 100	60 - 200	100 - 300	150 - 300	350 - 750	4.5 - 5.5	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	100 - 300	60 - 200	100 - 300	150 - 300	350 - 750	7 - 9	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	20 - 40	60 - 200	40 - 100	50 - 150	750 - 1500	6-7	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	100 - 300	200 - 600	300 - 700	50 - 150	200 - 350	5.5 - 6	0 - 0.2		
10 - 18	100 - 250	100 - 300	200 - 600	100 - 300	150 - 300	200 - 350	7 - 9	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	100 - 300	200 - 600	100 - 300	150 - 300	350 - 750	7-9	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	100 - 300	60 - 200	100 - 300	150 - 300	200 - 350	6-7	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	100 - 300	60 - 200	100 - 300	150 - 300	350 - 750	7-9	0 - 0.2		
18 - 25	60 - 100	100 - 300	200 - 600	100 - 300	150 - 300	200 - 350	7-9	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	100 - 300	60 - 200	100 - 300	150 - 300	200 - 350	5.5 - 6	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	100 - 300	200 - 600	300 - 700	150 - 300	350 - 750	6-7	0 - 0.2		
25 - 100	40 - 60	10 - 20	30 - 60	40 - 100	150 - 300	750 - 1500	6 - 7	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	100 - 300	200 - 600	100 - 300	150 - 300	200 - 350	5.5 - 6	0 - 0.2		
10 - 18	60 - 100	100 - 300	200 - 600	300 - 700	150 - 300	200 - 350	5.5 - 6	0 - 0.2		
10 - 18	100 - 250	100 - 300	60 - 200	100 - 300	150 - 300	350 - 750	4.5 - 5.5	0 - 0.2		
10 - 18	100 - 250	100 - 300	200 - 600	300 - 700	150 - 300	350 - 750	6-7	0 - 0.2		
10 - 18	60 - 100	100 - 300	200 - 600	300 - 700	150 - 300	200 - 350	6-7	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	20 - 40	200 - 600	100 - 300	150 - 300	350 - 750	5.5 - 6	0 - 0.2		
25 - 100	40 - 60	10 - 20	30 - 60	40 - 100	50 - 150	750 - 1500	4.5 - 5.5	0 - 0.2		
18 - 25	60 - 100	40 - 100	200 - 600	300 - 700	150 - 300	350 - 750	5.5 - 6	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	100 - 300	200 - 600	100 - 300	150 - 300	350 - 750	6-7	0 - 0.2		
18 - 25	60 - 100	100 - 300	60 - 200	100 - 300	150 - 300	350 - 750	6-7	0 - 0.2		
25 - 100	30 - 40	20 - 40	60 - 200	40 - 100	50 - 150	750 - 1500	4.5 - 5.5	0 - 0.2		
10 - 18	60 - 100	40 - 100	200 - 600	300 - 700	300 - 700	200 - 350	7-9	0 - 0.2		
10 - 18	100 - 250	100 - 300	60 - 200	100 - 300	300 - 700	350 - 750	7-9	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	40 - 100	200 - 600	300 - 700	150 - 300	200 - 350	6 - 7	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	100 - 300	60 - 200	100 - 300	150 - 300	350 - 750	5.5 - 6	0 - 0.2		
25 - 100	100 - 250	40 - 100	60 - 200	100 - 300	50 - 150	350 - 750	6 - 7	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	40 - 100	60 - 200	100 - 300	150 - 300	350 - 750	6-7	0 - 0.2		
25 - 100	60 - 100	40 - 100	60 - 200	100 - 300	150 - 300	200 - 350	6-7	0 - 0.2		
18 - 25	100 - 250	40 - 100	60 - 200	100 - 300	150 - 300	750 - 1500	5.5 - 6	0 - 0.2		
10 - 18	100 - 250	100 - 300	200 - 600	100 - 300	150 - 300	350 - 750	5.5 - 6	0 - 0.2		
25 - 100	40 - 60	40 - 100	60 - 200	100 - 300	300 - 700	350 - 750	5.5 - 6	0 - 0.2		
10 - 18	100 - 250	40 - 100	60 - 200	100 - 300	150 - 300	350 - 750	5.5 - 6	0 - 0.2		
					Reset	More Da	ta Clo	se		
			,		(				Conflict: +	ð
Start	🖄 🖏 🍝	🕑 🛛 🔁 M	icrosoft	💾 Total Co	m 🛛 🎇 Hu	ıgin Re [	🖳 Microsof	tP	<b>@{{}</b> \$\${} <b>{</b> }	14:

• Figur 15.1. Første skridt i den strukturel analyse er at udvælge systemvariable (organisk stof, ler, silt, groft silt, fint sand 1, fint sand 2, groft sand, pH og relativ pesticidudvaskning) og gruppere data i tilstande udfra fastlagte intervaller (f.eks pH 4.5-5.5, 5.5-6, 6-7 og 7-9). Konkret inddeles data for hver variabel her i fire intervaller. Dette er gjort interaktivt ved hjælp af "Hugin", og med det viste resultat. Valgte af intervaller har stor betydning for den strukturelle læring.

Indledningsvis vises blot variablene (figur 15.2), hvorefter man som bruger kan tilføje kendte afhængigheder eller uafhængigheder. Hugins forslag til sammenhænge afhænger af de valgte intervaller, hvorfor programmet fx. vil kunne foreslå usandsynlige sammenhænge mellem siltog lerindhold. I sådanne tilfælde må brugeren selv tilføje en uafhængighed mellem variablene. En anden mulighed er at brugeren ønsker at analysere betydningen af nogle parametre mens relationen mellem andre fastholdes (fx. kan de vigtige parametre organisk kulstof, ler og silt fastholdes i en relation til simuleret pesticidudvaskning mens betydningen af de øvrige parametre undersøges).

Med det relativt lille antal datasæt på ca. 150 kvadratnetsprofiler kan den statistiske analyse resultere i noget tilfældige sammenhænge frem for logiske og reelle. Derfor bør resultaterne

bedømmes kritisk undervejs mens strukturen fastlægges, evt. gennem gentagelser af operationerne i den strukturelle læring med nye forudsætninger (illustreret i figur 15.3 og 15.5), indtil et tilfredsstillende resultat foreligger, figur 15.4.

🛿 🔀 Learning Wizard			×
	Structural Constraints Please specify any known dependences BBBB	or independences in the data set. $\overline{\tau}$	
	Organic co	Clay	Silt
	Coarse silt	Fine sand 1	Fine sand 2
	Coarse sa	рН	rel pesticid
Scaled to 173%			
Help			< Back Next > Cancel
🖉 Start 🛛 🧔 😭 🏹	📀 🗌 🌉 Microsoft 🛛 💾 Total Com	Return Ro	

**Figur 15.2**. Illustration af systemvariablene før der er fastlagt sammenhænge eller uafhængigheder udfra foreliggende datasæt.



**Figur 15.3**. Programmet viser stærke retningsbestemte links (grå pile) hvor der udfra datasæt er stor årsag-virknings afhængighed mellem nogle af variablene, mens der for øvrige sammenhænge må foretages en manuel tilføjelse af retningsbestemte links.



**Figur 15.4**. Det resulterende BN efter at alle retningsbestemte links er definerede enten udfra informationsværdien i datasæt af læringsrutinen i Hugin eller ved manuelle apriori definitioner af brugeren. Der er ingen sammenhænge til pH fordi pH tilsyneladende varierer uafhængigt af alle øvrige variable.



Figur 15.5. Variablen 'rel pesticid...' (relativ pesticid udvaskning) har to styrende "ophavsparametre": 'Silt' and 'Organic co...' (organisk kulstof). Nogle af sammenhængene er ret svage

(hvilket også fremgår af tælleren "Experience" i CPT'en). CPT'en ville antagelig kunne forbedres ved også manuelt at indlægge sandsynligheder udfra ekspert viden, f.eks. der hvor tælleren viser at CPT-kolonne er baseret på et fåtal af datasæt (f.eks. organisk stof i intervallet 0-10 og silt 100-300 som har 'experience' = 0 => p = 0.25 for de fire tilstande).

Eksempler på anvendelse af BBN som beslutningsstøtte system med henblik på beskyttelse af grundvand mod udvaskende pesticid.



**Figur 15.6 A og B.** To forskellige resultater af strukturelle sammenhænge i data. I A er der tre parametre der har betydning for den relative pesticid udvaskning mens der i B er fire influerende parametre. pH har ikke direkte betydning hverken i A eller B. Dette skyldes antagelig at udvaskningen er fastlagt på grundlag af jordens bindings- og transportegenskaber, mens der

ikke er taget hensyn til den mere pH-afhængige nedbrydning i modelsimuleringerne (MA-CRO).

Det første eksempel, A i figur 15.6, er BN etableret ved en strukturel læring, hvor der er tillagt afhængigheder mellem hver af systemvariablene: 'organisk stof', 'ler' og 'silt' og 'relativ pesticidudvaskning'. Alle andre sammenhænge er blevet bestemt af Hugins strukturelle læringsalgoritme og under sideløbende interaktive input fra eksperter. I det andet eksempel, B i figur 15.6, er BN etableret under antagelse af uafhængighed mellem 'silt' og 'ler', støttet med bestemmelser ved strukturel læring af Hugin støtte af ekspertudsagn vedrørende hvilke sammenhænge, der bør inkluderes og hvilken retning de har.

I eksempel A i figur 15.6 er der kun de tre parametre 'organisk stof', 'ler' og 'silt', der har direkte indflydelse på den relative simulerede udvaskning af pesticid. 'ler' og 'silt er imidlertid ikke uafhængige af hinanden, idet lerindholdet influerer på siltindholdet, som vist med pilen. Siltindholdet influerer på andre parametre: 'fint sand 1 & 2', 'groft sand' og 'groft sand 11'. Da disse variable er forholdsvis nemme at måle vil oplysninger om dem eventuelt kunne erstatte data vedrørende siltindholdet.

I eksemplet, figur 15.6 B, er der ingen sammenhæng mellem indholdet af 'Ler' og 'Silt'. Under denne forudsætning resulterer strukturanalysen i en mere kompleks sammenhæng, hvor fire variable har indflydelse på den relative pesticidudvaskning. Også i dette eksempel viser analysen at 'silt', 'ler' og 'organisk stof' er væsentlige for forudsigelse af udvaskningen og dermed væsentlige kortlægningsparametre, men eksempel B viser yderligere at 'groft sand 1' variablen må tages i betragtning, når strukturanalysen forudskikker at der ikke er indbyrdes afhængighed mellem parametrene 'ler' and 'silt'. Variablen 'groft silt' er afhængig af både 'ler' og 'silt', og influerer selv på variablen 'fint sand 1'.

Figur 15.7 viser resultatet af den strukturelle analyse (systemvariable og retningsbestemte links) og resulterende sandsynlighedsfordelinger for samtlige variable i nettene for eksemplerne A and B (figur 15.6). Der kan nu eksperimenteres med følsomheden overfor ændringer fra at en variabel er usikkert bestemt i form af en sandsynlighedsfordeling for at antage en af de forskellige intervaller, til at tilstanden er kendt f.eks. udfra en måling og følgeeffekterne heraf for alle andre variable kan så beregnes ved hjælp af Hugin, se eksperimenter for eksempel A i figur 15.8 – 15.10.

Hvis for eksempel tilstanden for variablen 'silt' (figur 15.8) udfra målinger kan fastsættes til at ligge i det laveste interval (10-20 kg/m<sup>2</sup>) og tilstanden på 'organisk stof' til det næst laveste interval (10-18 kg/m<sup>2</sup>) så medfører det en form for alarm, hvor der er 61,8% risiko for at den relative simulerede pesticidudvaskning fra jordtyper, hvor systemvariable har de valgte tilstande (intervaller), ligger i den mest sårbare klasse, og 23,5% risiko for at sårbarheden af jordtypen ligger i den næsthøjeste klasse. Figuren viser også at de tillagte 'silt'-værdier har ændret sandsynlighedsfordelinger for 'ler', 'fint sand 1', 'groft sand 1' og 'groft silt'. Kun den oprindelige fordeling af 'fint sand 2' er uændret.

Alternativt kan BN i eksempel A bruges til at undersøge den afledte effekt i de øvrige variable ved en bestemmelse af de parametre som er lettest at måle i laboratoriet ('fint sand 1 & 2', 'groft sand 1' og 'groft silt'), figur 15.9. I det viste eksempel influerer ændringen alle variable undtagen 'organisk stof'.



**Figur 15.7 A og B**. Strukturel læring (systemvariable og retningsbestemte links) og simulerede sandsynlighedsfordelinger for tilstande for de to eksempler i figur 6.26. De jordprofiler som er mest sårbare overfor udvaskning af pesticid ligger i intervallet 0.64-1.01 (9,9 % af profilerne i eksempel A). Også følsomme, om end i mindre grad, er profiler som hører til intervallet 0.43-0.64 (9.4 % i eksempel A). Der er altså i denne beregning 18 % af de analyserede profiler som falder i de to mest pesticidfølsomme kategorier.

Den relative pesticidudvaskningsindikator ('rel pesticide leaching') viser, med oplysninger som er lagt ind i den strukturelle analyse, at der kun er ringe risiko for at jorden er følsom overfor udvaskning (= 0.01 eller 1 pct.). Der er således basis for at beslutte, hvorvidt en sådan lav procentvis risiko er acceptabel eller om der skal indsamles yderligere dokumentation om enten 'ler' eller 'organisk stof' for at gøre sandsynligheden for at jordtypen er meget sårbar endnu mindre end 1 pct.



**Figur 15.8**. Eksempel på hvordan der kan eksperimenteres med effekten af at tilføje evidens (kendskab til udvalgte systemvariable udfra fx målinger - røde bjælker) og opdatering af øvrige sandsynligheder i nettet og prognosen for sårbarheden overfor pesticid udvaskning med denne sikre viden (med udgangspunkt i BN for eksempel A).



**Figur 15.9**. BN for eksempel A hvor der er tillagt kendt tilstand for 'groft sand 1', 'fint sand 2', 'fint sand 1' og 'groft silt'. Effekten er at der er 41,4 % chance for at 'ler'indholdet ligger i intervallet 80-100 og 58,6 % chance for at det ligger i intervallet 100-250. De simulerede forhold i dette eksperiment medfører dermed at der er ringe risiko for udvaskning af pesticid.
Endelig er det muligt at indføje en sandsynlighedsfordeling (likelihood) for en eller flere udvalgte systemvariable i BN og analysere effekten på de øvrige variable under denne reviderede antagelse. Dette er eksemplificeret i figur 15.10 for BBN i eksempel A, idet det antages at der er det højeste eller næsthøjeste niveau af relativ pesticidudvaskning (enten 0.43-0.64 eller 0.84-1). Her får man et indtryk af hvilke 'intervaller' der er mest sandsynlige for de øvrige variable f.eks. 'organisk stof', 'ler' og 'silt' som i dette tilfælde har størst sandsynlighed for at være i næstlaveste interval (56 - 64 %) for de tre variable.



**Figur 15.10**. Eksempel på effekten af at indføje likelihood fordeling (fifty – fifty for næsthøjeste og højeste sårbarhedsinterval) (BN for eksempel A). Sammenfatning vedrørende anvendelse af strukturel analyse som beslutningsværktøj

Eksperimenterne med BN og algoritmen for strukturel læring i dette bilag har haft til formål at demonstrere et muligt værktøj til beslutningsstøtte. Eksemplerne er således ikke projektets resultater. De præsenterede BN-eksempler (A og B) er to alternativer ud af et større antal forsøg med forskellige sammenhænge/manglende sammenhænge. I tilfælde hvor der ikke aktivt indlægges afhængigheder mellem variable resulterer de strukturelle analyser i at to ('silt' og 'organisk stof') eller tre ('silt', 'ler' og 'organisk stof') variable til beskrivelse af relativ pesticid udvaskning, afhængig af de tillagte værdier og forbindelser/manglende forbindelser og afhængighedsretninger.

Eksemplerne er beregnet med PC algoritmen selv om NPC algoritmen muligvis ville kunne give et endnu bedre resultat på grund af det relativ begrænsede datagrundlag (150 datasæt).

De BNs som er udviklet her bør vurderes nøjere forud for en eventuel praktisk anvendelse, idet CPT'erne for nogle af sammenhængene er bestemt på et ret svagt grundlag (baseret på <5 oplysninger). Trods dette forbehold vurderes BNs imidlertid at være et fleksibelt værktøj til at analysere pesticidudvaskning idet der er mulighed for at trække på dels vidensgrundlaget fra kvadratnetsprofilerne og samtidig opdatere nettene med nye målinger fra et konkret område. Hertil kommer at kvalificerede erfaringer også kan indbygges i form af likelihood. BN ud-

gør dermed et anvendeligt værktøj til at afdække og formidle et bedste estimat for pesticidsårbarheden, og samtidig illustrere usikkerheder på dette skøn.

Det er af særlig betydning i forbindelse med zonering af særligt pesticidfølsomme arealer at BN eksplicit kan kvantificere og formidle usikkerhed. Derved er det muligt at bedømme den relative udvaskning af pesticid på grundlag af alle data indenfor et givet areal og i tilslutning hertil at kombinere denne vurdering med andre datasæt fra de landsdækkende kvadratnetsprofiler og yderligere parametre (fx. landbrugspraksis, nedbrydning af pesticider, udbringning af pesticider, grundvands moniteringsdata og socio-økonomiske forhold).

BNs er frem alt velegnet som et dialogværktøj der kan give overblik og integration, og samtidig påpege hvilke yderligere data der kan være behov for at indsamle

Bilag side 220

# INTERNT GEUS-NOTAT Side 1

# Bilag 16. Referee bemærkninger

GEUS: Jens Christian Refsgaard

Rapporten er tilrettet efter modtagelsen af bemærkningerne.

Øster Voldgade 10

1350 København K

Telefon 38 14 20 Telefax 38 14 20 geus@geus.dk

Til:	Erik Nygaard	Fortroligt:
Fra:	JCR	Dato: 2004-03-26
Kopi til:	ALS	J.nr. GEUS:
Emne:	KUPA - review af rapport	

#### **Baggrund og formål**

Den 19. marts 2004 blev jeg af Erik Nygaard bedt om at lave et review af rapporten "KU-PA, særligt pesticidfølsomme sandområder, Centrale forudsætninger for zonering". Udover denne rapport har jeg haft adgang til den interne KUPA hjemmeside, hvor jeg har orienteret mig i de bilag der forelå. I den forbindelse har jeg læst Bilag V, som også indgår i reviewet. Bilag VI med de statistiske analyser fandtes ikke på hjemmesiden, så den har jeg ikke haft lejlighed til at læse.

Mine kommentarer i dette dokument fokuserer i sagens natur på de kritiske elementer i undersøgelsen. Jeg vil derfor gerne fremhæve, at på trods af kritikpunkterne og spørgsmålene, er det mit klare indtryk at rapporten afspejler et særdeles grundigt arbejde med omfattende feltstudier og efterfølgende analyser.

#### Overordnet kommentar mht konklusionen

Jeg mener ikke der er grundlag for at konkludere, at det er muligt at zonere sandede jorde med hensyn til udvaskeligheden af pesticider før resultaterne er verificerede mod feltdata for udvaskning, hvilket jeg forstår først vil ske i forbindelse med en senere rapport. Jeg mener således ikke at der i rapporten er tilstrækkelig dokumentation til at understøtte denne konklusion.

Rapportens resultater peger i retning af konklusionen, men dokumentionen er mangelfuld i forhold til konklusionen. Alle de omfattende statistiske analyser er gennemført mod MA-CRO simulerede udvaskninger, men der er ikke på noget sted i rapporten dokumenteret, endsige diskuteret, hvorvidt modelberegningerne med MACRO er i overensstemmelse med feltdata for udvaskning. Dermed mangler et meget afgørende led i kæden af dokumentation. Jeg ved godt, at MACRO som modelkode betragtet er meget anvendt, og at der findes mange internationale test af MACRO på lysimeterforsøg. Så det er ikke anvendelsen af MACRO som sådan jeg anfægter. Men det er også veldokuemnteret at forskellige parametrisereinger giver meget forskellige resultater for udvaskning. Den afgørende test på brug-

barheden under danske forhold er derfor om den måde at bestemme parameterværdier på (parametrisering) som KUPA foreslår resulterer i beregnede udvaskninger som er i overensstemmelse med hvad der findes i felten.

En formulering af konklusionen i retning af "der er grundlag for at formode at det er muligt at zonere """" ville være mere dækkende end den nuværende formulering.

#### Specifikke kommentarer

Nedenstående kommentarer er grupperet emnevis. Rækkefølgen er tilfældig og afspejler ikke en prioritering af vigtighed. Nogle af kommentarerne og spørgsmålene skyldes givet vis misforståelser fra min side, hvilket jeg undskylder.

#### Overordnet metodik

Den overordnede metodik er fagligt god og sund. Metoden med at udvikle og teste korrelationsmodeller på et datasæt (KUPA plus kvadratnetprofilerne) og først derefter verificere metodens evne til at forudsige udvaksning mod uafhængige data fra 4 andre forsøgsmarker samt fra de to VAP sandmarker er videnskabeligt helt i top. Det er blot nødvendigt, at gennemføre (og rapportere) disse verifikationer mod uafhængige data, før der kan drages konklusioner om konceptets egnethed til zonering.

## Relative koncentrationer

Gennem hele rapporten vises kun relative koncentrationer. Jeg er bekendt med, at der er kontraktmæssige grunde hertil. Men det slører alligevel det faglige overblik, når man ikke er klar over størrelsesordenen af de beregnede udvaskninger. Specielt Fig 19 er vanskelig. Her er to relative koncentrationer plottet mod hinanden. Det ser ikke ud til, at de to sæt koncentrationer er normeret i forhold til det samme tal, men derimod i forhold til hvert sit tal. Det betyder, at man ikke ud fra figuren kan se hvilke tal der er de største, de absolutte x-værdier eller de absolutte y-værdier.

## Outliers

I mange af de statistiske korrelationsanalyser er der frasorteret outliers (Fig 13a, 15a, 17a, 20a, men ikke i 22a). Antallet af outliers udgør 6-12%. Det fremgår ikke af rapporten, hvad grundlaget for udpegningen af outliers er. Såfremt outliers er udpeget ud fra konkret viden om svagheder i prøvetagning og laboratorieanalyser kan det retfærdiggøres, men i så fald burde datapunkterne vel totalt kasseres i stedet. Såfremt der blot er tale om identifikation af et datapunkt, som af uforklarlige årsager ikke passer ind i korrelationsmodellen, forekommer det betænkeligt at frasortere outlieres, idet de så er udtryk for en naturlig variation som vil give en dårligere forklaringsgrad i den valgte korrelationsmodel.

I den sammenhæng forstår jeg ikke at der i Fig. 20a er 2/24 outliers mens der i Fig 15a er 3/24 outliers. Daatagrundlaget i de to figurer er det samme, bortset fra at faste DT50 værdier i Fig 15a er udskiftet med målte værdier i Fig. 20a. Hvad er årsagen til at overgang fra faste DT50 værdier til målte værdier resulterer i at antallet af outliers falder ?

#### Pedotransfer parameterværdier – hvor gode er de ?

Et vigtigt element i analysen er korrelationsanalysen, der muliggør at værdier for stofspecifikke modelparametre og hydrauliske parametre kan estimeres udfra tilgængelige jorddata ved hjælp af henholdsvis multivariat statistik og neurale netværk. Det er en god og sund metodik. Men sammenhængene virker ikke alle særligt overbevisende:

- For de hydrauliske parametre viser Fig 7 at nogle af paremetrene som også nævnt i rapporten beskrives dårlig. For de to vigtigste hydrauliske parameterværdier K<sub>s</sub> og K<sub>b</sub> angiver rapporten sammenhængen til at være "tilfredsstillende". Den påstand er ikke begrundet og efter min mening tvivlsom. Variationsintervallet på outputtet fra det neurale netværk (modelleret) er imidlertid markant mindre end variationen på feltdataene (fittet). Således varierer K<sub>s</sub> for feltdataenes vedkommende i intervallet [1; 5000], mens det neurale netværk reducerer intervalbredden med 1½ størrelsesorden til [10; 1000]. Dvs at parameterværdierne fra det neurale netværk reducerer variabiliteten af hydrauliske parameter, hvilket kan påvirke (reducere) den simulerede udvaskning, idet vi ved at udvaskningen er meget uens fordelt over en mark.
- For de stofspecifikke parameterværdier er sammenhængen fra multivariatanalyserne vist i Fig 13a (binding) og Fig. 17a (nedbrydning). Også her viser de modellerede (multivariatmetode) værdier en mindre variationsbredde end de målte værdier. Det vil også påvirke udvaskningstallene som simuleres af MACRO.

Dette forhold, at variationsbredden reduceres signifikant og betydningen heraf, er slet ikke omtalt i rapporten.

#### KUPA profiler versus kvadratnetsprofiler – er de repræsentative ?

I Bilag V er der vist sammenligninger mellem relative udvaskninger for de 24 KUPA søjler (Bilag V, Fig 2) og for de 175 kvadratnetsøjler (Bilag V, Fig. 3). På øjemål ser de to fordelinger temmelig forskellige ud – der er meget mere volumen under kurven i Fig. 2. Jeg forstår derfor ikke helt oplysningen om, at et statistisk test viser at der ingen signifikant forskel er på de to fordelinger. Ifølge Bilag V (side 10) er testet lavet for udvaskningen i 1 m dybde, mens alle andre analyser, inklusiv de to figurer viser udvaskning til 2 m dybde. Dette spørgsmål er meget væsentligt, idet resultaterne fra kvadratnetssøjlerne udgør fundamentet for den begyndende extrapolation fra de datarige KUPA søjler til standarddata i de danske sandområder.

#### Valg af 80% fraktil for DT50 værdier

I Bilag V anføres at valget af 80% fraktilen for DT50 svarer til en "worst case" situation. Jeg mener begrebet "worst case" er meget upræcist og ikke fagligt anvendeligt med mindre det defineres nærmere. Derudover er det ikke givet, at 80% fraktilen giver større udvaskninger end målte værdier, når den stedlige variation tages i betragtning. Såfremt der eksempelvis kun sker udvaskning på 10% af en mark i områder hvor DT50 værdien hører til blandt de 20% laveste, vil konklusionen være omvendt. Fig. 14 og Fig. 18 i hovedrapporten viser at udvaskningsresultaterne er markant forskellige ved valg af fast henholdsvis målt DT50 værdi, men figurerne fortæller ikke hvorvidt gennemsnitsniveauet for udvaskning er størst ved fast eller målt DT50. Fig 19 i hovedrapporten som sammenligner de to koncentrationen giver heller ikke svaret, fordi der kun vises relative koncentrationer.

### Repræsentativitet af laboratoriedata for feltforhold - udvaskning af glyphosat

Parameterværdier for nedbrydning og binding stammer fra laboratorieanalyser og litteraturen (som formentlig også primært omhandler laboratoriedata). Mange af laboratorieanalyserne er ikke medtaget i de statistiske analyser (Fig. 13a og Fig. 17a) fordi de angiveligt er for usikre. Men er de tilbageblevne laboratoriedata repræsentative for feltforhold. Denne fejlkilde er der ingen diskussion af. Eksempelvis kan det problematiseres at det i rapporten (side 15) anføres, at laboratorieresultaterne viser, at glyphosat bindes så strærkt til jordens faste bestanddele, at der ikke vil kunne simuleres nogen udvaskning. Dette er ikke i overensstemmelse med resultater fra VAP marker og andre fund af glyphosat i det øvre grundvand. Denne usikkerhedskilde er heller ikke nævnt i afsnit 5.3 'Sikkerhed i undersøgelsen'.

## Usikkerheder

Afsnit 5.3 om sikkerhed i undersøgelsen er meget kort og meget mangelfuld. Den omhandler kun usikkerheder ved forudsigelse af udvaskning (som simuleret af MACRO) fra de 24 KUPA søjler og de 175 kvadratnetssøjler. Der mangler følgende væsentlige usikkerhedskilder:

- Usikkerhed på MACRO's modelstruktur og procesbeskrivelser.
- Usikkerhed på hvor godt parameterværdierne i MACRO er repræsentative for de aktuelle feltforhold. Herunder kommer spørgsmålet om usikkerhed ved at flytte laboratorieresultater ud i felten samt usikkerhed og på pedotransferfunktionerne.
- Usikkerhed på hvorvidt parameterværdier kan estimeres udfra "almindelige jorddata" som fx data fra teksturdatabase (Fig. 25). Et meget vigtigt spørgsmål i den sammenhæng er skalaspørgsmålet som kun er nævnt meget kort, men ikke behandlet i nogen detalje i rapporten.

Disse ikke medtagne usikkerhedskilder er formentlig langt større end de usikkerhedskilder der er nævnt i afsnit 5.3.

## Terminologi – bl.a. på figurer

Ved et første kig på figurerne er terminologien nogle steder temmelig indforstået. Der optræder begreber som "fittet", "modelleret" og "simuleret", som alle kan benyttes og forstås i flæng. En angivelse af et ekstra ord, fx "MACRO simulering", "modelleret med statsitisk model" på figuren ville være nyttig for de læsere der ikke læser teksten i detaljer. En definition af terminologien i teksten ville måske også være en god ide.

# Fig 17a – enhed på akserne

Hvordan kan en nedbrydningsrate være negativ?

Der er tilvejebragt et fagligt grundlag for danske sandjorde, som har muliggjort udviklingen af en praktisk fremgangsmåde til udpegning af arealer, som er særligt følsomme overfor udvaskning af pesticider til grundvandet.

Rapporten beskriver forudsætningerne for at der kan udpeges særligt pesticidfølsomme arealer. Forudsætningerne består dels i identifikation af jordegenskaber, som samlet karakteriserer udvaskningsforholdene, dels i en klassificering af pesticider i grupper med beslægtede egenskaber med hensyn til udvaskning.

Der foreslås en praktisk fremgangsmåde for zonering som tager udgangspunkt i de jordegenskaber, der karakteriserer udvaskningsforholdene, og som kan kortlægges med enkle metoder.



