

Kvantificering af forureningsflux i transekt ved Skuldelev

Datarapport

Lange, Ida Vedel; Troldborg, Mads; Pompeia Ramos dos Santos, Marta Cecilia; Binning, Philip John; Bjerg, Poul Løgstrup

Publication date:
2011

Document Version
Også kaldet Forlagets PDF

[Link back to DTU Orbit](#)

Citation (APA):

Lange, I. V., Troldborg, M., Pompeia Ramos dos Santos, M. C., Binning, P. J., & Bjerg, P. L. (2011). Kvantificering af forureningsflux i transekt ved Skuldelev: Datarapport. Kgs. Lyngby: DTU Miljø.

DTU Library

Technical Information Center of Denmark

General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Kvantificering af forureningsflux i transekt ved Skuldelev

Datarapport

Et samarbejdsprojekt mellem
DTU Miljø og Region Hovedstaden

Ida V. Lange
Mads Trøldborg
Marta C. Santos
Philip J. Binning
Poul L. Bjerg

DTU Miljø
April 2011

Forord

Denne datarapport giver et overblik over forureningsudbredelse og beregning af forureningsflux ved Vestergade 5, Skuldelev i transekt(er) nedstrøms kildeområdet. Rapporten er en opfølgning på et foreløbigt notat ”*Anaerob deklorering og kvantificering af masse flux i en forureningsfane med klorerede ethener: Baseline – Vestergade 5, Skuldelev*” fra januar 2009 (Bilag 1).

Datarapporten udgør en del af et igangværende samarbejdsprojekt med Region Hovedstaden i perioden 2008-2010.

I Region Hovedstaden har en følgegruppe med følgende medlemmer løbende kommenteret på arbejdet.

- Hanne Kristensen
- Mads Terkelsen
- Arne Rokkjær
- Carsten Bagge Jensen
- Anna Toft

NIRAS ved Charlotte Riis og Maria Heisterberg Hansen har i hele perioden været behjælpelige med data og baggrundsviden om lokaliteten.

Alle projektdeltagere takkes for deres bidrag.

Rapporten er til internt brug i Region Hovedstaden og på DTU Miljø. En formidling af hovedresultaterne vil ske i en rapport om dette projekt og søsterprojektet, der handler om kvantificering af DNAPL i kildeområder.

Indhold

FORORD	3
INDHOLD	5
1 INDLEDNING OG FORMÅL	7
2 DATA FOR TRANSEKT(ER) NEDSTRØMS KILDEN	9
2.1 Geologi og hydrogeologi i F-transekt	10
2.2 Forurening i KB-transekt	20
2.3 Forurening i F-transekt	22
3 BEREGNING AF FORURENINGSFLUX	29
3.1 Beregningsmetoder	30
3.2 Beregning af forureningsflux i F-transekt med rektangulærmetode	30
4 GEOSTATISTISK METODE - BESKRIVELSE OG RESULTATER	43
4.1 Baggrund og formål	43
4.2 Metodebeskrivelse	44
4.3 Interpolation af koncentrationerne	45
4.4 Interpolation af hydraulisk ledningsevne	51
4.5 Kvantificering af usikkerhederne på forureningsfluxbestemmelsen	53
5 KONKLUSION OG ANBEFALINGER	61
5.1 Datasæt	61
5.2 Forureningsflux	61
5.3 Geostatistisk metode til beregning af forureningsfluxberegning	62
5.4 Anbefalinger	62
REFERENCELISTE	64

BILAG

BILAG 1	NOTAT, JANUAR 2009
BILAG 2	MLS-PRØVETAGNING
BILAG 3	DATASÆT
BILAG 4	KORNSTØRRELSSEFORDELING
BILAG 5	ORGANISK KULSTOF I SEDIMENTPRØVER
BILAG 6	ORGANISK KULSTOF I VANDPRØVER

1 Indledning og formål

Der har i perioden 2008-2010 været udført undersøgelser af forureningsfluxen nedstrøms Vestergade 5, Skuldelev af DTU Miljø i samarbejde med Region Hovedstaden. NIRAS har i hele perioden været behjælpelig med data og viden om geologi, hydrogeologi, forureningskilden og oprensningsaktiviteter på lokaliteten

Det er datarapportens overordnede formål at præsentere data for forureningsudbredelse og beregninger af forureningsflux i nedstrøms transekt(er) på lokaliteten i Skuldelev. Der er fire specifikke formål med arbejdet

- Skabe et sammenhængende datasæt af høj kvalitet for forureningskoncentrationer, samt geologi og hydrogeologi
- Skabe et datætsæt med koncentrationsmålinger over tid og målinger med forskellig rumlig detaljeringsgrad
- Gennemføre en systematisk vurdering af forskellige beregningsmetoders betydning for forureningsflux.
- Afprøve en ny geostatistisk metode til kvantificering af usikkerheden på forureningsfluxen

Oprindeligt var det forventet, at der ville ske et fald i koncentrationen og dermed forureningsfluxen på grund af især en termisk oprensning på lokaliteten i kildeområde I. Dette har ikke været tilfældet, og monitoringen blev derfor stoppet fra DTU Miljø side ved udgangen af 2009, da det ikke ville være realistisk inde for rammerne af projektet både at bearbejde data og fortsætte med monitoringen.

Selve datarapporten har desuden til formål at samle dokumentationen for de anvendte metoder og resultater.

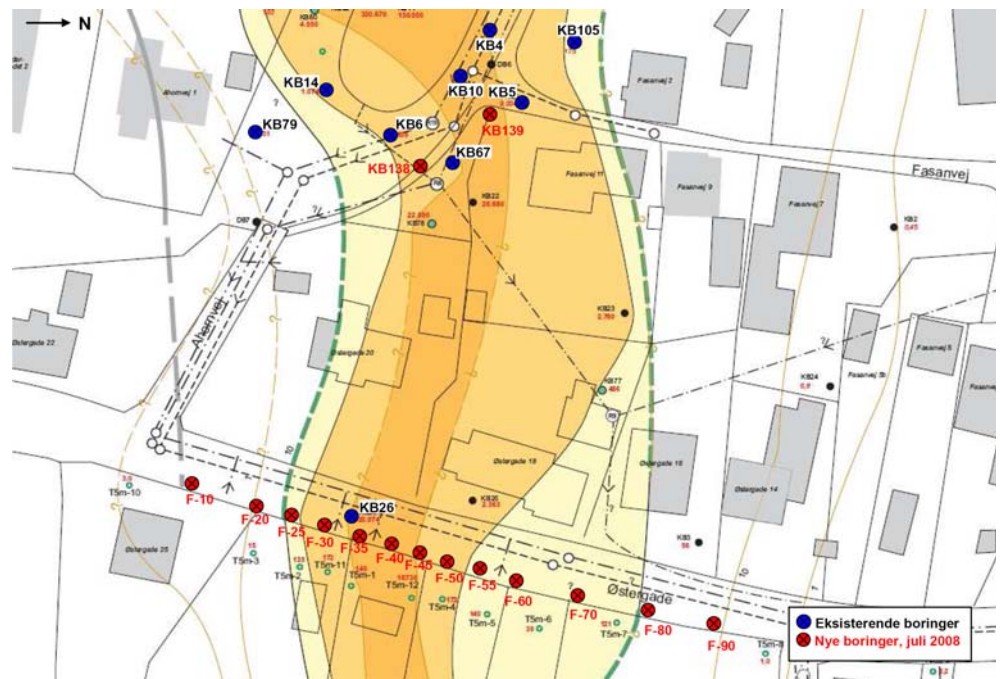
Datarapporten er en opfølgning på det foreløbige notat ”Anaerob deklorering og kvantificering af masse flux i en forureningsfane med klorerede ethener: Baseline – Vestergade 5, Skuldelev” fra 2009, som findes i Bilag 1. Generel beskrivelse af lokalitet, fremgangsmåde for feltaktiviteter mv. kan findes i denne, og er ikke gengivet her. Der er dog siden førnævnte notat installeret Multi Level Samplere (MLS). Fremgangsmåden for MLS-prøvetagning fremgår af af bilag 2.

Rapporten er til internt brug i Region Hovedstaden og på DTU Miljø. En fomidling af hovedresultaterne vil ske i en rapport om dette projekt og søsterprojektet, der handler om kvantificering af DNAPL i kildeområder.

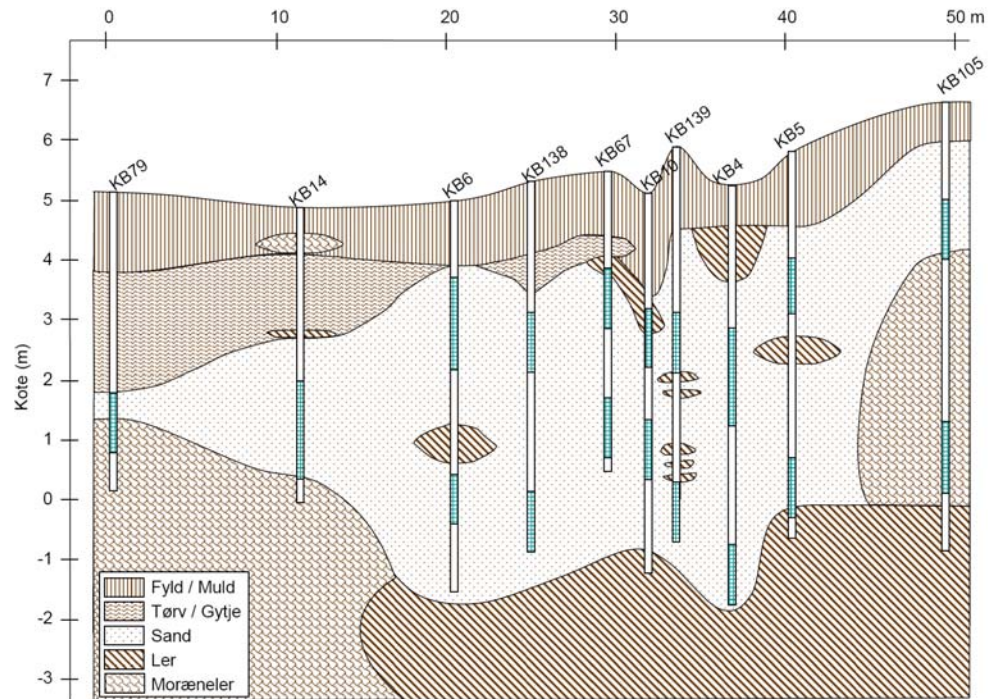
2 Data for transekt(er) nedstrøms kilden

I dette kapitel præsenteres de målte data for forurening i de to transekter nedstrøms kilden: KB-transektet og F-transektet. Der er særligt fokus på F-transektet, og disse data bruges i kapitel 3 til beregning af forureningsflux. I selve rapporten præsenteres de fundne forureningskoncentrationer uden kommentarer. I bilag 3 kan ses en række bemærkninger vedrørende bestemmelse af disse data og behæftede usikkerheder.

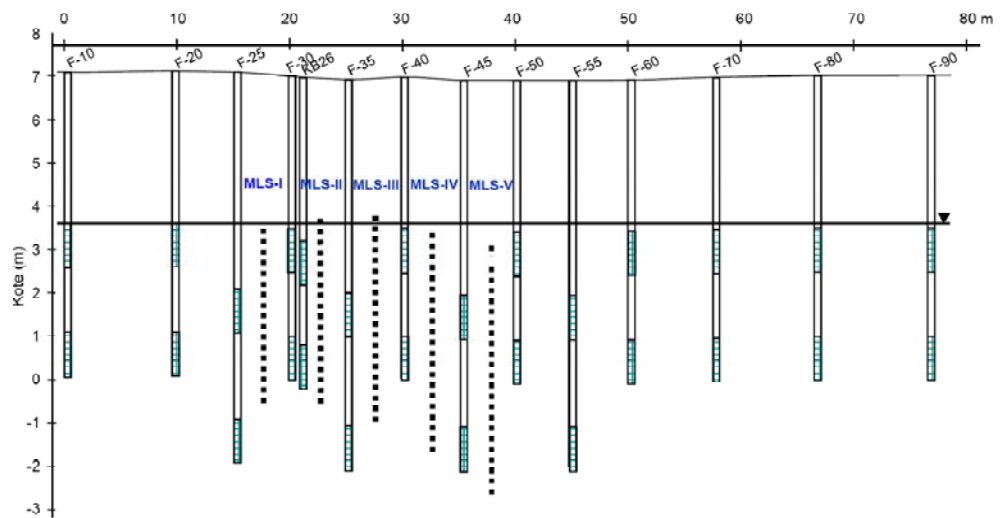
Placeringen af de boringer, som udgør de to transekter (KB og F) fremgår af Figur 2.1, og den vertikale placering af filtre fremgår af figur 2.2 og figur 2.3.



Figur 2.1: Placering af de boringer der udgør henholdsvis KB- og F-transektet. Modificeret fra figur fra Niras.



Figur 2.2: Profilsnit for KB-transektet med borer og geologi (baseret på boreringsdata fra NI-RAS).



Figur 2.3: Profilsnit for F-transektet med omtrentlig placering af almindelige filtersatte borer og Multi Level Samplers (MLS).

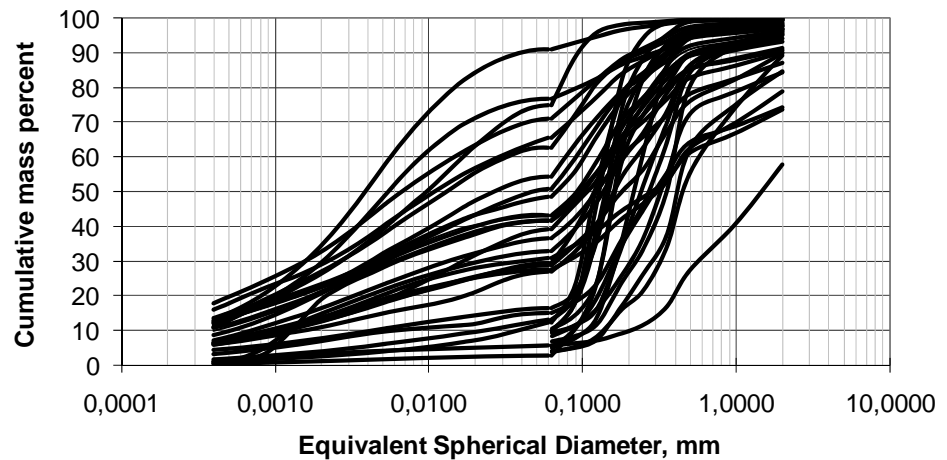
2.1 Geologi og hydrogeologi i F-transekt

Der er lavet undersøgelser for at forfine geologien i F-transektet, samt bestemme værdier for hydraulisk ledningsevne, hydraulisk gradient og vandspejl. Geologien ved Skuldelev er meget kompleks. I området ved F-transektet domineres geologien af moræneler og en lagserie af smeltevandssand. Den primære stoftransport antages at finde sted i sandlagene.

2.1.1 Kornstørrelsesfordeling

Der er foretaget en undersøgelse af kornstørrelsesfordeling for sedimentprøver udtaget fra F-transektet. Beskrivelse af metoden til at bestemme kornstørrelsesfordelingen,

samt placering af prøverne, kan ses af bilag 4. Kornstørrelsesfordelingerne fundet på denne måde er vist i Figur 2.4.



Figur 2.4: Kornstørrelsesfordelinger af udvalgte sedimentprøver i F-transektet.

Ud fra kornstørrelsesfordelingerne er det vurderet, om de forskellige prøver repræsenterer moræneler eller sand. Dette er gjort ved først at estimere hvor mange procent af hver prøve, der udgøres af hhv. ler, silt og sand. Petersen (1986) angiver flg. inddeling af jordpartikler efter størrelse fra $<0,002$ til 2 mm: ler $<0,002$ mm, silt 0,02-0,002 mm og sand 2-0,02 mm (grovsand 2-0,2 mm og finsand 0,2-0,02 mm). I stedet for 0,02 mm som grænsen mellem silt og sand benyttes også ofte 0,05 mm eller 0,063 mm (Petersen, 1986). Her er valgt at benytte grænsen på 0,063 mm. Dette passer også fint med Fobian (2000), der angiver kornfraktioner i mm på: ler $<0,002$, silt 0,002-0,06 og sand 0,06-2,0.

For en del af de undersøgte prøver er der ikke data til at afgøre, om der er tale om silt eller ler (grænsen på 0,002 mm). For disse er derfor kun procenter for silt+ler og sand. Procentvise indhold af ler, silt og sand i prøverne kan ses i Bilag 4.

Det er her valgt at opdele prøverne i sedimenttyperne sand og moræneler, hvor prøver med 80 % sand eller mere er klassificeret som sand og resten er angivet til at være moræneler. Denne opdeling er antaget rimelig ud fra Petersen (1986), som opdeler teksturklasserne i forskellige sandjorde, lerjorde og siltjord, men angiver at siltjord er sjælden i Danmark. Grænsen for adskillelsen mellem de forskellige typer jorde afhænger af den procentvise fordeling af sand, silt og ler (Petersen, 1986), så at lave en adskillelse kun baseret på procent sand er en forsimpning. En afgrænsning, der antager sandjord for prøver, der indeholder 80 % sand eller mere, ser dog ud til at være rimelig.

Der er herefter udregnet aritmetrisk gennemsnit, standardafvigelse og interval for procent af hhv. ler, silt og sand, i sand og morænelersprøverne.

Tabel 2.1: Aritmetrisk gennemsnit, standardafvigelse, samt min og max værdier for den procentvise fordeling af ler, silt og sand for prøverne undersøgt for kornstørrelsesfordeling ved Skuldelev, hhv. i sedimenttyperne sand og moræneler. Tal i parentes og markeret grøn er fra Fobian (2000) til sammenligning.

	Ler (%)*	Silt (%)*	Sand (%)
Sand (antal 17)			
Aritmetrisk gennemsnit	4,9 (0,1-6)	7,6 (2-26)	91,5 (68-98)
Standardafvigelse	2,3 (0,4-1,8)	2,9 (1,3-9,3)	4,0 (1,2-9,6)
Min	2,6 (0-4)	2,5 (0-6)	83,7 (54-95)
Max	7,6 (2-11)	9,8 (5-40)	97,1 (91-100)
Moræneler (antal 21)			
Aritmetrisk gennemsnit	19,6 (17)	26,0 (32)	51,6 (51)
Standardafvigelse	6,3 (4,1)	11,0 (5)	18,6 (6,4)
Min	10,9 (7)	13,8 (17)	9,2 (25)
Max	29,5 (34)	48,6 (53)	73,0 (73)

* De her beregnede værdier for silt og ler er uden prøver hvor der ikke var data til at skelne mellem ler og silt.

Data for disse kornstørrelsesundersøgelser er sammenlignet med data fra Fobian (2000), (som har undersøgt kornstørrelser i 1658 danske mineraljordsprøver), for at undersøge, om den valgte opdeling i sand og moræneler virker rimelig. Den sedimenttype, der her er kaldt sand, er sammenlignet med fluvialt sand i Fobian (2000). Denne inkluderer 342 sandprøver, som er opdelt i flere grupper, og derfor er de tal der er vist til sammenligning i tabel 2.1 givet i et interval. For moræneler er sammenlignet direkte med moræneler i Fobian (2000) der inkluderer 587 morænelersprøver. Der er i Fobian (2000) også angivet data for moræneler med højt lerindhold, men disse er der set bort fra her, idet minimumsindholdet er ler i disse var 36 %, hvilket er mere end den højeste ler % fundet i vores prøver. De procentvise fordelinger for silt og sand her er sammenlignet med hhv. total silt og total sand i Fobian (2000), for ler er bare sammenlignet med ler, idet der for denne ikke var nogen yderligere opdeling. Af denne sammenligning ses at den her valgte opdeling i sand og moræneler passer fint med data for hhv. fluvialt sand og moræneler fra Fobian (2000). Det vurderes derfor, at denne opdeling er rimelig.

2.1.2 Hydraulisk ledningsevne

Hydraulisk ledningsevne (K) er estimeret ud fra kornstørrelsesfordeling og sammenlignet med andre data for den hydrauliske ledningsevne i området, og det er herudfra udvalgt hvilke K-værdier, der anvendes ved forureningsfluxberegningerne.

Hydraulisk ledningsevne ud fra kornstørrelser

Ud fra de fundne kornstørrelsesfordelinger er den hydrauliske ledningsevne estimeret ved hjælp af fem forskellige empiriske formler. Ved at benytte forskellige formler fremfor kun én fås også en form for et estimat for usikkerhed ved beregningen. De fem valgte formler er præsenteret i tabel 2.2 sammen med deres anvendelsesområder.

Tabel 2.2: Udvalgte formler til estimering af K ud fra kornstørrelsesfordelinger.

Navn	Formel	Anvendelses- område	Reference
Hazen	$K = \frac{g}{\nu} \cdot 6 \cdot 10^{-4} \cdot [1 + 10(n - 0,26)] \cdot d_{10}^2$	fint sand til grus, med U < 5 og 0,1mm < d ₁₀ < 3mm	Odong, 2007
Kozeny- Carman	$K = \frac{g}{\nu} \cdot 8,3 \cdot 10^{-3} \cdot \left[\frac{n^3}{(1-n)^2} \right] \cdot d_{10}^2$	d ₁₀ ≤ 3mm, ikke egnet til lerede jorde.	Odong, 2007
Beyer	$K = \frac{g}{\nu} \cdot 6 \cdot 10^{-4} \cdot \log \frac{500}{U} \cdot d_{10}^2$	1 < U < 20, 0,06mm < d ₁₀ < 0,6mm	Odong, 2007
Slichter	$K = \frac{g}{\nu} \cdot 1 \cdot 10^{-2} \cdot n^{3,287} \cdot d_{10}^2$	0,01mm < d ₁₀ < 5mm	Christiansen, 2000
Sauerbrei	$K = \frac{g}{\nu} \cdot 3,75 \cdot 10^{-3} \cdot \left[\frac{n^3}{(1-n)^2} \right] \cdot d_{17}^2$	sand + sandet ler, d ₁₇ < 0,5mm	Christiansen, 2000

Hvor g er tyngdeacceleration (9,81 m/s², ν er kinematisk viskositet (1,3·10⁻⁶ m²/s, vand 10°C (The Engineering Toolbox, 2005), n er porøsitet, U er koefficienten for korn-uniformitet (givet ved d₁₀/d₆₀), d₄₀ og d₁₇ og d₆₀ er korndiameter som hhv. 10, 17 og 60 % af prøven er finere end (i formlerne for beregning af K ovenfor, indsættes d₁₀ og d₁₇ i enheden m, for at få K i m/s) (Odong, 2007; Christiansen, 2000).

For porøsiteten er antaget en værdi på 0,35 for sand og 0,30 for moræneler. for hhv. sand og moræneler. K-værdierne er en geometrisk middelværdi af resultaterne fra de formler der var valide for den pågældende prøve (validiteten er kun vurderet ud fra de d₁₀, d₁₇ og U intervaller der er angivet i tabel 2.2. Det er angivet hvilke formler, der er regnet som anvendelige for hver prøve. Desuden er standardafvigelsen på de valide resultater beregnet for hver prøve.

Tabel 2.3: Estimerede K-værdier for sandprøver ud fra kornstørrelsesfordeling og empiriske formler. Der er benyttet forkortelser for formlerne: H=Hazen, Sl=Slichter, Sa=Sauerbrei, B=Beyer og KC=Kozeny-Carman. 1 angiver at formlen er regnet som valid.

Prøve	Valide metoder					Geometrisk middelværdi af K (alle valide) (m/s)	Standardafvigelse på lnK (alle valide)
	H	Sl	Sa	B	KC		
F10_6	0	0	1	0	1	2,39E-06	2,88
F25_4	1	1	1	1	1	6,36E-05	0,58
F25_5	0	1	1	0	1	6,20E-06	1,10
F25_6.5	0	1	1	1	1	2,26E-05	0,61
F30_4.5	0	1	1	1	1	3,26E-05	0,61
F30_6.5	0	1	1	0	1	1,50E-05	0,50
F35_5.5	0	1	1	1	1	3,86E-05	0,63
F40_4	0	1	1	1	1	2,27E-05	0,62
F40_7	1	1	1	1	1	1,11E-04	0,56
F45_6	0	1	1	0	1	1,78E-05	0,64
F45_6.5	1	1	1	1	1	6,87E-05	0,55
F45_8.5	0	1	1	1	1	2,29E-04	0,60
F60_4	0	1	1	1	1	2,97E-05	0,65
F60_6.5	0	1	1	1	1	3,97E-05	0,57
F70_6	0	0	1	0	1	1,57E-06	2,97
F70_6.5	1	1	1	1	1	8,63E-05	0,54
F80_4	1	1	1	1	1	1,07E-04	0,54

Tabel 2.4: Estimerede K-værdier for morænelerprøver ud fra kornstørrelsesfordeling og empiriske formler. Der er benyttet forkortelser for formlerne: H=Hazen, Sl=Slichter, Sa=Sauerbrei, B=Beyer og KC=Kozeny-Carman. 1 angiver, at formlen er regnet som valid.

Prøve	Valide metoder					Geometrisk middelværdi af K (alle valide) (m/s)	Standardafvigelse på lnK (alle valide)
	H	Sl	Sa	B	KC		
F10_4	0	0	1	0	1	1,16E-08	1,71
F10_4.5	0	0	1	0	1	2,09E-09	1,25
F20_4.5	0	0	1	0	1	8,35E-10	0,59
F20_6.5	0	0	1	0	1	1,86E-08	1,05
F25_9	0	0	1	0	1	1,04E-09	0,27
F30_3.5	0	0	1	0	1	6,41E-09	1,33
F30_4	0	0	1	0	1	1,42E-08	1,26
F35_9	0	0	1	0	1	1,39E-09	0,68
F45_4	0	0	1	0	1	1,97E-09	1,17
F45_5	0	0	1	0	1	1,39E-09	0,68
F45_5.5	0	0	1	0	1	1,46E-08	0,89
F45_9	0	0	1	0	1	9,51E-10	0,14
F50_3.5	0	0	1	0	1	1,04E-09	0,27
F50_4.5	0	0	1	0	1	1,54E-08	0,46
F50_6.5	0	0	1	0	1	2,21E-08	0,97
F55_5	0	0	1	0	1	6,4E-08	1,77
F55_6	0	0	1	0	1	1,1E-09	0,35
F55_8.5	0	0	1	0	1	4,45E-10	0,30
F80_7	0	0	1	0	1	3,83E-10	0,30
F90_4	0	0	1	0	1	2,92E-09	0,77
F90_6.5	0	0	1	0	1	1,13E-08	0,01

Opdelingen i sand og moræneler er gjort på baggrund af resultater fra kornstørrelsesfordelingen (se afsnit 2.1.1 og bilag 4. Ved brug af denne opdeling ses altså at der fås en K-værdi i sand på mellem 1,57E-06 og 2,29E-04 m/s og en K-værdi i moræneler på mellem 3,83E-10 og 6,40E-08. Denne opdeling af sand og moræneler ser altså ud til at give fornuftige intervaller for de estimerede K-værdier.

Tabel 2.5: Estimerede overordnede geometriske middelværdier for K i hhv. sand og moræneler.

	Overordnet geometrisk middelværdi af K (m/s)	Standardafvigelse på lnK (
Sand	2,83E-05	2,18
Moræneler	3,50E-09	1,60

Andre data for hydraulisk ledningsevne

Der foreligger desuden data fra pumpetests og slugttest for det øvre sekundære magasin i området ved Skuldelev (Frederiksborg Amt, 2005). Data fra pumpetests er vist i tabel 2.6 og for slugttests i tabel 2.7.

Tabel 2.6: Estimerede K-værdier fra pumpetests, data er fra Frederiksborg Amt (2005).

Boring	Estimat af K, ca. (m/s)
KB7	$7 \cdot 10^{-5}$
KB22-1	$3 \cdot 10^{-5}$
KB9-1	$3 \cdot 10^{-5}$

Tabel 2.7: Estimerede K-værdier fra slugttest, modificeret fra Frederiksborg Amt (2005).

Boring	Jordtype	K (m/s)
KB10-1	sand, mellem	$8,26 \cdot 10^{-4}$
KB14-1	sand/grus	$2,23 \cdot 10^{-4}$
KB16-1	sand, mellem/sand, gruset	$1,64 \cdot 10^{-4}$
KB19-1	Grus	$7,87 \cdot 10^{-4}$
KB22-1	Grus	$3,98 \cdot 10^{-4}$
KB22-2	sand, fint, siltet	$9,58 \cdot 10^{-6}$
KB 23-1	sand/grus	$1,57 \cdot 10^{-3}$

Desuden er der i Region Hovedstaden (2008) opsat en grundvandsmodel for Skuldelevområdet. De kalibrerede værdier der anvendes i denne for horisontal K er for smeltevandssand $2 \cdot 10^{-4} - 1 \cdot 10^{-5}$ m/s, og for moræneler $1 \cdot 10^{-7} - 1 \cdot 10^{-8}$ m/s.

Samlet vurdering af K

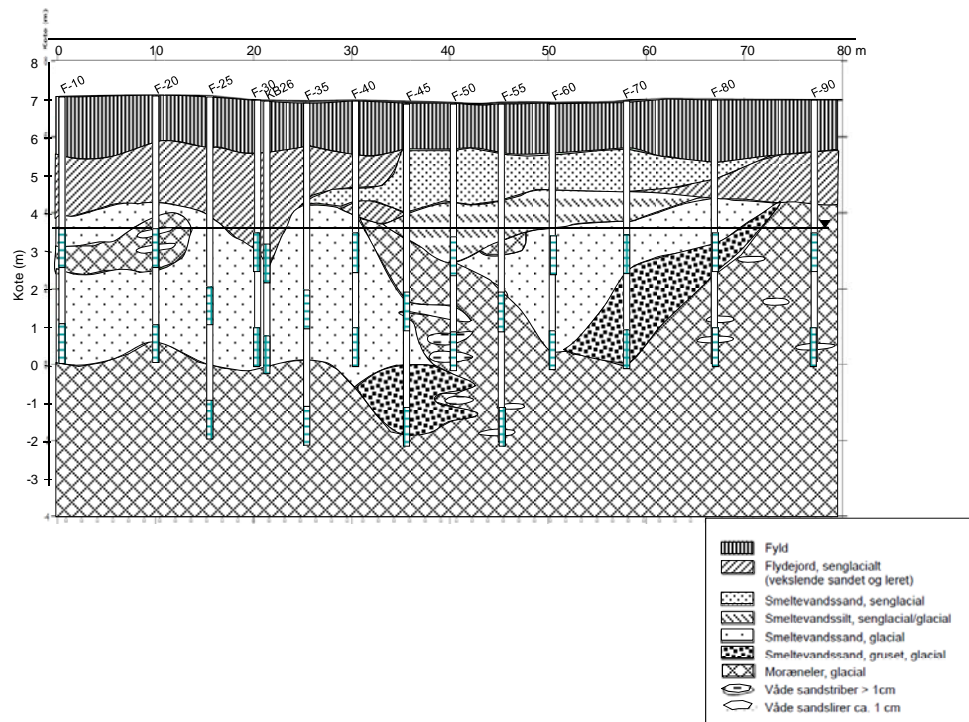
Sammenlignes disse andre værdier for K med dem, der er estimeret ud fra kornstørrelsesfordelingerne, ses at for sand passer værdierne fint overens, og det er valgt at benytte de estimerede K-værdier ud fra kornstørrelsesfordelingerne ved forureningsfluxberegningerne. For moræneler er de værdier, der er estimeret ud fra kornstørrelsesfordelingerne noget lavere end dem der er anvendt i grundvandsmodellen i Region Hovedstaden (2008). Det er valgt at benytte de K-værdier der er estimeret ud fra kornstørrelsesfordelingerne til forureningsfluxberegningerne. Disse værdier er typiske for moræneler. I praksis har det har formodentlig ikke væsentlig betydning for forureningsfluxberegningerne, om K-værdierne er omkring en faktor 10 større eller mindre i moræneleren, fordi K-værdierne her under alle omstændigheder er meget lavere end i sandet.

For beregningerne med homogen K i hhv. sand og moræneler anvendes altså for sand en K-værdi på $2,8E-5$ m/s og for moræneler $3,5E-9$ m/s.

2.1.3 Geologisk profilsnit

I Figur 2.5 ses geologien i F-transektet. Figuren er en modificering af en figur fra Niras (fra november 2008). Der er lavet en sammenligning af data fra borejournaler fra Niras og data fra undersøgelserne af kornstørrelsesfordelingerne. Generelt passer de

fint overens, men enkelte steder er fundet mindre uoverensstemmelser. Disse steder er det valgt at følge data fra kornstørrelsesfordelingerne.



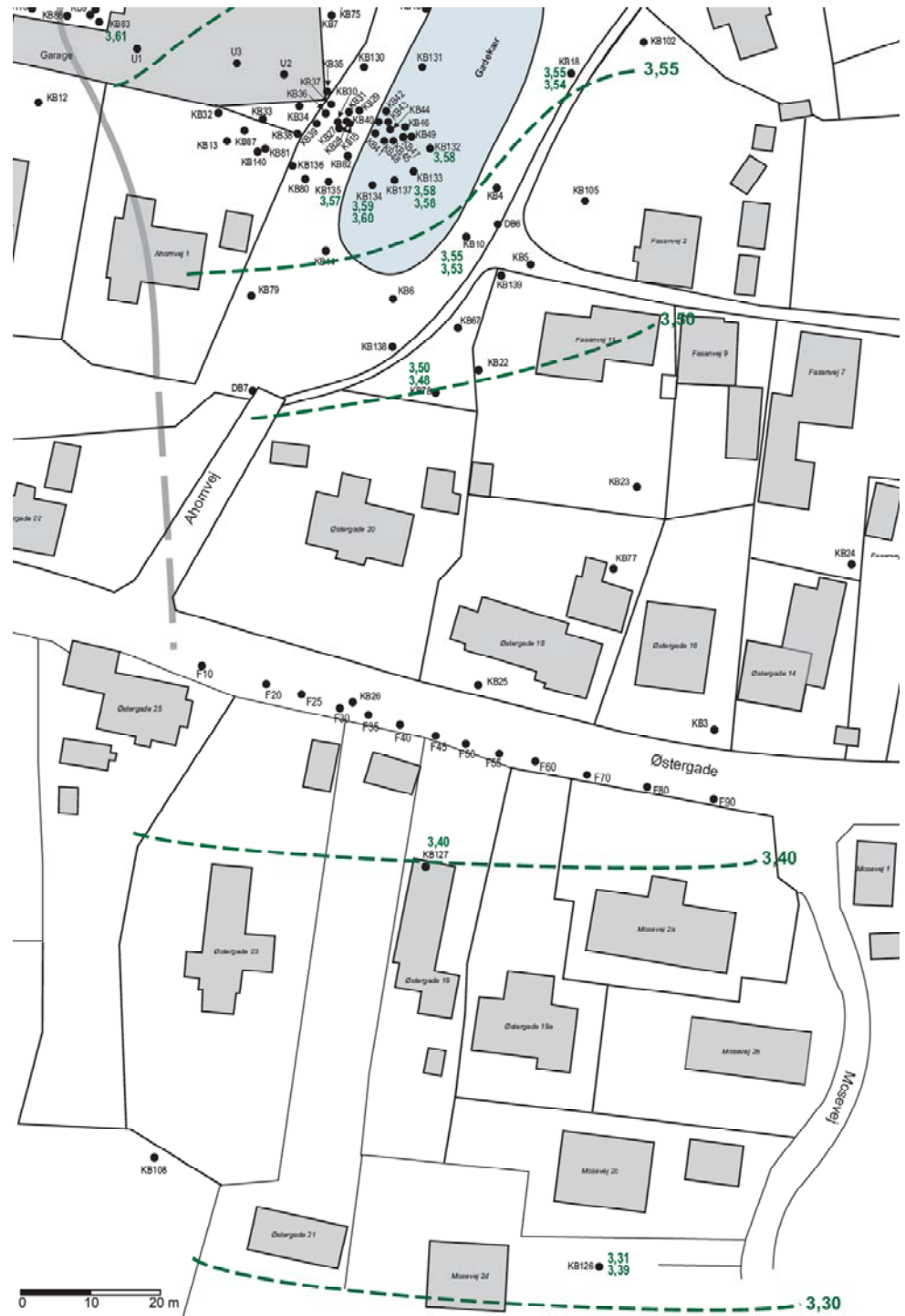
Figur 2.5: Geologi i F-transektet, modificeret fra figur fra Niras (fra november 2008).

2.1.4 Hydraulisk gradient

Den hydrauliske gradient (dh/dl) er estimeret ud fra en række potentialekort for det øvre sekundære magasin baseret på kvartalsvise pejlerunder for perioden oktober 2008 til juli 2009. Magasinet er typisk beliggende 3-7 m.u.t. og er bl.a. udbredt øst for fabriksbygningen inklusiv området omkring F-transektet (Region Hovedstaden, 2010).

Potentialelinjer, der er vurderet relevante for F-transektet, er brugt til at estimere dl og tilhørende dh . De benyttede dl -værdier er cirkaværdier, da der er en vis variation henover nogle af potentialelinjerne pga af en meget svag hældning på vandspejlet. Der er anvendt dl -værdier, der overordnet giver en fornuftig repræsentation af den hydrauliske gradient i F-transektet.

Et eksempel på et af de potentialekort, der er benyttet til estimering af den hydrauliske gradient, er vist i Figur 2.6. På baggrund af dette er dh/dl beregnet ud fra henholdsvis potentialelinjerne 3,55-3,30; 3,50-3,30 og 3,50-3,40 (tabel 2.8).



Figur 2.6: Potentialekort (m DVR90) for øvre sekundært magasin for oktober 2008, modificeret fra Region Hovedstaden (2010). Bemærk at skala i venstre hjørne nok ikke er helt præcis, idet den er klippet ind separat.

Tabel 2.8: Estimering af hydraulisk gradient for de fire pejlerunder (oktober 2008- juli 2009) og ved at medtage forskellige potentialelinjer. Baseret på data fra Region Hovedstaden (2010).

Pejlerunde	dl (m)	dh (m)	dh/dl
16. oktober 2008			
Potentialelinje 3,55-3,3	153	0,25	0,0016
Potentialelinje 3,5-3,3	127	0,2	0,0016
Potentialelinje 3,5-3,4	67	0,1	0,0015
Gennemsnit for denne målerunde			0,0016
15. januar 2009*			
Potentialelinje 3,8-3,7	47	0,1	0,0021
28. april 2009			
Potentialelinje 3,6-3,5	67	0,1	0,0015
9. juli 2009			
Potentialelinje 3,8-3,6	67	0,2	0,0030
Potentialelinje 3,7-3,6	33	0,1	0,0030
Gennemsnit for denne målerunde			0,0030

* Dette potentialekort har ingen potentialelinje nedstrøms transektet!

Den hydrauliske gradient i de tre første måleunder er estimeret til omkring 2 ‰ og i den sidste omkring 3 ‰ (tabel 2.8). Det ses, at den hydrauliske gradient er relativt upåvirket af hvilke potentialelinjer, der præcis benyttes til estimeringen. Ud fra disse data ser der desuden ikke ud til at være markante ændringer i den hydrauliske gradient over de forskellige årstider.

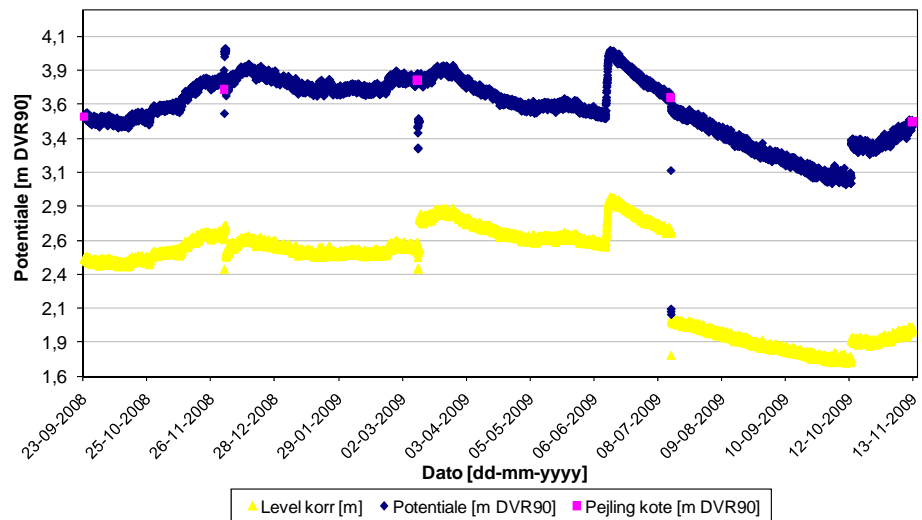
Tidligere har den hydrauliske gradient været estimeret til ca. 5 ‰, baseret på måling fra september 2007 (Bilag 1). Inkluderes dette estimat er der en større variation i den hydrauliske gradient.

Ifølge Region Hovedstaden (2010), er det for det øvre sekundære magasin fundet at variationer i pejledata mellem pejlerunderne er begrænset, og det generelle billede af potentialet i øvre sekundære magasin er derfor det samme for de fire kvartalsvise pejlerunder. Der var meget nedbør om sommeren i 2007, hvilket kan være en grund til den høje vandstand i september 2007 (Region Hovedstaden 2010).

Baseret på disse data er valgt en hydraulisk gradient på 2 ‰ for F-transektet ved de videre beregninger af forureningsfluxen.

2.1.5 Vandspejl

Ved at tage et gennemsnit af alle pejlinger på alle de almindelige filtre i F-transektet, for alle 6 målerunder, er fundet et overordnet gennemsnitligt potentiale på ca. 3,6 m DVR90.



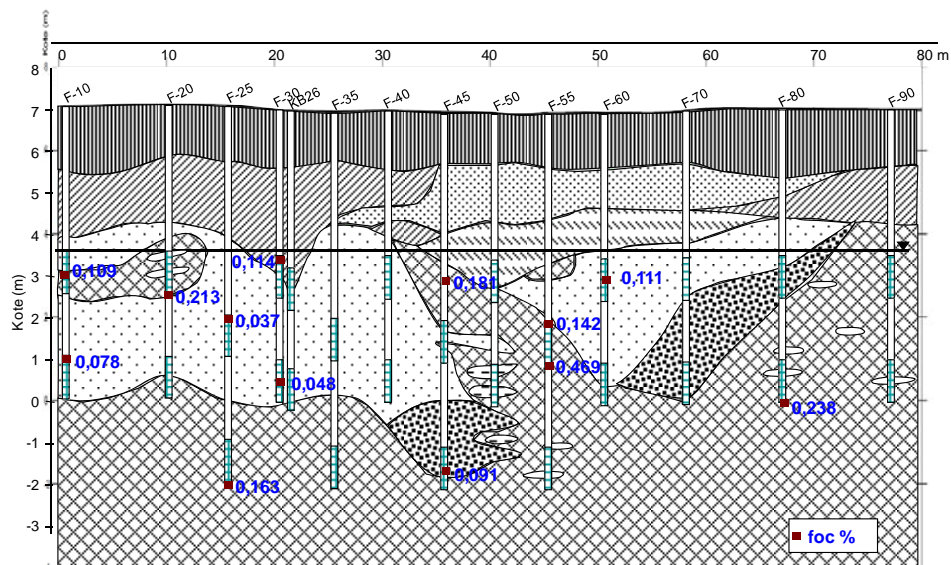
Figur 2.7: Resultater fra datalogger i F55-2.

Der er desuden resultater fra en datalogger der er placeret i F55-2, se figur 2.7. Det ses af figur 2.7 at resultaterne fra dataloggeren passer fint med potentialer fra manuelle pejlinger. Det ses desuden at potentialet generelt ligger ret tæt omkring 3,6 m DVR90, men fra omkring juni 2009 ses lidt større udsving, først en stigning og derefter et fald i potentialet. Der er ingen af de største udsving, der er sammenfaldende med tidspunkter for prøvetagning til koncentrationsbestemmelserne. Både i data fra pejlinger (alle almindelige filtre i de 6 målerunder for F-transektet) og fra dataloggeren, er der et spænd i potentialet fra ca. 3 m DVR90 til ca. 4 m DVR90, men generelt ser potentialet ud til overvejende at ligge tæt ved de 3,6 m DVR90. Ved et potentiale ned til omkring 3 m DVR90 vil nogle af de øvre filtre ikke være helt under vandspejlet. Dog vil ca. halvdelen af filteret være under vandspejlet selv ved det laveste potentiale.

Det er valgt at benytte den gennemsnitlige værdi på ca. 3,6 m DVR90 for vandspejlet videre ved forureningsfluxberegningerne, således at vandspejlet (som bruges som den øvre grænse for forureningsfluxberegningen) antages konstant over tiden.

2.1.6 Organisk kulstof

Der er foretaget undersøgelse af organisk kulstof i F-transektet. De fundne værdier for procent f_{oc} er vist i Figur 2.8, med geologien som baggrund. Data for f_{oc} kan desuden ses i bilag 5. Desuden er data for opløst organisk kulstof i vandprøver vist i bilag 6.



Figur 2.8: Kort med fundne gennemsnitsværdier for organisk kulstof (f_{oc}) i %.

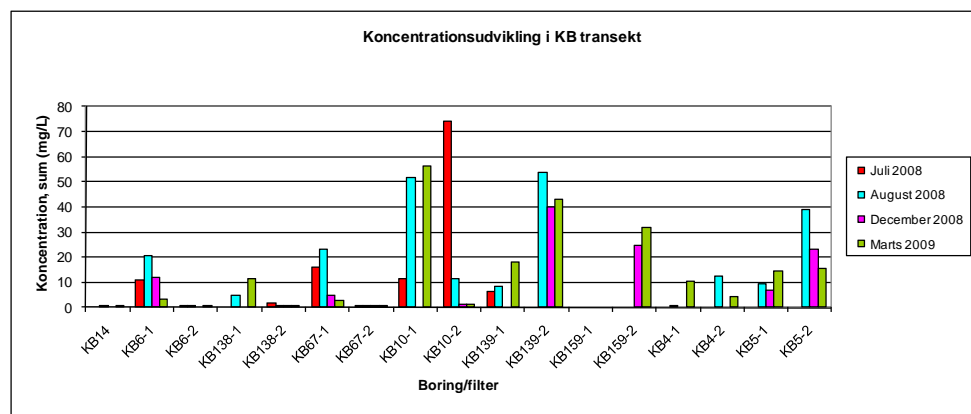
2.2 Forurening i KB-transekt

I tabel 2.9 er vist summen af chlorerede ethener (inkl. ethen og ethan) i de borerer der udgør KB-transektet, for de fire målerunder (fra juli 2008 til marts 2009) hvor der har været målt på disse borerer.

Tabel 2.9: Oversigt over sum af chlorerede ethener i KB-transekt for de fire målerunder. ”-” angiver, at der ikke findes data fra dette filter i denne målerunde.

KB Boring	chlorerede ethener $\mu\text{g}/\text{l}$			
	jul-08	aug-08	dec-08	mar-09
KB14	-	711	-	45
KB6-1	10796	20470	12168	3333
KB6-2	124	13	-	4
KB138-1	-	4932	-	11558
KB138-2	1632	368	29	32
KB67-1	15936	23026	4723	2862
KB67-2	177	63	52	43
KB10-1	11346	51803	-	56349
KB10-2	73915	11301	1080	1258
KB139-1	6212	8446	-	17996
KB139-2	-	53645	40121	42987
KB159-1	-	-	-	-
KB159-2	-	-	24530	31847
KB4-1	-	331	-	10564
KB4-2	-	12708	-	4293
KB5-1	-	9507	6762	14319
KB5-2	-	39091	23422	15716

I figur 2.0 er disse resultater opsat i en graf, der illustrerer forureningsniveauet i de forskellige filtre over tid. Der er store forskelle både mellem de forskellige målerunder og de forskellige målepunkter. Der vil ikke blive arbejdet yderligere med disse data i denne note.



Figur 2.9: Koncentrationsudvikling i KB-transekt over de fire målerunder der er foretaget i transektet fra juli 2008 til Marts 2009.

2.3 Forurening i F-transekt

I F-transektet er der både resultater fra almindelige filtersatte boringer og Multi Level Samplere (MLS).

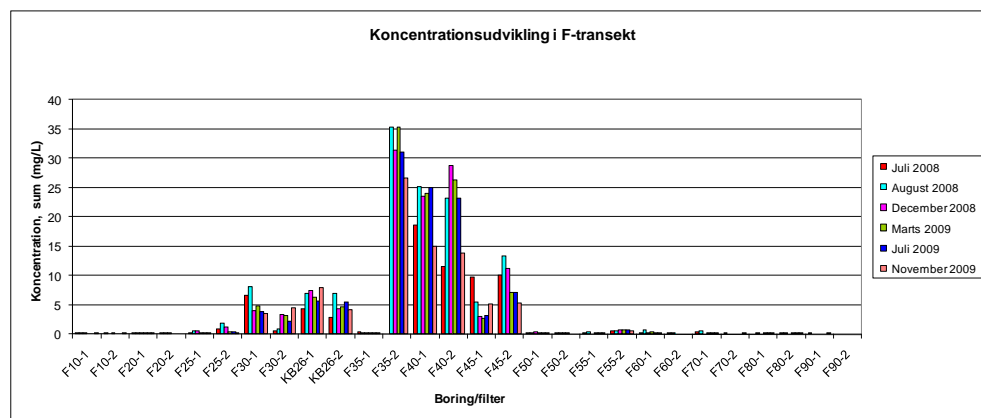
2.3.1 Sum af chlorerede ethener i almindelige filtersatte boringer

I tabel 2.10 er vist summen af chlorerede ethener (inkl. ethen og ethan) i de boringer der udgør F-transektet, for de seks målerunder hvor der har været målt på disse boringer.

Tabel 2.10: Oversigt over sum af chlorerede ethener i F-transektet for de seks målerunder. ”u.d.” betyder under detektionsgrænse og ”-” angiver at der ikke findes data fra dette filter i denne målerunde.

F Boring	chlorerede ethener µg/l					
	jul-08	aug-08	dec-08	mar-09	jul-09	nov-09
F10-1	15	23	2	u.d.	u.d.	4
F10-2	1	u.d.	1	u.d.	u.d.	3
F20-1	39	61	2	16	43	54
F20-2	4	8	14	u.d.	u.d.	u.d.
F25-1	254	627	559	265	294	272
F25-2	896	1897	1174	404	353	297
F30-1	6671	8168	4059	4916	3813	3521
F30-2	579	971	3282	3259	2188	4530
KB26-1	4406	7017	7450	6323	5581	7906
KB26-2	2925	6900	4311	4698	5427	4102
F35-1	341	16	137	71	71	111
F35-2	-	35344	31360	35284	31001	26613
F40-1	18547	25154	23506	23965	25017	15062
F40-2	11542	23124	28848	26384	23208	13869
F45-1	9706	5416	3082	2778	3218	5120
F45-2	10071	13380	11167	7133	7075	5337
F50-1	249	175	422	173	76	150
F50-2	75	30	3	1	u.d.	u.d.
F55-1	269	456	-	257	95	258
F55-2	599	570	703	659	714	622
F60-1	326	685	142	334	243	323
F60-2	2	3	u.d.	u.d.	u.d.	u.d.
F70-1	452	520	-	267	266	200
F70-2	1	u.d.	-	u.d.	u.d.	8
F80-1	-	13	-	4	24	30
F80-2	30	32	-	24	21	35
F90-1	2	u.d.	-	u.d.	u.d.	3
F90-2		u.d.	-	-	-	-

I figur 2.10 er disse resultater opsat i en graf der illustrerer forureningsniveauet i de forskellige filtre over tid. Det ses at de klart højeste koncentrationer findes omkring midten af transektet (F35-2 og F45-1 og -2). Det ses desuden at de tidlige variationer generelt er relativt begrænsede over de seks målerunder.



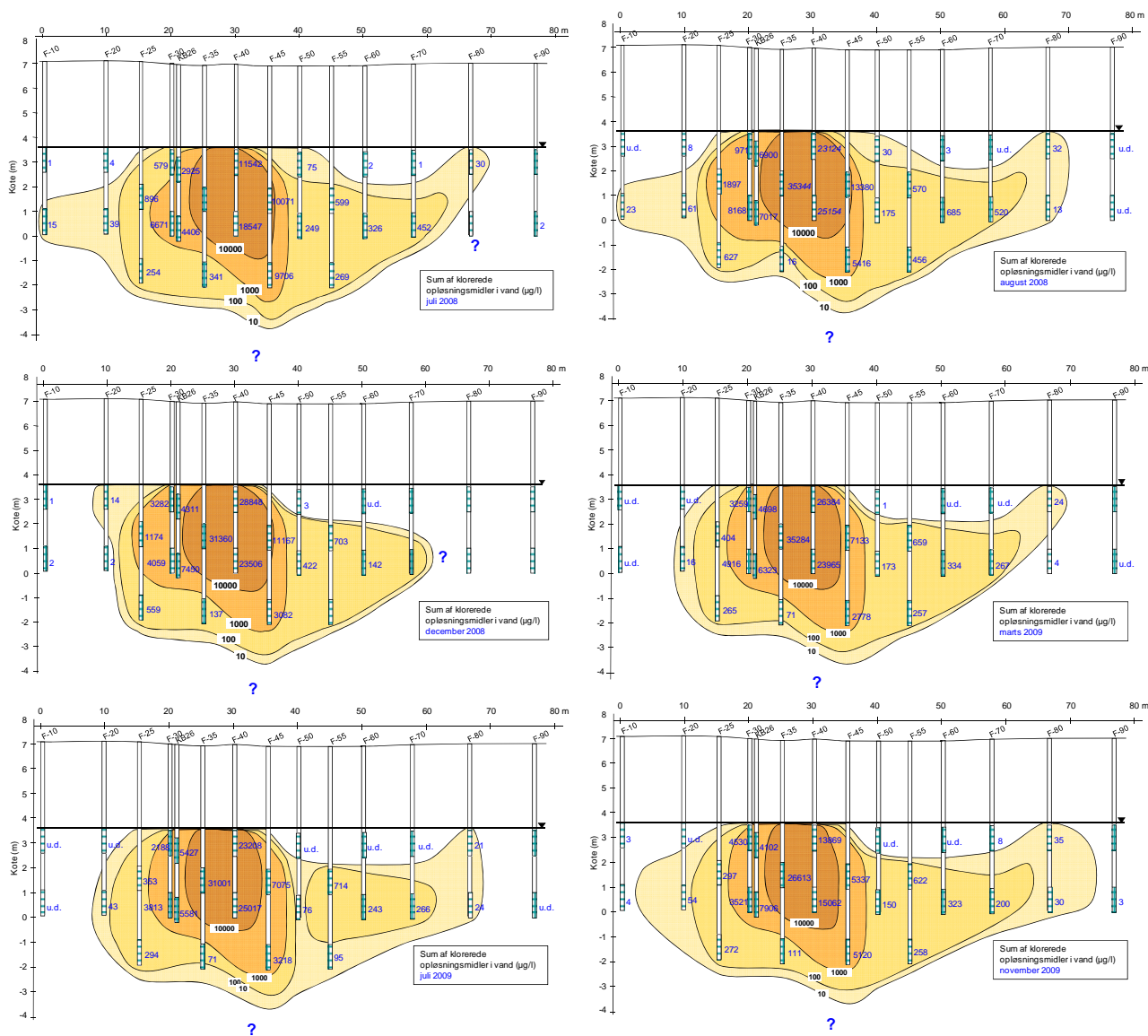
Figur 2.10: Konzentrationsudvikling i F-transekt over de seks målerunder der er foretaget i transektet fra juli 2008 til november 2009.

2.3.2 Tværsnit af forureningsfordeling i F-transektet

Der er opsat profilsnit for forureningskoncentrationen i F-transektet for hver af målerunderne, se figur 2.11. Udbredelsen af forureningen i transektet er vurderet ud fra de målte koncentrationer i de almindelige filtersatte boringer (MLS-målinger er således ikke medtaget i denne vurdering, men resultaterne fra disse er senere sammenlignet med profilsnittene).

Generelt ses af koncentrationsprofilsnittene at den kraftigste forurening er vurderet at findes fra vandspejlet og 3-4 m ned, i området fra omkring boring F35 til F45. Af koncentrationsprofilsnittene ses desuden, at den vurderede forureningsudbredelse i transektet ikke ændrer sig meget over de seks målerunder fra juli 2008 til november 2009 (det skal dog huskes, at koncentrationerne kan variere en del inden for de angivne intervaller, uden at det ses af profilsnittene).

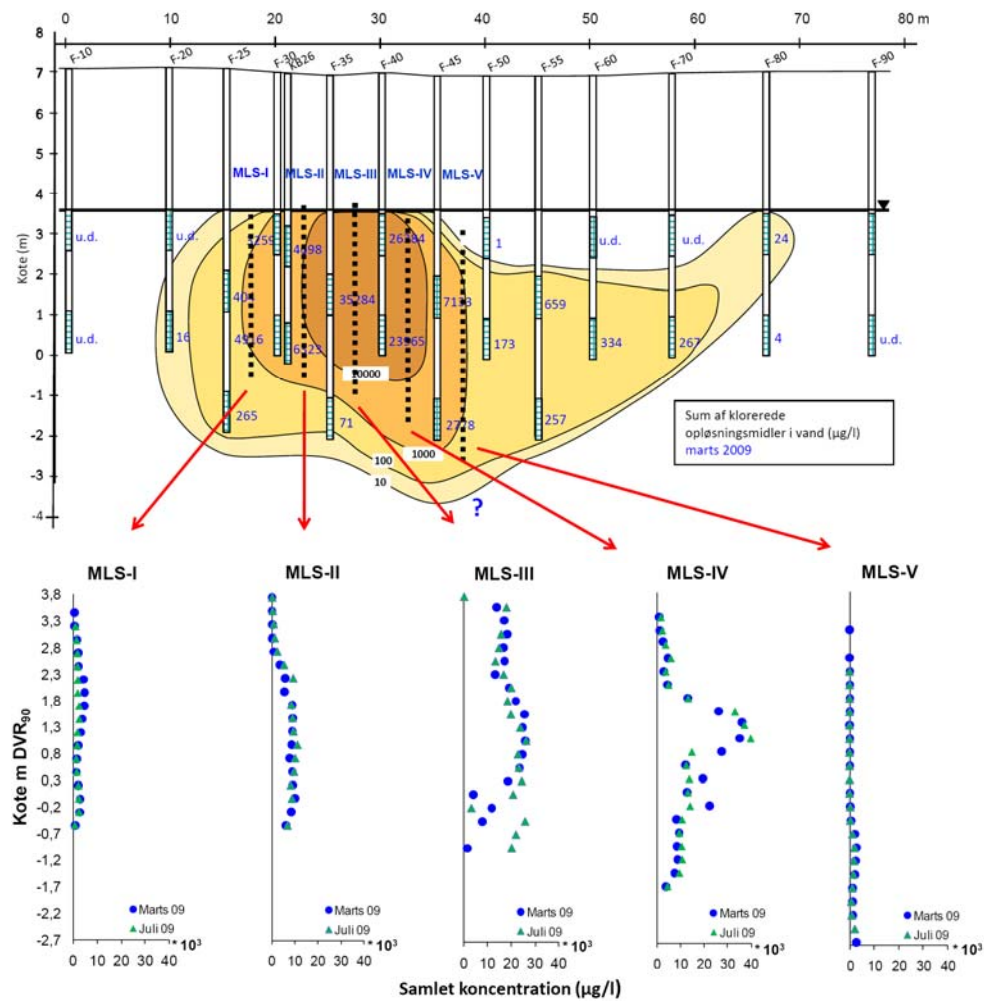
Figur 2.11 Koncentrationsprofilnit i F-transekten for de 6 målerunder. Spørgsmålstejn angiver, at afgrænsningen er usikker.



2.3.3 Multi Level Sampler (MLS) målinger

Til at supplere målingerne fra de almindelige filtersatte boringer i F-transektet er der fem steder i transektet installeret Multi Level Samplere, hvorfra der er udtaget prøver fra diskrete intervaller (filterlængde 5 cm). Hermed opnås en bedre forståelse af den vertikale fordeling af forureningen, end der er mulighed for med de almindelige filtersatte boringer med 1 meter filtre.

Der er lavet MLS målinger i marts, juli og november 2009. Resultaterne fra marts og juli er vist i figur 2.12. Desværre lykkedes analyserne ikke for en del af MLS-prøverne fra november, så der er ikke lavet en graf for disse. De MLS-data der findes for november er opsat i en tabel i bilag 3, sammen med data fra de to andre MLS-målinger.

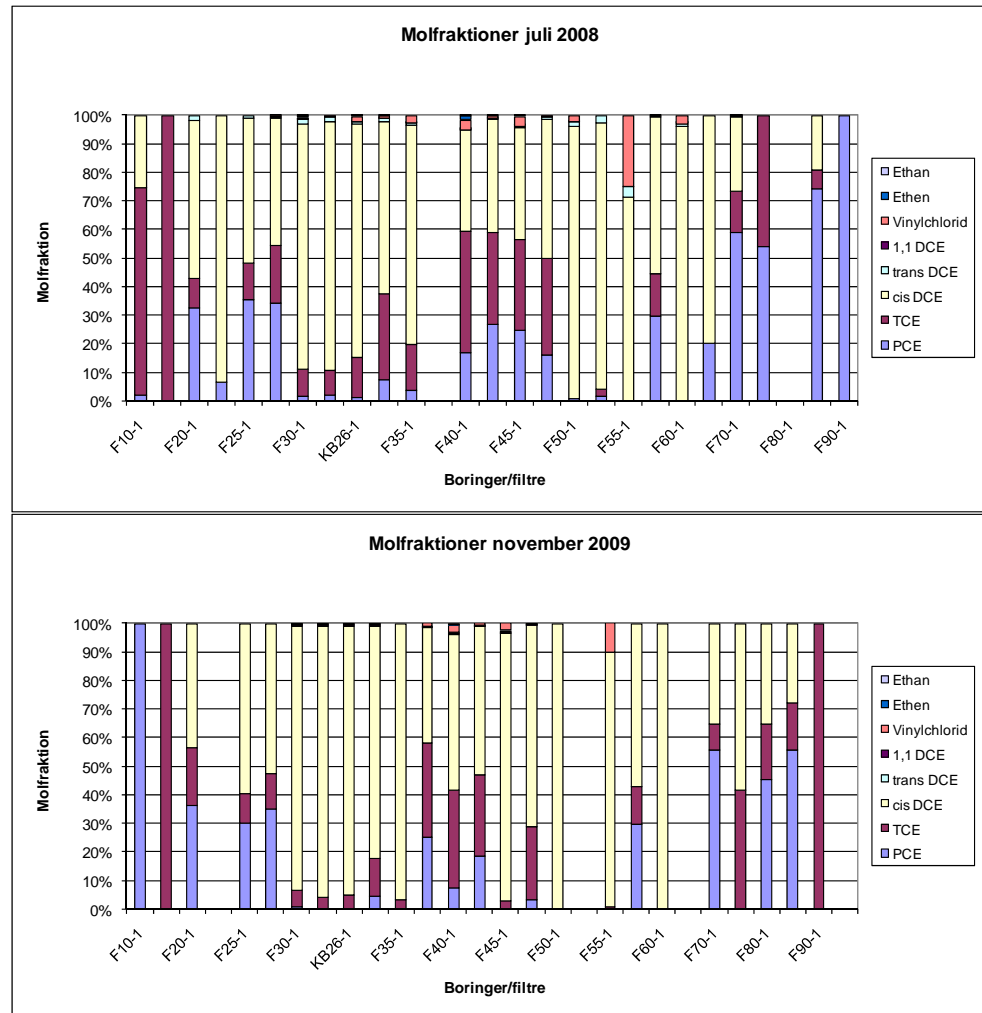


Figur 2.11: MLS-målinger fra marts og juli 2009, sum af chlorerede ethener (inkl. ethen og ethan). Den omtrentlige placering af MLS-målepunkterne er markeret med sorte prikker i koncentrationsprofilensnittet fra marts der er indsat øverst i figuren, og pile til de pågældende grafer.

MLS målingerne fra de to målerunder viser den samme overordnede tendens, nemlig at der i MLS-I og MLS-V som er de yderste, ikke er megen variation i forureningskoncentrationen over dybden; i MLS-II stiger koncentrationen omkring 1 meter under vandspejlet, og i MLS-III og MLS-IV ses en større vertikal variation i koncentrationerne, og de højeste koncentrationer når meget højere op end i de yderliggende MLS. Ved sammenligning med resultaterne fra de almindelige boringer, ser resultaterne ud til overordnet at passe fint sammen (juli 2009 data for almindelige boringer ses af).

2.3.4 Molfraktioner

Der er foretaget en beregning på molfraktioner ud fra de målte koncentrationer i de almindelige borer i F-transektet. Molfraktionerne er beregnet som beskrevet i bilag 1. Resultater fra første og sidste målerunde er vist i figur 2.13.

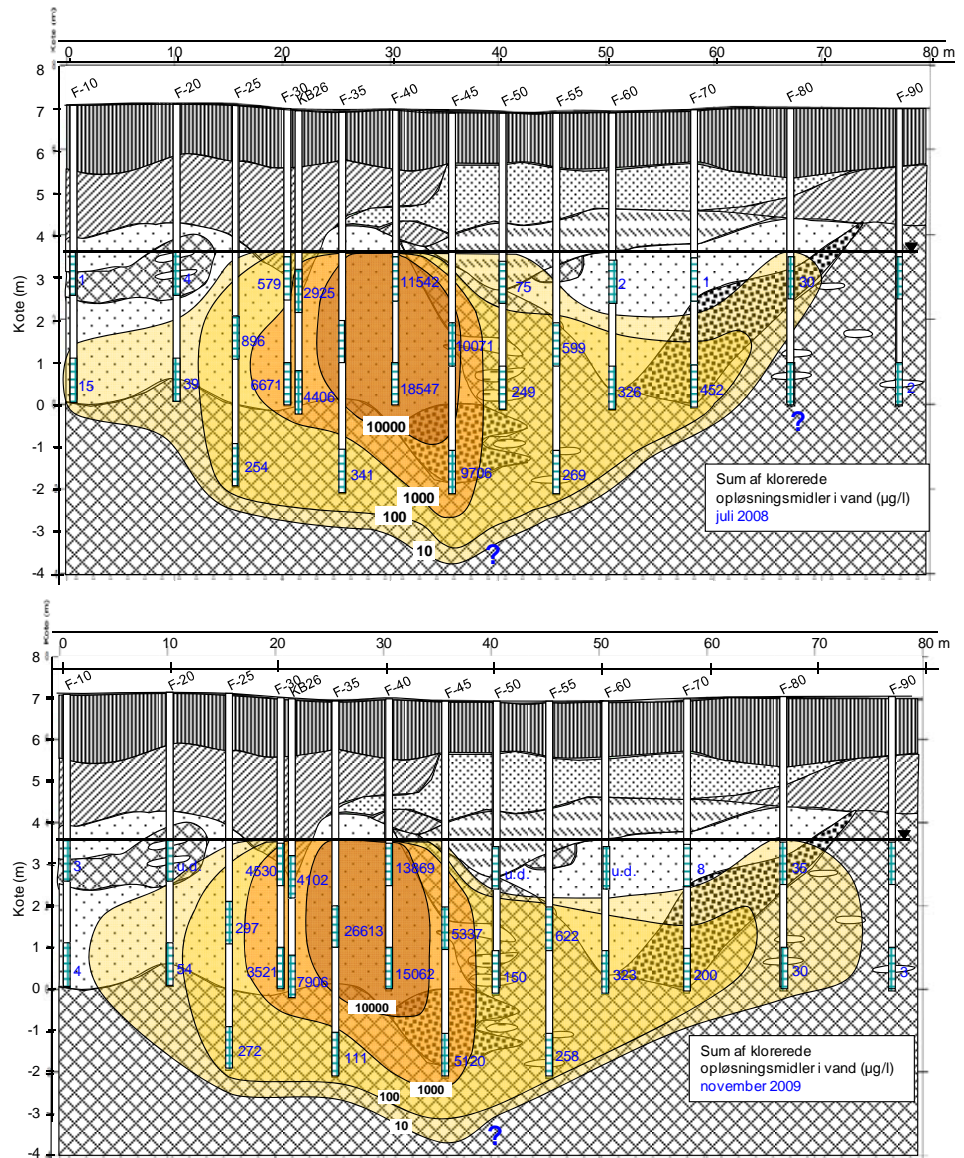


Figur 2.12: Molfraktioner i F-transektet. Øverst første målerunde (juli 2008) og nederst sidste målerunde (november 2009).

Det ses at PCE, TCE og cis-DCE generelt er dominerende i filtrene i F-transektet, både i første og sidste målerunde, og dette er også generelt observeret i de fire mellemliggende prøverunder. Der ses ikke umiddelbart nogen klar tendens i ændringerne i molfraktionerne mellem første og sidste målerunde.

2.3.5 Sammenligning af forurening og geologi

Geologien i F-transektet er indsat som baggrund for koncentrationsprofilsnittene for den første og den sidste målerunde, for at sammenligne forureningsudbredelsen med geologien, se figur 2.14. Generelt ses at den kraftigste del af forureningen overvejende findes i højpermeable zoner i sandlagene, og kun i begrænset omfang i moræneleren.



Figur 2.13: Koncentrationsprofilsnit med bagvedliggende geologi. Øverst juli 2008 og nederst november 2009. Spørgsmålstegn angiver at afgrænsningen er usikker, da der manglede afgrænsende målinger.

3 Beregning af forureningsflux

I dette kapitel er forureningsfluxen gennem F-transekten beregnet på baggrund af koncentrationer og øvrige værdier, der blev fastsat i kapitel 2. Det er ikke dette notats formål at lave en præcis estimering af forureningsfluxen ved Skuldelev, men derimod at undersøge betydningen af antal og placering af målinger for den estimerede forureningsflux, samt betydningen af tolkning af geologien i området.

Forureningsfluxen (også kaldet massefluxen) beskriver hvor meget forureningsmasse der flyttes pr. tid (enhed f.eks. kg/år). Ofte måles forureningsfluxen som massen pr. tid der bevæger sig på tværs af et kontrolplan (transekt) der er placeret nedstrøms kilden vinkelret på forureningsfanen og dækker hele forureningsfanen. Forureningsflux kan ses som et mål for den samlede forureningsbelastning fra en punktkilde. Forureningsflux kan benyttes til at sammenligne belastningen fra forskellige punktkilder, hvilket fx har vist sig nyttigt i forbindelse med prioritering af forureningskilder i et grundvandsopland. Der er brug for udvikling samt afprøvning af metoder til at kvantificere forureningsflux i praksis. En af de metoder der eksisterer til forureningsfluxbestemmelse i praksis er niveauspecifik prøvetagning, hvor koncentration og hydraulisk ledningsevne måles i alle filtrene i kontrolplanet, og herefter opdeles kontrolplanet i et cellenet. Forureningsfluxen gennem hver celle estimeres ved at hver celle tildeles en koncentration, hydraulisk ledningsevne og hydraulisk gradient, og den samlede forureningsflux udregnes som summen af forureningsfluxene fra alle cellerne [Tuxen et al., 2006a]. Det er i Tuxen et al. (2006a) vurderet at niveauspecifik prøvetagning er velegnet til at bestemme forureningsflux i praksis.

Ligningen der anvendes til beregning af forureningsfluxen (J) er [Tuxen et al., 2006a]:

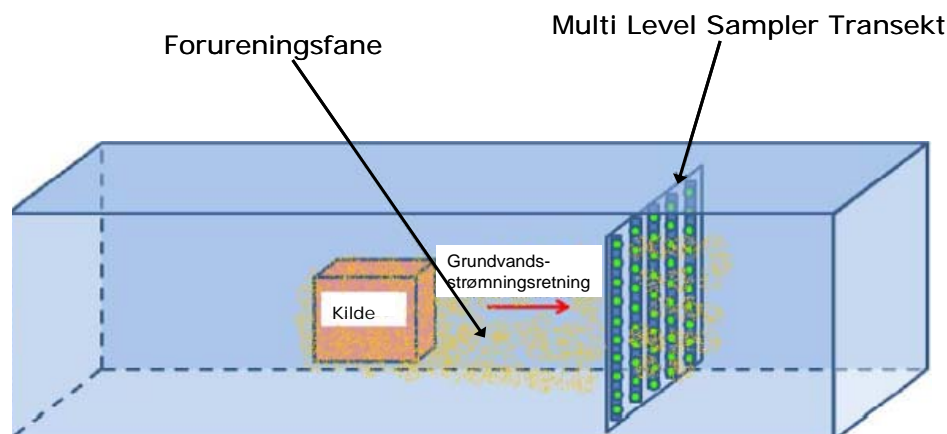
$$J_{total} = \sum_{i=1}^n A_i \cdot C_i \cdot K_i \cdot \frac{dh}{dl}$$

Hvor J_{total} er den totale forureningsflux (g/år), A_i er arealet af celle i (m^2), C_i er koncentrationen (g/m^3), K_i er den hydrauliske ledningsevne ($m/år$), dh/dl er den hydrauliske gradient og n er antallet af celler.

Der er forskellige usikkerheder ved kvantificering af forureningsflux. Det i studiet af Tuxen et al. (2006a) fundet at de største usikkerheder skyldes:

- **Afgrænsning af fane (herunder placering og antal af målepunkter):** Hele forureningsfanen skal dækkes af kontrolplanet, både horisontalt og vertikalt. Faneafgrænsning og kvalitet af forureningsfluxkvantificeringen er afhængig af placeringen og antallet af målepunkter (boringer/filtre).
- **Tidslige variationer i koncentrationer:** For metoder som niveauspecifik prøvetagning, der giver et øjebliksbillede af forureningsfluxen, vil tidslige koncentrationsvariationer være kritiske for kvantificeringen af forureningsfluxen.
- **Variationer i den hydrauliske ledningsevne:** Den hydrauliske ledningsevne i et grundvandsmagasin kan sagtens variere flere størrelsesordener, og fordi den indgår lineært i beregningen af forureningsfluxen, er bestemmelsen af hydraulisk ledningsevne derfor af afgørende betydning.

Princippet i måling af forurening gennem et nedstrøms transekt er skitseret i figur 3.1.



Figur 3.1: Skitse af princip for måling af forurening gennem nedstrøms (Multi Level Sampler) transekt (grønne punkter angiver filtre).

3.1 Beregningsmetoder

De punktmålinger der er foretaget skal integreres, sådan at transektets totale areal bliver repræsenteret. Dette kan enten gøres ved at hvert filter i transektet tildeles et rektangulært areal (herefter kaldet rektangulær-metoden), eller ved at der interpoleres mellem målepunkter i et "cellenet" (grid), hvor forfiningen kan tilpasses behovet (herefter kaldet interpoleringsmetoden). Begge disse metoder resulterer i et antal arealer (celler) med tilhørende værdier for C og K , igennem hvilke forureningsfluxen kan beregnes [Tuxen et al, 2006b].

3.2 Beregning af forureningsflux i F-transekt med rektangulærmetode
I datasæt fra Skuldelev findes ikke data for den hydrauliske ledningsevne for alle filtrene i F-transektet, men der er et antal estimerede K -værdier som er fordelt udover kontrolplanet.

For at undersøge usikkerheden i den estimerede forureningsflux ved variationer i K , tidlige variationer i C , og betydningen af antal/placering af målepunkter, er der foretaget flg. beregninger af forureningsfluxen med rektangulærmetoden:

- 1) **Homogen K i hele transektet** (K -værdi baseret på geometrisk gennemsnit af K -målinger i sand, se afsnit 2.1.2). Denne beregning er foretaget for hver af målerunderne med medtagelse af følgende typer/uddrag af koncentrationsdata:
 - a. Alle målinger på F-boringer¹ og MLS-boringer (kun data for marts '09 og juli '09)
 - b. Alle målinger på F-boringer
 - c. Kun målinger fra F-10'er boringer
 - d. Kun målinger fra F-5'er boringer
 - e. Gennemsnitsberegning ud fra det totale areal og den gennemsnitlige koncentration ved medtagelse af hhv. alle målinger på F-boringer og MLS-boringer, og kun på F-boringer.
- 2) **Geologisk K -felt med 2 zoner:** Zoneopdelt i moræner og sand, som hver har tildelt en homogen K -værdi (baseret på geometriske gennemsnit af K -målinger i

¹ I F-boringerne er inkluderet boring KB26 der også ligger ved F-transektet. Dette gælder for alle de beregninger hvor alle målinger på F-boringer er medtaget.

hhv. sand og moræneler, se afsnit 2.1.2). Denne beregning foretages for marts '09 og juli '09 og på flg. koncentrationsdata:

- a. Alle målinger på F-boringer og MLS-boringer
 - b. Alle målinger på F-boringer
- 3) **Arealer svarende til geologisk K-felt, men med homogen K i hele transektet** (K-værdi som den i pkt. 1). Beregningen foretages for marts '09 og juli '09 og på flg. koncentrationsdata:
- a. Alle målinger på F-boringer og MLS-boringer
 - b. Alle målinger på F-boringer

Ved brug af interpoleringsmetoden, som beskrives i kapitel 4, er desuden lavet beregning med heterogent (distribueret) K-felt.

3.2.1 Homogen K i hele F-transektet, og arealer afgrænses midt mellem boringer og filtre

Der er benyttet en homogen K-værdi sat til værdien for sand og en homogen værdi for dh/dl (Tabel 3.1). Vandspejlet er sat som øvre grænse for forureningen ved forureningsfluxberegningen (det er valgt at holde vandspejlet konstant for at få en bedre sammenligning mellem beregningerne på de forskellige målerunder, selvom vandspejlet ikke er fundet helt konstant i området, se afsnit 2.1.5). Som det fremgår af koncentrationsprofilsnit (figur 2.11) er der nedad ikke en egentlig afgrænsning af forureningen, idet der mangler afgrænsende målinger. Vurderingen af den nedre afgrænsning er baseret på de målte koncentrationer og geologien, og er gjort som følger: Yderst i F-transektet (F10 og F20 på venstre side og F60-F90 på højre side) går de nederste målinger ned til ca. 0 m. Da koncentrationerne her generelt er relativt lave er det derude valgt at sætte den nedre grænse til 0 m. I den inderste del af transektet (F25-F55) er der i nogle af de almindelige boringer lavet målinger ned til ca. -2 m, og i F45-1 er der i denne dybde fundet koncentrationer over 1000 µg/l. I MLS-V der ligger lige til højre for F45 er der desuden målinger helt ned til -2,65 m, hvor koncentrationerne stadig er over 1000 µg/l. På baggrund af dette og geologien i området er det valgt at sætte den nedre grænse midt i transektet til -3 m. Denne grænse bruges på hele stykket F25-F55 selvom der i F25-1, F35-1 og F55-1 ikke er fundet så høje værdier som i F45-1 (i området omkring F45, og dermed også MLS-V går sandlaget også længere ned end i resten af transektet, se figur 2.14). Det er således muligt, at den nedre grænse kunne være sat lidt højere i resten af den indre del af transektet end omkring F45 og MLS-V, men der er ikke data til at vide helt hvor, så for at få så simple beregninger som muligt er det valgt at nøjes med grænserne på 0 m og -3 m. De -3 m, der er valgt, er et stykke nede i moræneleren. I de senere beregninger, hvor der regnes med et geologisk K-felt, har det ikke stor betydning for den beregnede forureningsflux præcis, hvor afgrænsningen sættes, mens det for beregningerne med homogen K vil have en vis indflydelse på resultaterne. Dette vil blive diskuteret i forbindelse med de fundne resultater. Den nedre afgrænsning holdes også konstant for de forskellige målerunder. I det horisontale plan er afgrænsningen sat til de to yderste boringer (F10 og F90), hvor der generelt er målt meget lave koncentrationer.

Tabel 3.1: Fastholdte værdier der er benyttet til beregningerne af forureningsflux for det homogene K-felt. Værdierne for vandspejl samt hydraulisk gradient og hydraulisk ledningsevne er fra afsnit 2.1. Den nedre afgrænsning af forureningen der benyttes ved forureningsfluxberegningerne er estimeret ud fra en vurdering af målte forureningskoncentrationer og geologien.

Fastholdte værdier	Værdi	Enhed
Hydraulisk gradient (i eller dh/dl):	0,002	-
Hydraulisk ledningsevne (K):	2,83E-05	m/s
Vandspejl (øvre grænse):	3,6	m DVR90
Nedre grænse inderst (F25 - F55):	-3	m DVR90
Nedre grænse yderst:	0	m DVR90

Den valgte afgrænsning af forureningen ved forureningsfluxberegningen ses desuden af figur 3.2.

Koncentrationsmålinger

Koncentrationsmålingerne præsenteret i afsnit 2.3 og bilag 3 er benyttet. Af disse koncentrationsfordelinger ser det ud til, at der ikke er bemærkelsesværdige variationer i flowmønsteret i området, da det i hver målerunde er de samme filtre, der har de højeste koncentrationer (F35-2 og F40-1 og -2). Ud fra de målte koncentrationer ser det desuden ud til, at forureningen er relativt stationær, idet der generelt ikke er større variationer i C over de seks målerunder.

For nogle målerunder mangler der koncentrationsmålinger fra enkelte af filtrene. Her er koncentrationerne estimeret ud fra et gennemsnit af de omkringliggende målinger, dvs. måling over/under, og nabomålinger som er i højde med cellen der mangler en måling. Til disse gennemsnit er kun benyttet målte værdier, ikke andre estimerede værdier. De målinger der er brugt til estimering af hver af de manglende målinger er for hver af beregningerne:

- Beregning med alle F-målingerne:
 - Juli '08 F35-2: Gennemsnit af KB26-1 og -2; F35-1; F40-1 og -2.
 - Juli '08 F80-1: Gennemsnit af F70-1; F80-2; F90-1.
 - Dec '08 F55-1: Gennemsnit af F50-1; F55-2; F60-1².
- Beregning kun med F5'er-målingerne:
 - Juli '08 F35-2: Gennemsnit af F25-2; F35-1; F45-2.
 - Dec '08 F55-1: Gennemsnit af F45-1; F55-2.
- Beregning kun med F10'er-målingerne:
 - Juli '08 F80-1: Gennemsnit af F70-1; F80-2; F90-1.

For beregningen hvor MLS-målinger er inkluderet regnes kun på marts '09 og juli '09 data. For disse mangler der kun nogle af MLS-målingerne, ikke F-målinger (bortset fra F90-2 som er sat til 0). De manglende MLS-værdier er beregnet som et gennemsnit af MLS-målingen over og under den manglende (da målingerne her er meget tættere vertikalt end horisontalt benyttes kun de vertikale målinger til gennemsnittet). Hvis det er den øverste eller nederste MLS-måling, der mangler, sættes den til koncentrationen under/over.

Der er desuden flg. kommentarer til koncentrationerne:

- Målinger under detektionsgrænsen er i beregningerne sat til 0.

² I dette gennemsnit er inkluderet nedre filter fra F50 og F60, selvom de er lige over højden for F55-cellen, fordi der i disse borer ikke var målinger længere nede.

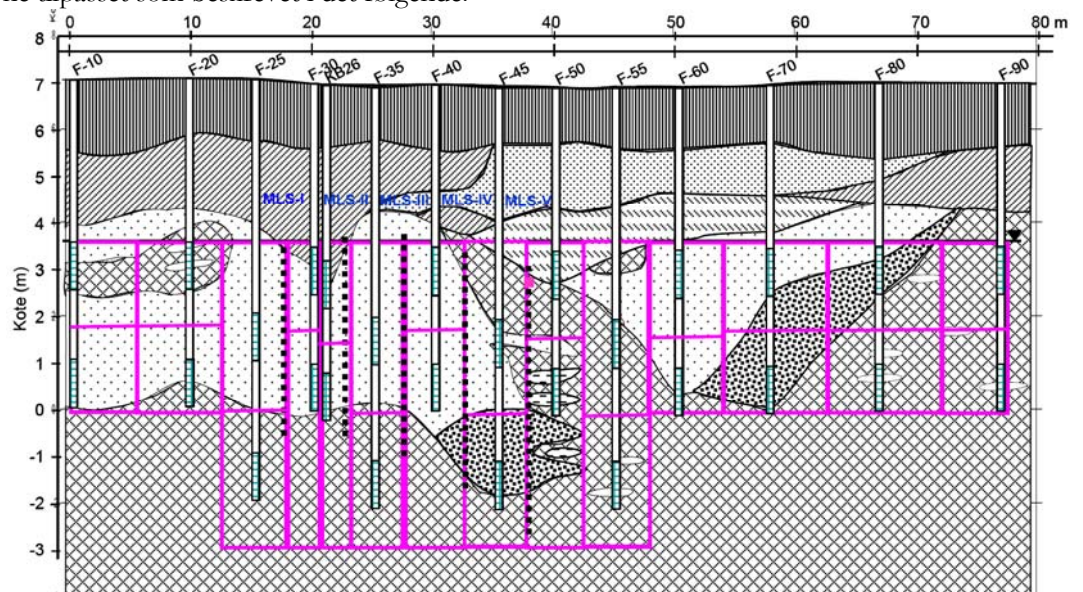
- Koncentrationen i F90-2 er kun målt i én af målerunderne, i resten af målerunderne er denne bare sat til 0, idet den var under detektionsgrænsen den ene gang den blev målt, og de øvrige koncentrationer i nærheden generelt har været meget lave.
- For december '08 er der ingen data for koncentrationer i F70-F90. Det er valgt at sætte alle koncentrationerne i december '08 i F70-F90 til 0, da koncentrationerne i de andre målerunder generelt har været relativt lave.
- De to MLS-målinger II-18 og III-22 er taget lige over det vurderede vandspejl, som jo er sat som den øvre grænse for beregningen på forureningsfluxen, og derfor er disse to koncentrationer ikke medtaget i beregningen. Målingerne i disse to filtre er relativt lave (35-136 µg/l), så det passer godt med den øvre afgrænsning.

Arealer

Hvert filter har fået tilskrevet et areal, som forureningsfluxen beregnes over. Arealet for hver beregningscelle er fastsat ved flg. afgrænsning (som også er den overordnede fremgangsmåde i Tuxen et al., 2006b, ved tolkning med rektangulære arealer):

- Horisontalt er cellerne opdelt midt mellem to tilstødende boringer.
- Vertikalt er cellerne opdelt midt mellem to tilstødende filtre.

En skitsering af beregningscellerne er vist i figur 3.2 for situationen, hvor forureningsfluxen beregnes ud fra alle målinger på F-boringer. For de andre beregninger er cellerne tilpasset som beskrevet i det følgende.



Figur 3.2: Skitse af beregningsceller (lyserøde kasser) for beregning af forureningsfluxen ved brug af alle F-målingerne.

Da der medtages forskellige antal målinger i beregningerne beskrevet ovenfor, er der også nogle ændringer i arealerne af de celler, der beregnes på. For beregninger, hvor også MLS-målinger medtages, indsættes yderligere én celle pr. MLS-måling, og de omkringliggende celler reduceres derfor tilsvarende, og for beregninger med kun en del af F-målingerne reduceres antallet af celler og derfor bliver arealet af nogle af cellerne forøget. Også ved disse andre beregninger er celleafgrænsningen fastsat midt mellem tilstødende (medregnede) boringer (inkl. MLS) og midt mellem tilstødende filtre i disse.

For beregningerne med hhv. kun F10'er og F5'er målinger ændres det totale areal desuden:

- Ved beregning med kun F10'er målinger mindskes det totale areal lidt, fordi grænsen for, hvor den nedre afgrænsning, skifter fra 0 til -3 m flyttes lidt indad i begge sider, til at være midt mellem hhv. F20/F30 og F50/F60 i stedet for midt mellem F20/F25 og F55/F60 som i de andre beregninger. Det er valgt at fastholde den nedre grænse på de -3 m i midten, selvom F10'er målingerne kun går ned til omkring 0 m.
- Ved beregning med kun F5'er målinger mindskes det totale areal en del, fordi det her er valgt at sætte den horisontale afgrænsning i begge retninger til en afstand svarende til afstanden fra den yderste F5'er boring til den næste (dvs. afgrænsningen er sat til ca. 10 m til venstre for F25 og ca. 10 m til højre for F55).

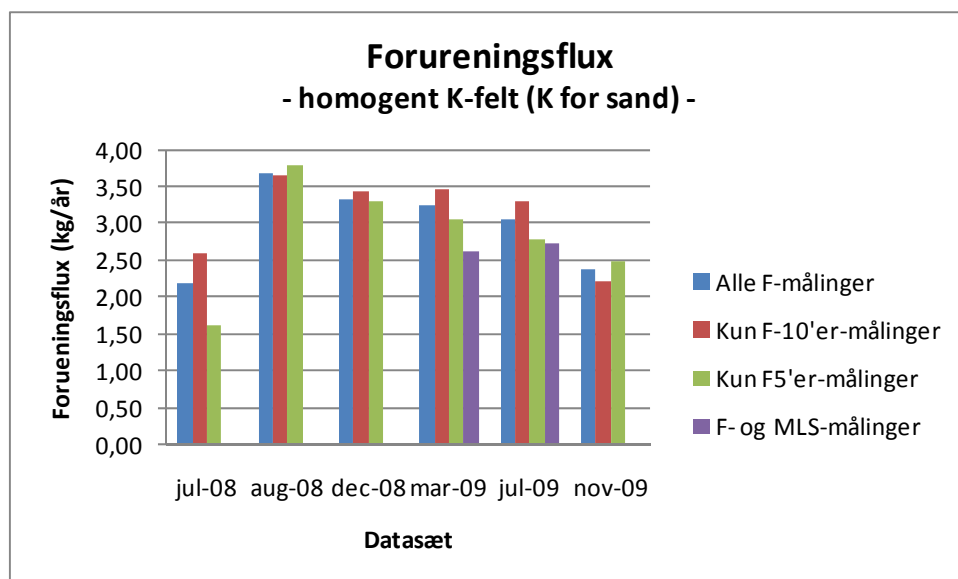
De totale arealer benyttet ved de forskellige beregninger er vist i tabel 3.2.

Tabel 3.2: Totale arealer der regnes med ved beregning af forureningsflux med forskellige mængder data, samt antal af boringer pr. m².

Boringer	Areal (m ²)	Antal målepunkter	Boringer pr. m ²
Alle F- og MLS-målinger	380	121	0,3
Alle F-målinger	380	28	0,07
Kun F10'er-målinger	366	18	0,05
Kun F5'er-målinger	325	8	0,02

Resultater for homogen K beregning

Resultaterne af beregningerne er vist i figur 3.3. Overordnet viser disse resultater, at forureningsfluxen beregnet med medtagelse af de forskellige mængder data, og med datasæt for de forskellige målerunder ikke varierer meget.



Figur 3.3: Beregnet forureningsflux for de forskellige datasæt og med medtagelse af forskellige mængder af data.

For disse datasæt kan altså gøres flg. iagttagelser:

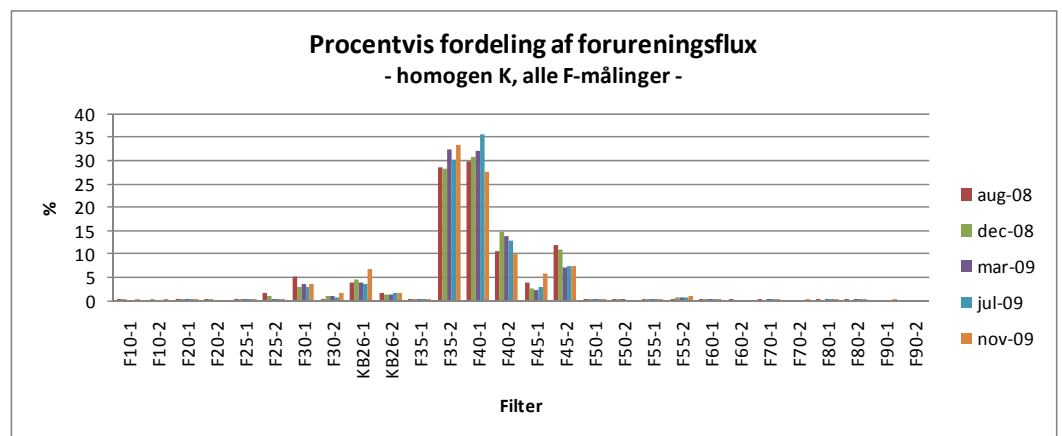
- Tidslige variationer i forureningskoncentration ser for disse datasæt ikke ud til at være afgørende for den estimerede forureningsflux. Der ses dog en svag

tendens til at forureningsfluxen falder fra august '08, men tendensen vurderes så svag, at et fald i forureningsfluxen ikke kan konkluderes udelukkende ud fra disse data.

- Generelt ses det, at der ikke er meget forskel på de estimerede forureningsfluxe ved medtagelse af forskellige mængder af data. Dette viser, at der er tale om et robust datasæt, som repræsenterer forureningen i transektet godt. Data-sættene kan også "tåle" at blive reduceret uden at resultatet ændres væsentligt (med undtagelse af juli '08 hvor der mangler data for det filter, hvor der generelt er fundet den kraftigste forurening).

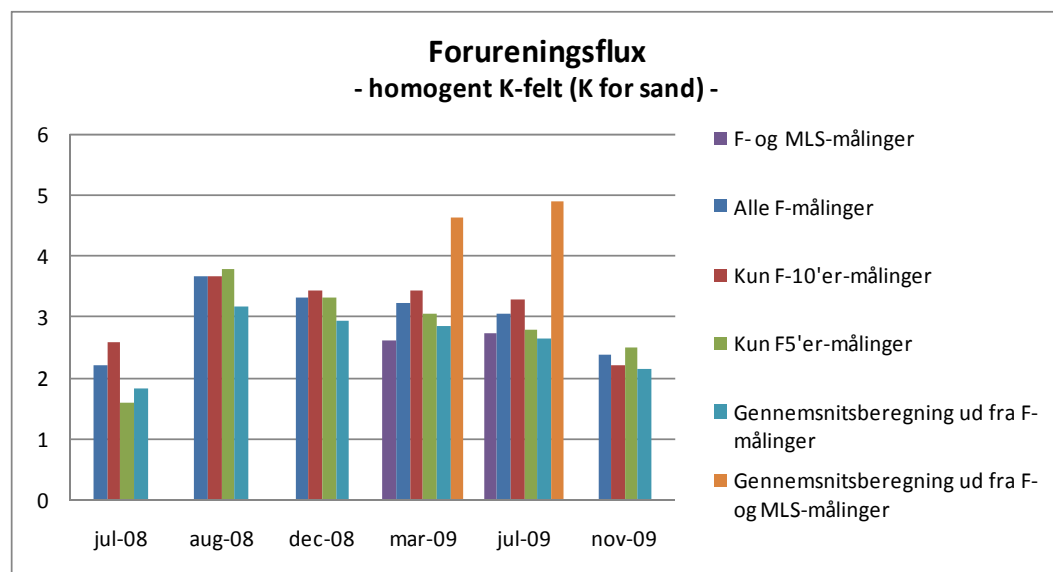
Den estimerede forureningsflux i juli '08 er dog generelt noget lavere end de andre, specielt for beregning kun med F5'er målinger, hvilket vurderes primært at skyldes at der mangler måling for F35-2 som i de andre målerunder har den højeste koncentration af F-målingerne. Det påvirker især beregningen med kun F5'er målinger idet de næsthøjeste koncentrationer, som er i F40 heller ikke medtages. For yderligere at beskrive betydningen af den manglende F35-2-måling er lavet en beregning på den procentvise fordeling af forureningsfluxen i F-transektet for beregningerne med alle F-målinger, for alle andre datasæt end juli '08.

Resultatet er vist i figur 3.4. Det ses at de klart største bidrag til forureningsfluxen stammer fra F35-2 og F40-1. Ved sammenligning med de målte koncentrationer (afsnit 2.3) ses at koncentrationerne er højest i F35-2, og generelt er en del højere end i F40-1 og F40-2, som i de fleste målerunder har koncentrationer der er relativt tæt på hinanden. At F35-2 og F40-1 giver ca. samme bidrag til forureningsfluxen, skyldes at arealet, som F40-1 tilskrives, er en del større end arealet F35-2 tilskrives. På samme måde er det meget større bidrag til forureningsfluxen i F40-1 end i F40-2 også generelt pga. at arealet som F40-1 tilskrives er mere end dobbelt så stort som arealet for F40-2.



Figur 3.4: Procentvis fordeling af forureningsflux i F-transekt for beregninger med homogen K og brug af alle F-målinger.

Der er desuden lavet to gennemsnitsberegninger af forureningsfluxen ved at benytte det totale areal og den gennemsnitlige målte koncentration for hhv. alle F-målinger, og alle F-målinger og MLS-målinger. Resultaterne er vist sammen med de andre beregnede forureningsfluxe i figur 3.5.



Figur 3.5: Beregnet forureningsflux for forskellige datasæt og medtagelse af forskellige mængder af data, samt gennemsnitsberegninger på forureningsfluxen.

Det ses at gennemsnitsberegningen som er baseret på den gennemsnitlige koncentration af alle målinger fra F-boringerne generelt passer godt med de andre beregnede forureningsfluxe. Derimod er gennemsnitsberegningen baseret på den gennemsnitlige koncentration af alle F- og MLS-målinger klart overvurderet i forhold til de andre beregninger. Dette vurderes at skyldes, at MLS-målingerne generelt stammer fra det mest forurenede område, og derfor er der målt mange meget høje koncentrationer, men de arealer, som hver MLS-måling repræsenterer, er generelt meget små i forhold til arealerne som F-boringerne repræsenterer. Derimod er arealerne når der kun bruges F-målinger af nogenlunde samme størrelsesorden. Det må antages at hvis alle arealerne som forureningsfluxen beregnes igennem er lige store og der beregnes med homogen K og dh/dl , så vil en gennemsnitsberegning med brug af den gennemsnitlige koncentration og det totale areal give det samme resultat som hvis der beregnes for hver celle for sig.

Alt i alt bekræfter denne analyse, at der er tale om et robust datasæt, der ikke i større grad påvirkes af selve beregningsmetoden og halvering i mængden af koncentrationsdata.

3.2.2 Geologisk K-felt

Det er her valgt at undersøge om heterogen fordeling af K har betydning for den estimerede forureningsflux. Dette er først gjort ved at opdele transektet i en forenklet geologi med områder med hhv. sand og moræneler der har hver sin K-værdi. De benyttede K-værdier er præsenteret i Tabel 3.3.

Tabel 3.3: K-værdier for hhv. sand og moræneler (fra afsnit 2.1.2), og gennemsnittet af disse.

Hydraulisk ledningsevne (K)	Værdi	Enhed
Sand	2,83E-05	m/s
Moræneler	3,50E-09	m/s
Gennemsnit sand og moræneler	1,42E-05	m/s

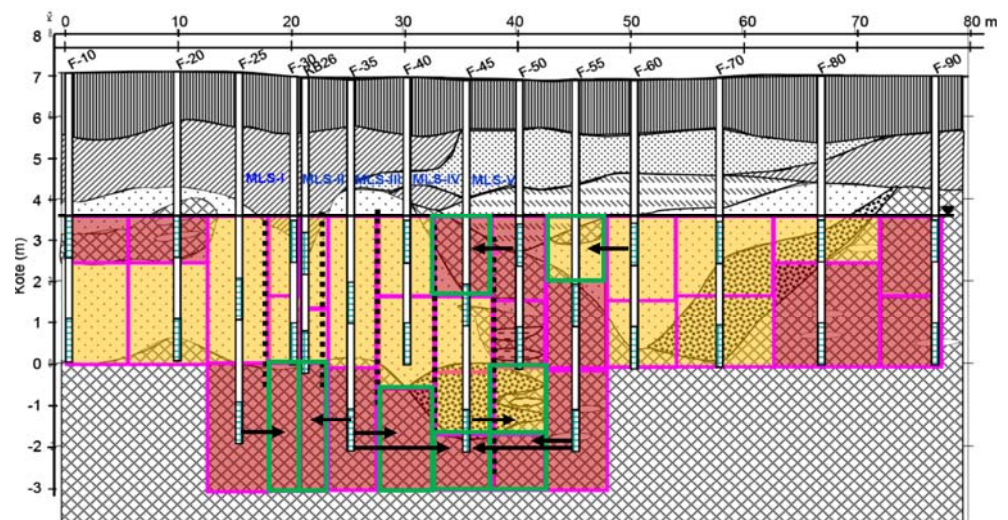
Arealer

Til denne udregning er det cellenet, der blev benyttet til beregningen af forureningsfluxen med homogen K (med rektanglernes grænser midt mellem boringer og filtre) tilpasset for at tage højde for geologien. Dette er gjort med udgangspunkt i det geologiske tværsnit for F-transektet (figur 2.5). Tilpasningen er lavet således, at enkelte vertikale grænser er rykket, så det passer med geologien, og der er nogle steder indsat ekstra beregningsceller (primært i bunden) for at tage højde for skift mellem sand og moræneler.

Følgende ændringer er lavet i arealinddelingen for at tilpasse til geologien i beregninger med kun F-målinger:

- Boringer der har ændret vertikal grænse mellem filtre pga. geologi:
 - F10 og F20 opdelt i moræneler fra 2,5 m og op, og sand under.
 - F80 opdelt i sand fra 2,5 m og op, og moræneler under.
- Boringer der er opdelt vertikalt midt mellem filtre, men har indsat ekstra celler pga. geologi:
 - F30 og KB26 har begge ekstra celle fra 0 m og ned med moræneler.
 - F40 har ekstra celle fra -0,5 m og ned med moræneler.
 - F45 har ekstra celle fra 1,75 m og op med moræneler, og ekstra fra -1,75 m og ned med moræneler.
 - F50 har ekstra celle med sand fra 0 m til -1,75 m, og herfra og ned en celle med moræneler.
 - F55 har ekstra celle med sand fra 2 m og op.

Afgrænsningen af det totale areal som forureningsfluxen beregnes over, er den samme som for beregningen med homogen K for alle målingerne, og derfor er det totale areal også for disse beregninger på 380 m². Den ændrede arealinddeling for beregning kun med F-målinger kan ses af figur 3.6.



Figur 3.6: Skitse af celler (lyserøde kasser) til beregning af forureningsflux for geologisk K-felt ved brug af kun F-målinger. Brun baggrund=moræneler, gul=sand. Grønne kasser er ekstra celler der er indsat for at tilpasse til geologi. Sorte pile viser hvilke koncentrationsmålinger der benyttes i de ekstra celler ved beregningen med kun F-målinger.

Arealer til beregning hvor MLS-målinger også medtages

Når der også anvendes MLS data til forureningsfluxberegningen, ændres arealinddelingen, hvor disse er. I figur 3.6 er indtegnet omtrentlig placering af MLS i forhold til den geologiske opdeling for at give et skitseoverblik. Opdelingen i celler når MLS også er medtaget i beregningen er ikke indtegnet, da det ville blive for svært at se. Ligesom

for de almindelige boringer deles horisontalt midt mellem boringer (inkl. MLS) og vertikalt midt mellem målepunkterne. Der er herefter foretaget en tilpasning af arealerne i forhold til geologien. Det er valgt at følge den samme geologiske inddeling i kasser som ved arealinddelingen uden MLS (figur 3.6). Da MLS-målingerne ligger midt mellem to tilstødende F-boringer, er flere MLS placeret netop der, hvor den geologiske kasseinddeling horisontalt skiller mellem moræner og sand. I disse celler regnes derfor med en gennemsnitlige K-værdi for sand og moræner. Vertikalt skilles celleafgrænsningen mellem de to MLS, der ligger på hver sin side af grænsen mellem sand og moræner. Hvis der ikke er helt den samme vertikale afgrænsning i geologien for de to boringer, der ligger på hver side af MLS'en (men stadig inden for den samme MLS-celle), sættes grænsen til gennemsnittet af de to afgrænsninger.

Fordi MLS filtre er placeret med kort aftsand bliver arealet for hver MLS-måling generelt relativt lille.

Flg. ændringer er lavet i MLS-cellernes arealinddeling for at tilpasse til geologien:

- Der er indsat en ekstra celle nederst i MLS IV, for at tage højde for at der lige under nederste måling er vurderet at være moræner på begge sider af MLS'en, hvorimod der over iflg. kasseinddelingen er moræner på den ene side og sand på den anden. Koncentrationen i ekstrapunktet er sat til den nederste MLS IV-måling (MLS IV-2), idet denne måling ud fra den oprindelige geologiske vurdering (der ikke er simplificeret til kasser) ser ud til faktisk at ligge i moræneleren.
- Følgende grænser for MLS-celler er rykket for at få (næsten) den samme grænse mellem sand og moræner som ved beregningerne med kun F-målingerne:
 - MLS-I: Nedre grænse til moræner 0,05 m (mellem filter 3 og 4).
 - MLS-II: Nedre grænse til moræner -0,025 m (mellem filter 3 og 4).
 - MLS-III: Nedre grænse til halvt sand halvt moræner -0,05 m (mellem filter 6 og 7), og nedre grænse til moræner -0,5 m (mellem filter 4 og 5).
 - MLS-IV: Øvre grænse til halvt sand halvt moræner 1,75 m (mellem filter 15 og 16), nederste grænse til halvt sand halvt moræner -0,5 m (mellem filter 6 og 7) og nedre grænse til moræner -1,75 m (under filter 2).
 - MLS V: Øvre grænse til moræner 1,75 m (mellem filter 18 og 19), øvre grænse til halvt sand halv moræner 0 m (mellem filter 11 og 12), og nedre grænse til moræner -1,75 m (mellem filter 4 og 5).

Koncentrationer

Til disse beregninger benyttes kun de to datasæt fra marts og juli '09, idet den tidlige variation allerede har været undersøgt og ikke er fokus her. De to datasæt er udvalgt fordi de begge har MLS-målinger, samt komplette datasæt for F-boringerne (bortset fra F90-2, der som nævnt er sat til 0). Ligesom ved beregningen med homogen K, er manglende koncentrationer fra MLS beregnet som gennemsnittet af MLS-målingen over og under, og hvis der kun er én (enten over eller under) sættes den bare lig den³. Der benyttes nu kun målinger fra den samme geologi til beregning af gennemsnittene, men da der ikke er nogle manglende MLS-værdier, der vertikalt ligger lige på grænsen mellem moræner og sand i forhold til vurderingen i figur 3.6, er det de samme som

³ For den manglende måling i MLS-V-24 for juli '09 er der ingen måling over, og heller ingen lige under, derfor er koncentration sat til MLS-V-21, som er den første målte værdi under MLS-V-24 i juli '09.

for homogen K (de MLS-målinger der ligger på en grænse, hvor der horisontalt afgrænses, så der på den ene side er moræneler og på den anden side er sand, regnes med i gennemsnit både for sand og moræneler, hvor der mangler målinger).

Koncentrationen i de ekstra celler, der er indsat for at tilpasse til geologien, er beregnet som et gennemsnit af målte koncentrationer (ikke værdier, der allerede selv er estimeret ud fra andre) i filtre der støder op til pågældende beregningscelle og er i samme geologi. I praksis betyder det, at for beregning kun med F-målinger er de fleste ekstra cellers koncentration bare sat lig en nabokoncentration, hvorimod når der også inkluderes MLS-målinger, er de fleste et gennemsnit af flere. I én ekstra celle hvor der ikke var målte værdier i nogle af nabocellerne for F-målingerne, er der taget et gennemsnit af de to målinger én gang længere ude på hver side (i beregningerne hvor MLS er inkluderet er der nabomålinger der kan bruges). De ekstra celler og hvilke koncentrationer der er brugt i disse fremgår for beregning kun med F-målinger af figur 3.6. For beregningen hvor også MLS-målinger inkluderes er arealerne tilpasset til dette, og koncentrationerne i de ekstra celler er beregnet ud fra MLS- og F-målinger som følger (dog er ikke medtaget målinger hvis de ikke er målt, men estimeret ud fra andre):

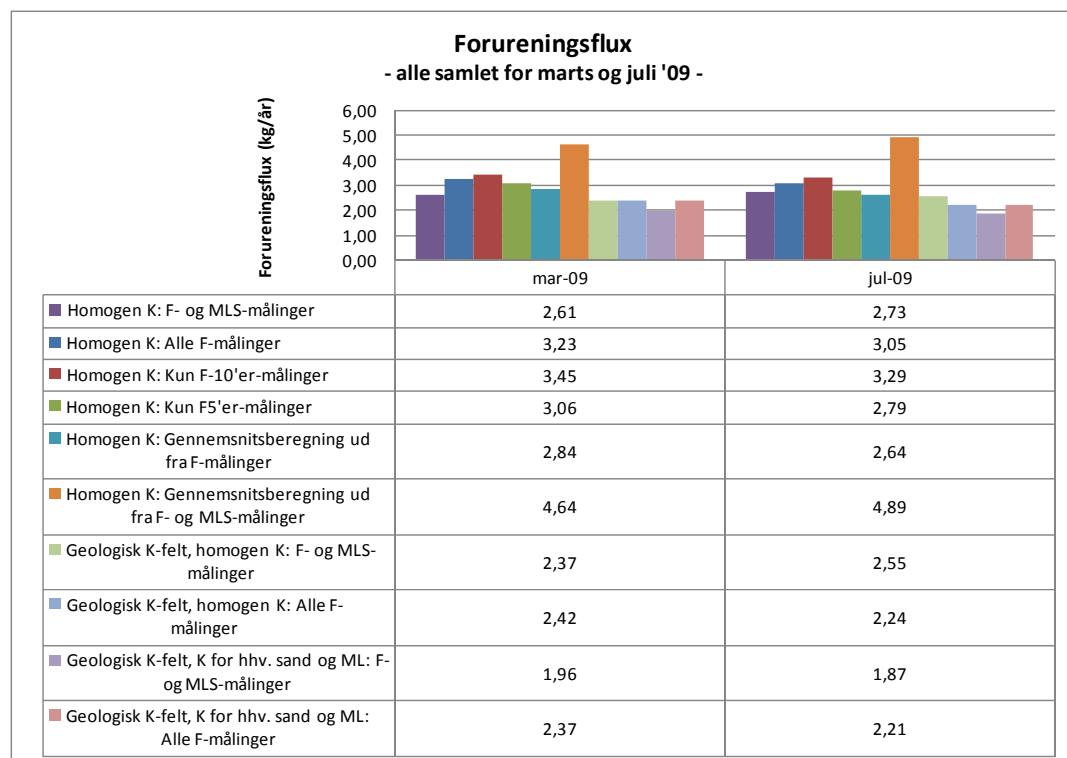
- Ekstra nederst F30: Gennemsnit af MLS-I 1-3
- Ekstra nederst KB26: Gennemsnit af MLS-II 1-3
- Ekstra nederst F40: Gennemsnit af MLS-III 3-4 og MLS-IV 2-6
- Ekstra nederst F45: Gennemsnit af MLS-V 1-4
- Ekstra øverst F45: Gennemsnit af MLS-IV 16-22 og MLS-V 19-22,24.
- Ekstra næstnederst F50: Gennemsnit af MLS-V 5-11
- Ekstra nederst F50: Gennemsnit af MLS-V 1-4 og F55-1
- Ekstra øverst F55: Lig med F60-2

3.2.3 Arealer fra geologisk K-felt men med homogen K

Det er også valgt at foretage forureningsfluxberegninger med det cellenet der blev bestemt for det geologiske K-felt, men med beregning med homogen K, for at undersøge betydningen af den nye areal-opdeling i forhold til opdelingen midt mellem hver boring og filter, hvor der ikke var rykket på cellegrænser eller indsat ekstra celler for at tage højde for geologien. Til disse beregninger benyttes K-værdien for sand (ligesom for de andre beregninger med homogen K). Udover den homogene K-værdi er disse beregninger helt de samme som for det geologiske K-felt.

3.2.4 Samlede resultater

De samlede resultater for alle forureningsfluxberegningerne for marts '09 og juli '09 er vist i figur 3.7.



Figur 3.7: Samlede resultater for alle forureningsfluxberegningerne for marts '09 og juli '09.

Af de samlede resultater ses det at der overordnet ikke er stor variation i den estimerede forureningsflux med de forskellige beregninger, bortset fra den gennemsnitlige beregning baseret på den gennemsnitlige koncentration af både F- og MLS-målinger.

Det ses tydeligt, at beregningerne med det geologiske K-felt generelt giver lavere resultater end det homogene K-felt. På det geologiske K-felt er både lavet beregninger med homogen K (dvs. det er kun de nye arealer og ekstra indsatte celler der er ændret ifht. de homogene K beregninger der blev lavet i starten), og beregninger med hver sin K-værdi for sand og moræneler. Det ses, at beregningerne med de to forskellige K-værdier giver de laveste resultater, men for beregningerne kun med alle F-målingerne er forskellen meget lille, hvorimod for beregningerne, hvor også MLS er medtaget, er forskellen noget større. Dette vurderes at skyldes at for beregningen, hvor MLS ikke er medtaget er koncentrationerne i de celler, der ligger i moræneleren ret lave (og derfor også i de indsatte ekstra-celler i moræneleren), og derfor har de ikke væsentlig betydning for den samlede forureningsflux, selvom de ganges med den samme K-værdi som de andre. I nogle af MLS-målingerne er der derimod fundet ret høje koncentrationer i moræneleren (og derfor er koncentrationerne i nogle af de indsatte ekstra-celler også ret høje), og derfor har det større betydning hvilken K-værdi der bliver anvendt. De laveste værdier er fundet, når MLS-målingerne også inkluderes i beregningerne, og der er benyttet det geologiske K-felt med forskellig K-værdi for sand og moræneler.

Ved beregningerne med det geologiske K-felt og brug af hver sin K-værdi i sand og moræneler undgås for beregningerne i dette notat en stor del af usikkerheden ved at forureningen ikke er egentligt afgrænset nedad i moræneleren, idet den hydrauliske ledningsevne i moræneleren er næsten en faktor 10^4 mindre end i sandet, og derved bliver bidraget til forureningsfluxen fra moræneleren ubetydeligt.

I forhold til de relativt små variationer i den estimerede forureningsflux i dette notat, vurderes det, at have langt større betydning om den rigtige K -værdi er benyttet, fremfor om forureningen er helt præcist beskrevet. Variationer i dh/dl vil naturligvis også have betydning, men som det fremgår af afsnit 2.1, er de observerede variationerne af K i området meget større end variationerne af dh/dl .

4 Geostatistisk metode - beskrivelse og resultater

4.1 Baggrund og formål

Forureningsfluxbestemmelser vil altid være forbundet med en vis grad af usikkerhed. Disse usikkerheder er i høj grad relateret til kvaliteten og antallet af målinger i transektet samt den spatielle (rumlige) og tidslige variabilitet i både koncentrationsfordelingen og grundvandsstrømningen henover transektet. Målingerne selv er usikre (måleusikkerhed), der er kun et begrænset antal af dem og samtidig repræsenterer disse kun værdien i specifikke punkter og til et bestemt tidspunkt. For at bestemme forureningsfluxen gennem transektet af multi-level samplere er det derfor nødvendigt at interpolere de målte koncentrationer og hydrauliske ledningsevner langs transektet. På grund af den ukendte heterogenitet i fordelingen af både koncentrationerne og de hydrauliske ledningsevner vil en sådan interpolation være forbundet med usikkerheder. Det er klart, at jo flere målinger, der er tilgængelige langs transektet desto mere nøjagtig vil den estimerede forureningsflux forventes at være.

I takt med at forureningsfluxbestemmelser i stigende grad anvendes som mål i forbindelse med risikovurderinger og afværgelse af forurenede lokaliteter, er der også begyndt at komme mere og mere fokus på at bestemme de tilhørende usikkerheder. En estimering af usikkerhederne vil i sidste ende kunne forbedre grundlaget for de beslutninger, der ønskes taget baseret på fluxbestemmelserne og kan afklare hvorvidt der er behov for indhentning af flere data eller ej.

I litteraturen findes der allerede enkelte eksempler, hvor usikkerhederne på fluxbestemmelser er blevet analyseret og estimeret. Disse studier spænder fra helt simple til meget omfattende og beregningstunge analyser. Programmet Mass Flux Toolkit udviklet af Groundwater Services Inc. (2006) er et af de første forsøg på en rimelig simpel metode til at kvantificere usikkerhederne ved fluxbestemmelser. Mass Flux Toolkit inkluderer tre forskellige usikkerhedsanalyser og kan illustrere i) hvordan en forureningsfluxbestemmelse afhænger af data fra hvert enkelt målepunkt i transektet vha. en såkaldt cross-validation test, ii) hvorledes forureningsfluxen påvirkes af måle- og inputusikkerheder via simpel Monte Carlo simulering, og iii) hvordan fluxbestemmelsen influeres af usikkerheder på interpolationen af koncentrations- og flowmålingerne i transektet via anvendelse af tre forskellige interpolationsrutiner (lineær, nearest neighbour og log-transformation) (Farhat et al., 2006). Nyere eksempler på analyser af usikkerhederne ved forureningsfluxbestemmelser kan findes i Cai et al. (2010) og Li et al. (2007), der begge baserer deres analyse på geostatistisk conditional Monte-Carlo simulation, samt i de mere beregningstunge studier af Schwede & Cirpka (2010) og Troldborg et al. (2010), der er baseret på invers geostatistisk modellering.

Formålet her er at opstille og præsentere en metode til kvantificering af usikkerhederne ved forureningsfluxbestemmelser gennem et multi-level sampling transekt (dvs. baseret på niveau-specifik prøvetagning). Målet er en metode, der er mere avanceret end de eksisterende simple modeller, men som samtidig ikke kræver tunge numeriske beregninger og derfor kan anses som et mere avanceret screeningsværktøj for rådgivere og andre interessenter. Den nye metode er ligesom flere af de seneste usikkerhedsstudier baseret på geostatistik. Lineære geostatistiske metoder er praktiske værktøjer, der bl.a. inkluderer de populære kriging metoder og har været anvendt indenfor en lang række områder. Den nye metode kan tage højde for i) måleusikkerheder samt ii) usikkerhederne forbundet med heterogeniteten i fordelingen af både koncentrationerne og den hydrauliske ledningsevne henover transektet.

I det følgende vil metoden til kvantificering af usikkerhederne ved forureningsfluxbestemmelser blive beskrevet. Metoden vil blive illustreret ved at afprøve den på det tilgængelige datasæt fra F-transektet ved Skuldelev. Hele metoden er implementeret i programmet R (R home page: <http://www.r-project.org>). Til generering af unconditional random fields er der gjort brug af den geostatistiske package, gstat (Pebesma, 2004).

4.2 Metodebeskrivelse

Vi vil her benytte en geostatistisk metode til at interpolere hhv. koncentrations- og konduktivitetmålingerne i transektet. Fordelen ved de geostatistiske metoder er, at de kan tage højde for den spatielle heterogenitet af den variabel, der ønskes interpoleret. Ved at benytte disse metoder kan man således opnå et estimat af både den mest sandsynlige rumlige fordeling af den variable, men også af hvad usikkerheden er på den estimerede fordeling. Forudsat at acceptable geostatistiske modeller for både koncentrations- og konduktivitetsfordelingen langs transektet kan defineres, er det således muligt at analysere, hvorledes usikkerheden ved interpoleringen af hhv. koncentrationerne og konduktiviteterne forplanter sig videre til bestemmelsen af forureningsfluxen. Dette vil vi her gøre vha. conditional Monte Carlo simulation. Den præsenterede metode svarer lidt til metoderne beskrevet i hhv. Li et al. (2007) og Cai et al. (2010). Den primære forskel er, at vi ved interpoleringen af koncentrationerne vil benytte en analytisk forureningstransport-model til at simulere den overordnede rumlige forureningsfordeling (trend) henover transektet.

I det følgende beskrives først hvordan usikkerheden ved interpoleringen af hhv. koncentrationerne og de hydrauliske ledningsevner/grundvandsstrømningen henover transektet bestemmes. Dernæst beskrives hvorledes disse usikkerheder kan forplantes videre til at give usikkerheden på forureningsfluxbestemmelsen.

Metoden er overordnet set baseret på følgende antagelser:

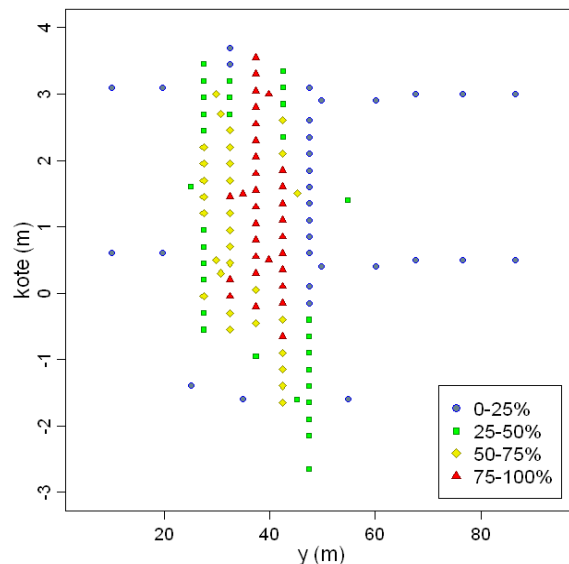
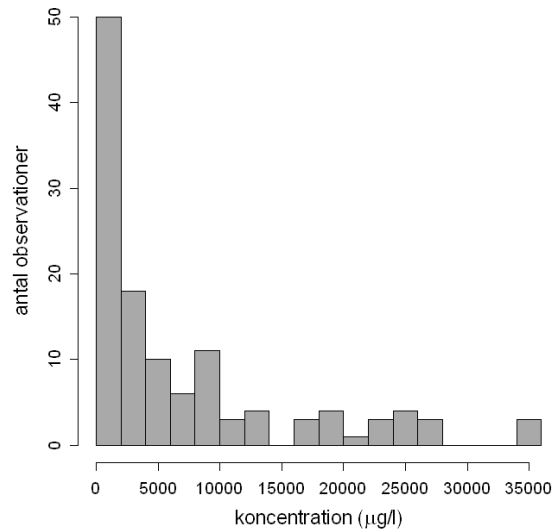
- Den heterogene fordeling af hhv. koncentrationerne og de hydrauliske ledningsevner antages langs transektet at kunne beskrives som en *stationær stokastisk spatiel proces*. Dette betyder i princippet, at der henover transektet tildeles tilfældige værdier af de to variable (dvs. koncentration og hydrauliske ledningsevne) baseret på antagelsen, at variable (eller en transformation af disse) er normalfordelte med en given middelværdi og varians. Samtidig tages højde for spatial korrelation, dvs. at hvis der for eksempel er tildelt (eller observeret) en lav hydrauliske ledningsevne i et givet punkt, da vil der også være større sandsynlighed for at værdierne i et område omkring dette punkt er lave og omvendt.
- Koncentrationsfordelingen og fordelingen af de hydrauliske ledningsevner antages langs transektet uafhængig af hinanden. I realiteten er der sandsynligvis en eller anden form for kompleks korrelation mellem de to fordelinger, som bl.a. vil afhænge af hvordan strømningsbilledet og forureningskilden ser ud opstrøms transektet. En estimering af en sådan krydskorrelation er ikke umiddelbart ligetil og vil sandsynligvis kræve enten et meget stærkt datasæt langs transektet eller et ensemble af numeriske flow og transport simuleringer. Indflydelsen af krydskorrelationen mellem de to fordelinger ved transektet vil sandsynligvis aftage jo længere afstanden er mellem forureningskilden og transektet og med aftagende heterogenitet. I tilfælde af signifikant kryds-korrelation vil der i princippet være behov for en co-kriging metode for at opnå korrekte usikkerhedsestimater (Cai et al., 2010; Kitanidis, 1997).
- Både koncentrations- og ledningsevnedataene er behæftet med måleusikkerheder. For koncentrationsdataene antages det, at måleusikkerheden er normalfordelt givet ved en standardafvigelse (σ_m), der stiger lineært med den målte koncentrations-

værdi ($C_{m\grave{a}lt}$), dvs.: $\sigma_{cm} = abs_c + rel_c * C_{m\grave{a}lt}$. Den absolutte måleusikkerhed (abs_c) kan betragtes som usikkerheden på koncentrationsmålinger under detektionsgrænsen, mens rel_c er den relative usikkerhed. Vi benytter her en absolut usikkerhed på 10 $\mu\text{g}/\text{l}$ og en relativ usikkerhed på 0,15, hvilket er vurderet på baggrund af variabiliteten af koncentrationsmålingerne fra de forskellige datasæt (fra juli 2008 til november 2009). For de hydrauliske ledningsevner antages det, at måleusikkerheden er log-normalfordelt, dvs. at usikkerheden er normalfordelt for de log-transformerede ($\ln K$) hydraulisk ledningsevne data. Som beskrevet i afsnit 2.1.2 er den hydrauliske ledningsevne estimeret ud fra kornstørrelsefordelinger vha. en række forskellige empiriske udtryk. På den baggrund er standardafvigelsen på $\ln K$ (σ_m) estimeret til 0,6.

4.3 Interpolation af koncentrationerne

De lineære geostatistiske metoder fungerer generelt bedst for variable, der følger en normalfordeling. Geostatistisk interpolering af koncentrationsdata er derfor en udfordring, da koncentrationer åbenlyst ikke følger en normalfordeling, idet de hverken kan være negative eller over den vandige opløselighed. Dette er illustreret i figur 4.1 (øverst), hvor et histogram af koncentrationsdataene fra marts 2009 er vist. Det ses, at fordelingen af data er skæv og ikke umiddelbart varierer omkring en åbenlys middelværdi. Dette problem kan til en vis grad imødekommes ved at transformere koncentrationsdataene og derefter foretage interpoleringen af de transformerede data, som det for eksempel er gjort i Kitanidis & Shen (1996).

En anden udfordring ved interpolering af koncentrationsdata fra et transekt er, at der typisk vil kunne observeres en trend i data. Denne trend er et resultat af flow og forureningstransporten fra forureningskilden til transektet. Dette er illustreret i figur 4.1 (nederst), hvor placeringen og den relative størrelse af koncentrationsdata fra marts 2009 er vist. Det ses tydeligt, at der er et centralt område, hvor koncentrationerne er højest, og at koncentrationsniveauet aftager med stigende afstand til dette centrale område. Ved anvendelsen af geostatistiske metoder antages det ofte, at trenden (eller middelværdien) er konstant over hele domænet (dette kaldes ordinær eller simpel Kriging), og at data varierer omkring denne middelværdi. Dette er for eksempel tilfældet i studiet af Cai et al. (2010). Denne tilgang er imidlertid uhensigtsmæssig i tilfælde med åbenlyse trends i data. Medmindre at en transformation af data også fjerner en sådan trend, vil det være nødvendigt at tage højde for denne trend.



Figur 4.1: Plots af koncentrationsdata fra F-transektet ved Skuldelev, marts 2009. Til venstre: histogram af koncentrationsdata. Til højre: plot visende placering og den relative størrelse af koncentrationsdata baseret på kvartiler. Dvs. ud af det totale datasæt udgør fx de blå cirkler alle de observationer, der er mindre end den første kvartil (dvs. den mindste fjerdedel af datasættet), mens de røde trekanter udgør alle de observationer, der er større end den tredje kvartil (dvs. den største fjerdedel af datasættet).

Vi vil her foretage interpoleringen af koncentrationsdataene ved at benytte en analytisk løsning til advektion-dispersions-transportligningen til at tilnærme trenden i data og derefter beskrive variabiliteten i koncentrationsdataene omkring denne analytiske løsning. Denne tilgang svarer til såkaldt universal kriging (Kitanidis, 1997).

4.3.1 Identifikation af geostatistisk model

Det første trin ved interpoleringen af koncentrationsdataene er at få identificeret en acceptabel geostatistisk model, dvs. få bestemt en model for både den rumlige korrelation samt for middelværdien, der på tilfredsstillende vis kan forklare de observerede data. Dette gøres typisk på baggrund af en dataanalyse (Kitanidis, 1997).

Som tidligere nævnt vil vi her benytte en analytisk transport model til at simulere den overordnede trend i koncentrationsdataene. I princippet ”transformerer” vi vores koncentrationsdata ved at simulere koncentrationsfordelingen langs kontrol planet analytisk og derefter subtrahere de simulerede værdier fra de observerede værdier (dvs. vi bestemmer residualerne mellem de observerede og de simulerede værdier). Dette svarer til, at vi forventer at vores målte koncentrationsdata varierer omkring en middelværdi, som er givet ved den analytiske løsning. Den stationære koncentrationsfordeling langs et transekt placeret i en afstand x_{cp} nedstrøms en forureningskilde med konstant kildekonzentration C_0 , bredden Y og dybden Z kan bestemmes ved følgende approksimerede analytiske løsning (Domenico, 1987):

$$C(x = x_{cp}, y, z, t = \infty) = \frac{C_0}{4} \cdot \left[\operatorname{erf} \left\{ \frac{y - y_0 + \frac{Y}{2}}{2(D_y x_{cp}/v)^{1/2}} \right\} - \operatorname{erf} \left\{ \frac{y - y_0 - \frac{Y}{2}}{2(D_y x_{cp}/v)^{1/2}} \right\} \right] \cdot \left[\operatorname{erf} \left\{ \frac{z - z_0 + \frac{Z}{2}}{2(D_z x_{cp}/v)^{1/2}} \right\} - \operatorname{erf} \left\{ \frac{z - z_0 - \frac{Z}{2}}{2(D_z x_{cp}/v)^{1/2}} \right\} \right] \quad (1)$$

hvor y_0 og z_0 er koordinaterne for centrum af den rektangulære forureningskilde, v er den gennemsnitlige grundvandshastighed, og D_y og D_z er hhv. den horisontalt transversale og den vertikalt transversale hydrodynamiske dispersionskoefficient. Dispersionskoefficienterne er givet ved $D = D_0 + av$, hvor D_0 er diffusionskoefficienten i vand og a er dispersiviteten i enten y eller z -retningen.

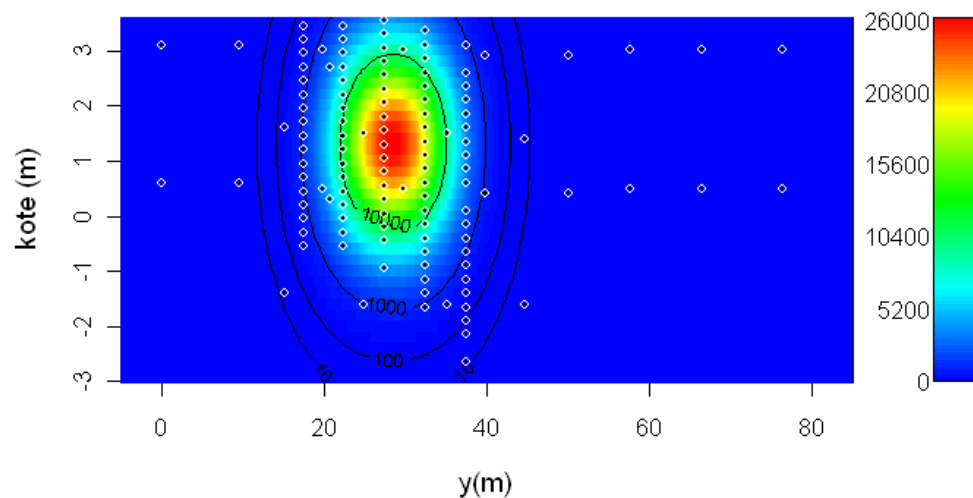
Den analytiske løsning fra Domenico (1987) er ofte benyttet og er derudover implementeret i stort antal risikovurderingsværktøjer til beskrivelse af stoftransport i grundvand, deriblandt BIOCHLOR og BIOSCREEN (Aziz et al., 2000). Det skal dog bemærkes, at ligning 1 kun er en tilnærmet analytisk løsning til den 3-dimensionelle advektions-dispersions-ligning for forureningstransport. På baggrund af en sammenligning med en eksakt løsning præsenteret af Wexler (1992) har nyere studier således vist, at Domenicos løsning under visse omstændigheder kan være forbundet med signifikante fejl, der især er markante ved høje værdier af den longitudinale dispersivitet (Guyonnet and Neville, 2004; Srinivasan et al., 2007; West et al., 2007). I forhold til problemstillingen her, hvor vi udelukkende er interesseret i et estimat af den stationære forureningsfordeling henover et nedstrøms transekt, vurderes Domenicos løsning imidlertid anvendelig.

I første omgang forsøges det nu at fitte den analytiske løsning til de målte koncentrationsdata i transektet. Det antages, at kontrolplanet er placeret 60 meter nedstrøms kildeområdet, og at den gennemsnitlige grundvandshastighed er $v = 4,2$ m/år (baseret på en antaget effektiv hydraulisk ledningsevne for hele sandmagasinet på $2 \cdot 10^{-5}$ m/s, en effektiv porøsitet på 0,3 og en hydraulisk gradient på 2‰). De ukendte parametre er kildekonzentrationen (som dog antages højere end den maksimale koncentration målt i transektet), kildens bredde og dybde, kildens centrum koordinater og dispersiviteterne i den horisontalt og vertikalt transversale retning. Fitningen af den analytiske model til data er foretaget vha. Maximum Likelihood Estimation. Denne metode er hensigtsmæssig, hvis det ønskes at tage højde for måleusikkerheden i data. Tabel 4.1 viser, hvad de antagede intervaller er for de forskellige parametre samt de fittede værdier.

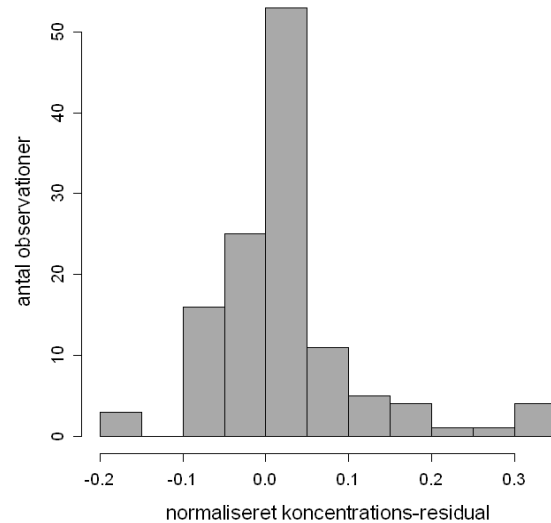
Figur 4.2 viser koncentrationsfordelingen langs F-transektet simuleret med den analytiske model baseret på de fittede parameterværdier. I Figur 4.3 er et histogram af de normaliserede koncentrationsresidualer (dvs. forskellen mellem de observerede og de simulerede koncentrationsværdier divideret med kildekonzentrationen) vist. Det ses, at fordelingen af residualerne umiddelbart fremgår mere normalfordelt end før omkring en middelværdi på 0.

Tabel 4.1: Parameterværdier før og efter fitting med Maximum Likelihood Estimation. Værdierne er estimeret ud fra koncentrationsdataene fra marts 2009.

Parameter	Prior interval	Fitted værdi
<i>Analytisk transport modelparametre</i>		
C_0 : kildekonzentration (mg/l)	35 - 70	60
a_{th} : horisontal transversal dispersivitet (m)	0,01 - 0,25	0,1
a_v : vertikal transversal dispersivitet (m)	0,001 - 0,02	0,01
y_0 : centerkoordinat i y-retning (m)	27 - 31	28,5
z_0 : centerkoordinat i z-retning (m)	0,5 - 2	1,3
Y : forureningskildens bredde (m)	5 - 15	10
Z : forureningskildens dybde (m)	0,5 - 4	1,5
<i>Spatiel korrelation modelparametre</i>		
σ_c^2 : varians af koncentrationsfelt (mg^2/l^2)	1 - 40	7,25
λ_c : korrelationslængde i y-retning (m)	0,5 - 10	3,5
ψ_c : anisotropi faktor ($=\lambda_x/\lambda_y$)	0 - 1	1
τ_c : nugget varians (mg^2/l^2)	0 - 25	0



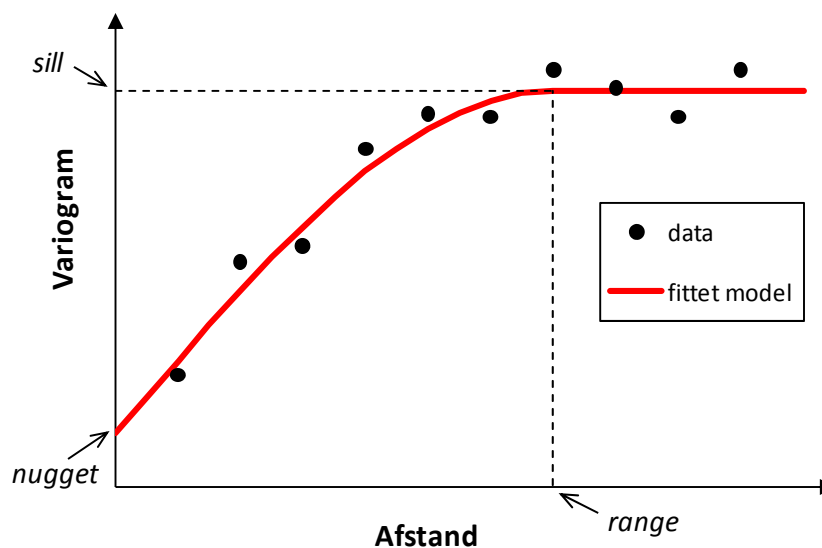
Figur 4.2: Forureningsfordelingen ($\mu\text{g}/\text{l}$) langs F-transektet simuleret med den analytiske model.



Figur 4.3: Histogram af de normaliserede koncentrations-residualer.

Vi ønsker nu at foretage den geostatistiske analyse på disse residualer, dvs. vi vil undersøge om residualerne er spatielt korrelerede og forsøge at estimere en model, der kan beskrive denne rumlige korrelation. En model for den rumlige korrelation kan estimeres med udgangspunkt i såkaldte eksperimentelle variogrammer. Variogrammer illustrerer variansen mellem måleværdier som funktion af afstand (og retning) mellem observationerne. I tilfælde af rumlig korrelation vil man typisk se, at variansen mellem målinger tæt ved hinanden er lav, og at variansen vil stige jo større afstanden er mellem observationerne.

Figur 4.4 illustrerer et hypotetisk eksempel, hvor en sfærisk korrelationsmodel er blevet fittet til et eksperimentelt variogram. Et variogram beskrives typisk ud fra parametrene *nugget effekt*, *sill* og *range* og betydningen af disse er indikeret i figuren. Nugget effekten skyldes både måleusikkerhed og mikrovariabilitet (dvs. variabiliteten på en skala, der er mindre end afstanden mellem de to tætteste observationer). Sill er den maksimale variation og angiver variationen mellem observationer, der ikke er rumligt korreleret. Den afstand hvor observationerne ikke længere er korreleret kaldes for range (eller korrelationslængden). Dvs. hvis afstanden mellem to observationer er større end range-værdien vil disse observationer typisk ikke være korreleret. Forskellen mellem sill og nugget vil vi her betegne variansen af den spatielle proces (kaldes også for partial sill).



Figur 4.4: Plot af et hypotetisk eksperimentelt variogram (sorte prikker) med en fittet sfærisk model (rød kurve).

Ofte er det imidlertid ikke hensigtsmæssigt at bestemme den rumlige korrelationsmodel baseret udelukkende på det eksperimentelle variogram, da dette er afhængig af nogle subjektive valg (fx hvor mange afstands-intervaller data inddeles og analyseres i). Vi benytter her i stedet igen Maximum Likelihood Estimation til at bestemme den ”optimale” model for den rumlige korrelation af koncentrations-residualerne. Koncentrationsresidualerne antages i den forbindelse at stamme fra en multivariat normalfordeling (dvs. vi betragter koncentrationsresidualerne som den spatielle proces) med middelværdi 0 og en rumlig korrelation givet ved summen af en sfærisk model og en nugget varians. Resultatet af fitningen af den spatielle korrelationsmodel er ligeledes vist i tabel 4.1. Fitningen indikerer, at der ikke er anisotropi i fordelingen af koncentrationsresidualerne, og at nugget variansen er 0, dvs. variansen mellem to målinger taget meget tæt på hinanden er lav ($= 0$). Det skal dog i den forbindelse noteres, at der er taget højde for måleusikkerheden ved fitningen af parametrene. Korrelationslængden, der betegner den afstand hvor data ikke længere er korrelerede, er estimeret til 3.5 meter. Fitningen er også forsøgt med en eksponentiel korrelationsmodel, men dette gav ikke anledning til bedre resultater.

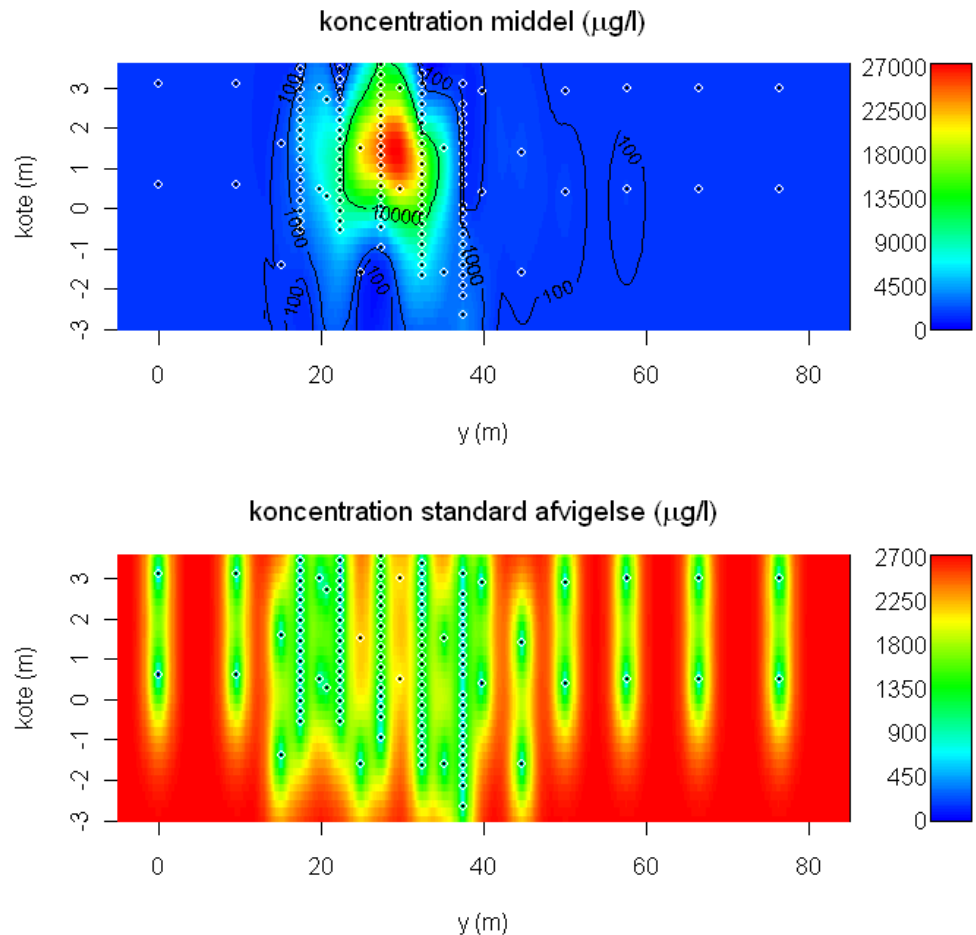
4.3.2 Validering af geostatistisk model

Før den fittede model kan anvendes til at interpolere koncentrationsdataene skal dens validitet testes. Dette gøres typisk med udgangspunkt i nogle statistiske tests af residualerne mellem de observerede og de simulerede koncentrationsværdier. For at den identificerede geostatistiske model kan accepteres, skal disse residualer være normalfordelte og ukorrelerede. Ud fra forskellige statistiske test foreslået af Kitanidis (1997) er den geostatistiske model fundet gyldig og det vurderes at den på tilfredsstillende vis kan beskrive variationen i koncentrationsdata.

4.3.3 Prædiktion og usikkerhed på koncentrationsfordeling

Den validerede geostatistiske model kan nu benyttes til at interpolere koncentrationerne over hele transektet. Dette foregår ved først at interpolere koncentrationsresidualerne (dvs. forskellen mellem de observerede og analytisk simulerede koncentrationer).

ner) vha. ordinær kriging og derefter addere den analytisk simulerede koncentrationsfordeling (figur 4.2). På denne måde opnås både det bedste estimat af koncentrationsfordelingen (middelværdien) samt usikkerheden på denne koncentrationsfordeling. Resultatet af interpolationen fremgår af figur 4.5. Det ses, at usikkerheden (givet ved standardafvigelsen) på den interpolerede koncentrationsfordeling er lav ved målepunkterne, men også i et område omkring målepunkterne som følge af den rumlige korrelation repræsenteret med den geostatistiske model.



Figur 4.5: Resultatet af den geostatistiske interpolation af marts 2009 koncentrationsdata fra F-transektet ved Skuldelev. Øverst: den simulerede gennemsnitlige koncentrationsfordeling ($\mu\text{g/l}$). Nederst: standardafvigelsen på den simulerede koncentrationsfordeling ($\mu\text{g/l}$). Bemærk at z-aksen er strukket ud i forhold til x-aksen.

4.4 Interpolation af hydraulisk ledningsevne

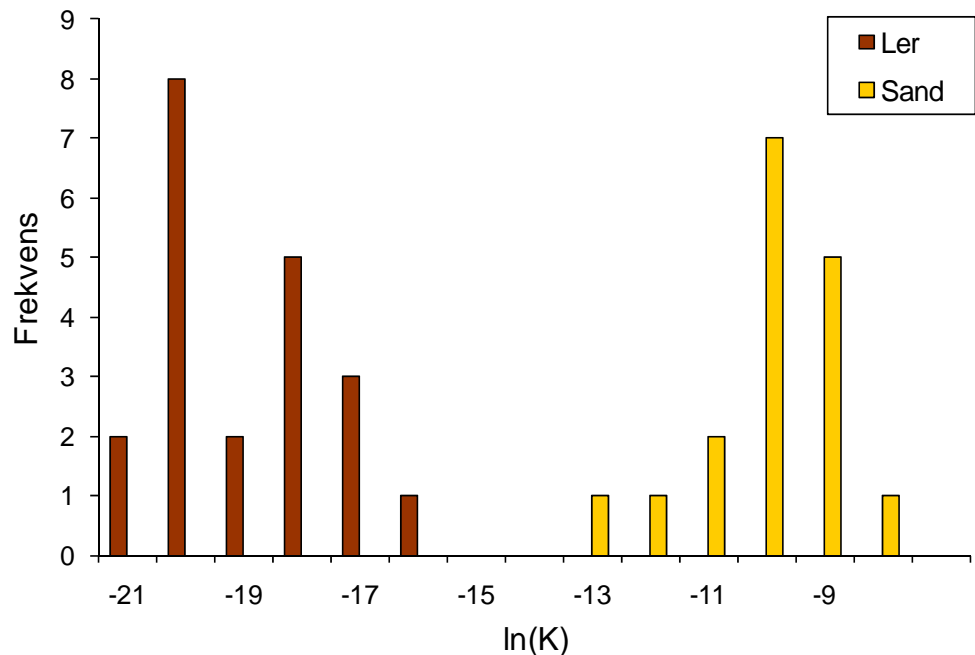
Interpolationen af de hydrauliske ledningsevne målinger foregår i princippet på fuldstændig samme måde som interpolationen af koncentrationsdataene. Det antages her, at de log-transformerede hydrauliske ledningsevner varierer omkring en middelværdi, der er konstant, dvs. vi vil benytte ordinær kriging til interpoleringen af de hydrauliske ledningsevner. Ligesom det også var tilfældet ved de tidligere massefluxberegninger er domænet/transektet inddelt i hhv. et morænelers-felt og et sand-felt (jf. figur 3.6). For hver af disse felter foretages en analyse og en interpolation af de tilhørende hydrauliske ledningsevne målinger.

4.4.1 Identifikation af geostatistiske modeller

Figur 4.6 viser et histogram af de log-transformerede konduktivitetsværdier opdelt i data fra beregninger på prøver udtaget fra hhv. sand og moræneler. Det ses, at der er en tydelig forskel (på flere størrelsesordener) på K -værdierne for prøver udtaget fra hhv. sand og moræneler.

Der er ligesom for koncentrationerne benyttet Maximum Likelihood Estimation til at bestemme en geostatistisk model for hhv. fordelingen af sand og for fordelingen af ler. Resultatet af denne fitning fremgår af tabel 4.2. Det er antaget, at den rumlige korrelation igen kan beskrives ved en sfærisk model (igen er andre typer af rumlige korrelationsmodeller benyttet, men disse har ikke givet anledning til bedre fit). Det skal bemærkes, at de geostatistiske modelparametre ikke er specielt godt identificeret, og at disse parametre derfor selv er forbundet med en vis usikkerhed. Dette gælder især for sand, hvor specielt korrelationslængden og anisotropifaktoren er usikkert bestemt, mens variansen og nugget her er bedre identificeret. Fitningen af den geostatistiske model for ler indikerer, at de hydrauliske ledningsevne målinger for ler ikke er rumligt korrelerede og at disse data derfor bedst beskrives ved en ren nugget effekt. Det er muligt at tage højde for usikkerheden i de geostatistiske modelparametre ved at benytte såkaldt Bayesiansk geostatistik, hvor de geostatistiske modelparametre selv anses som tilfældige (random) variable. Dette vil vi imidlertid ikke betragte her.

Begge modeller er efterfølgende via statistiske test blevet testet og kan på tilfredsstillende vis beskrive variabiliteten i konduktivitetesdataene.

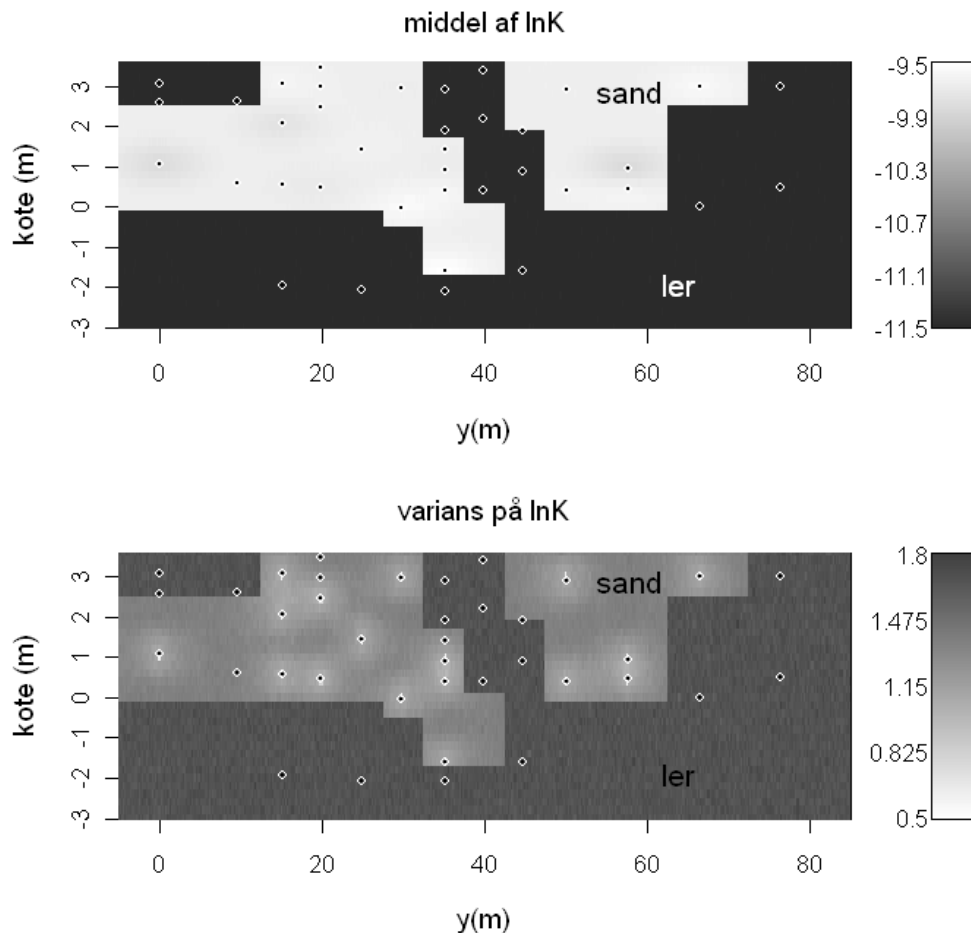


Figur 4.6: Histogram af hydraulisk ledningsevne inddelt i målinger udtaget fra hhv. moræneler og sand.

Tabel 4.2: Fittede geostatistiske modelparametre til beskrivelse af fordelingen af hydraulisk ledningsevne for hhv. moræneler og sand.

Spatiel korrelation modelparametre	Sand	Ler
σ_y^2 : varians af $\ln K$	0.7	0
λ_y : korrelationslængde i y-retning (m)	10	1
ψ_y : anisotropi faktor ($=\lambda_x/\lambda_y$)	0.1	0.5
τ_y : nugget varians	0.7	1.7

De to fittede geostatistiske modeller er derefter benyttet til at interpolere målingerne af de hydrauliske ledningsevner for hhv. sand og ler. Resultatet af dette er vist i figur 4.6. Det ses, at der er en markant forskel i de simulerede hydrauliske ledningsevner for hhv. sand og ler. Det ses endvidere, at usikkerheden på de hydrauliske ledningsevner er størst for ler og at variansen her stort set er konstant over hele ler-domænet pga. den manglende rumlige korrelation. For sand-domænet er usikkerheden generelt mindre, hvor usikkerheden er mindst i områderne omkring observationspunkterne i sand-laget.



Figur 4.7: Fordeling af hydraulisk ledningsevne langs transektet simuleret for både sand og moræneler. Øverst: middelværdien af $\ln K$. Nederst: variansen af $\ln K$.

4.5 Kvantificering af usikkerhederne på forureningsfluxbestemmelsen

Som illustreret i figur 4.5 og figur 4.7 er de rumlige interpoleringer af hhv. koncentrations- og konduktivitetsfordelingen forbundet med usikkerheder, hvilket medfører, at forureningsfluxbestemmelsen også vil være usikker. Usikkerheden på forureningsflu-

xen som følge af interpoleringerne kan estimeres ved hjælp af conditional Monte Carlo simulation. Denne metode genererer med udgangspunkt i en geostatistisk model et stort antal tilfældige realisationer af den rumlige fordeling for en given variabel (koncentration eller hydraulisk ledningsevne), der alle matcher samtlige observationer i transektet og derfor kan betragtes lige sandsynlige. Gennemsnittet af alle disse realisationer svarer til interpolation med kriging (Kitanidis, 1997).

Vi har her gjort brug af conditional simulation til at generere 1000 lige sandsynlige realisationer af, hvordan fordelingen af hhv. koncentration og hydraulisk ledningsevne kunne se ud. Hver realisation af hhv. koncentrations- og konduktivitetsfordelingen er derefter via ligningen til beregning af forureningsflux præsenteret i kapitel 3 (side 26) kombineret til at give en realisation af forureningsfluxen, og der er på denne måde opnået 1000 realisationer af forureningsfluxen. På baggrund af alle disse realisationer kan usikkerheden på forureningsfluxen estimeres, for eksempel i form af en sandsynlighedsfordeling.

Ulempen ved at bruge conditional simulation til at tage højde for usikkerhederne ved koncentrationerne er, at der kan opnås negative koncentrationer. Dette er især tilfældet i områderne med de laveste koncentrationer. Af figur 4.4 fremgår det, at selv om den gennemsnitlige koncentration udenom forureningsfanen er ca. $0 \mu\text{g/l}$, så er usikkerheden (standardafvigelsen) mellem observationspunkterne i disse områder stadig høj (ca. $2500 \mu\text{g/l}$). Der er derfor her stor sandsynlighed for, at der opnås negative koncentrationer. Dette vil ikke influere den estimerede gennemsnitsforureningsflux signifikant, men kan til gengæld have betydning for usikkerhedsestimater på fluxen.

4.5.1 Resultater

Figur 4.8 viser et histogram og en kumulativ sandsynlighedsfordeling af den estimerede forureningsflux gennem F-transektet baseret på de 1000 conditional simulations af hhv. konduktivitets- og koncentrationsfordelingen. Simuleringen af koncentrationsfordelingen er baseret på marts 2009 data. Den gennemsnitlige forureningsflux er estimeret til $2,95 \text{ kg/år}$ med en standardafvigelse på $1,5 \text{ kg/år}$. Den relative usikkerhed på forureningsfluxen er således ca. 50%, hvilket er i udmærket overensstemmelse med flux-usikkerheder rapporteret i andre studier med sammenlignelige antal boringer pr. m^2 (se tabel 3.2).

Tabel 4.3 viser en oversigt over estimerede fluxusikkerheder (%) rapporteret i litteraturen. Disse studier har alle undersøgt usikkerhederne relateret til den niveauspecifikke prøvetagning. Studierne adskiller sig fra hinanden i a) antallet af boringer per areal, der er benyttet, b) graden af heterogenitet af grundvandsmagasinet, c) typen af data, der er anvendt. I i studiet af Cai et al. (2010) er der fx kun anvendt koncentrationsmålinger og fluxusikkerheden. Her er der således ikke taget højde for usikkerheden ved flow, mens studierne af Beland-Pelletier et al. (2010), Kubert & Finkel (2006) og Li et al. (2007) inkluderer data for både konduktivitet og koncentration, mens gradient antages konstant), d) metoden, der er benyttet til at bestemme usikkerhederne, samt e) afstanden mellem transektet og forureningskilden.

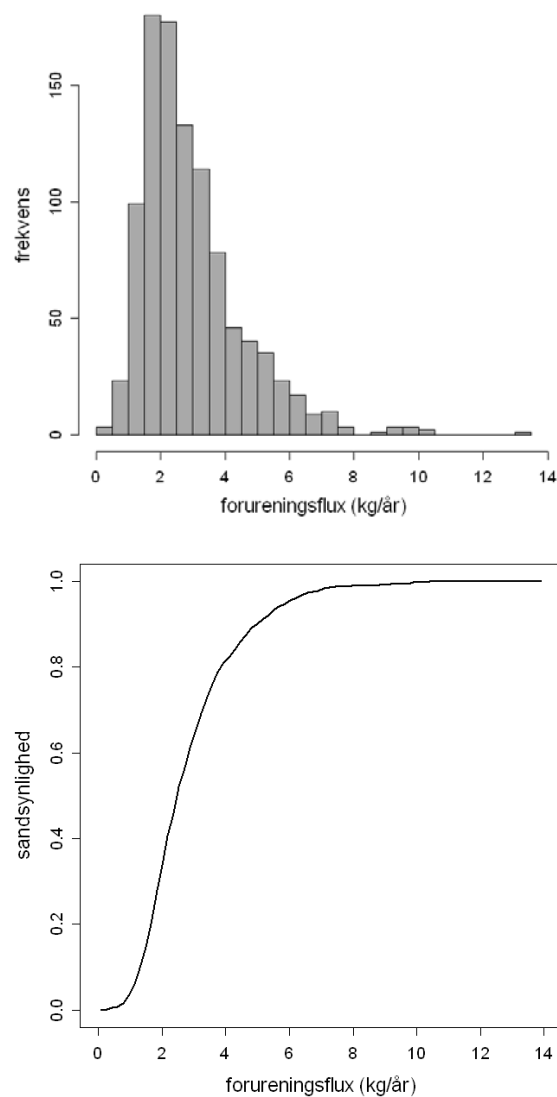
Det skal bemærkes, at for de syntetiske studier kan den estimerede forureningsflux sammenlignes med den sande (syntetiske) flux. For de syntetiske studier angiver fluxusikkerheden således procentvis afvigelse mellem den estimerede og den syntetiske flux. For feltstudier kendes den ”sande” flux ikke, så her er usikkerheden angivet som en relativ fluxusikkerhed (defineret som standardafvigelsen divideret med middelværdien).

Af Tabel 4.3 fremgår det, at selvom der er temmelig store forskelle på de anvendte antal boringer per m², så er hovedparten af de estimerede fluxusikkerheder i størrelsesordenen 40 – 70%. Li et al. (2007) finder i deres syntetiske studie, at der opnås pålidelige flux-estimer (med en fejl på mindre end 20%), hvis antallet af målepunkter per m² er større end ca. 0,1, forudsat at der er sket fuldt gennembrud ved transektet, og at målepunkterne dækker hele fanen. Kubert & Finkel (2006) finder, at fejlen på fluxestimatet afhænger meget af heterogeniteten af den hydrauliske ledningsevne. Under meget heterogene forhold finder de således at fejlen kan overstige 100% selv ved anvendelse af mere end 1 målepunkt per m². Til trods for at der i studierne af Schwede & Cirpka (2010) og Troldborg et al. (2010) benyttes det mindste antal boringer per areal, er der i disse studier ikke fundet signifikant højere fluxusikkerheder. Dette skyldes, at fluxusikkerheden i disse studier også er betinget på randbetingelserne (der repræsenterer flowforholdene og forureningskilden) samt på en geostatistisk model for heterogeniteten af den hydrauliske ledningsevne. Der er således taget højde for information/viden og målinger beliggende udenfor transektet.

Tabel 4.3: Usikkerheden på forureningsfluxbestemmelser baseret på niveauspecifik prøvetagning rapporteret i litteraturen. Usikkerheden er angivet som en relativ fejl for syntetiske studier (dvs. afvigelsen af fluxestimatet fra den syntetiske sande værdi) og som en relativ usikkerhed for feltstudier (dvs. standardafvigelsen på fluxestimatet divideret med den gennemsnitlige fluxværdi).

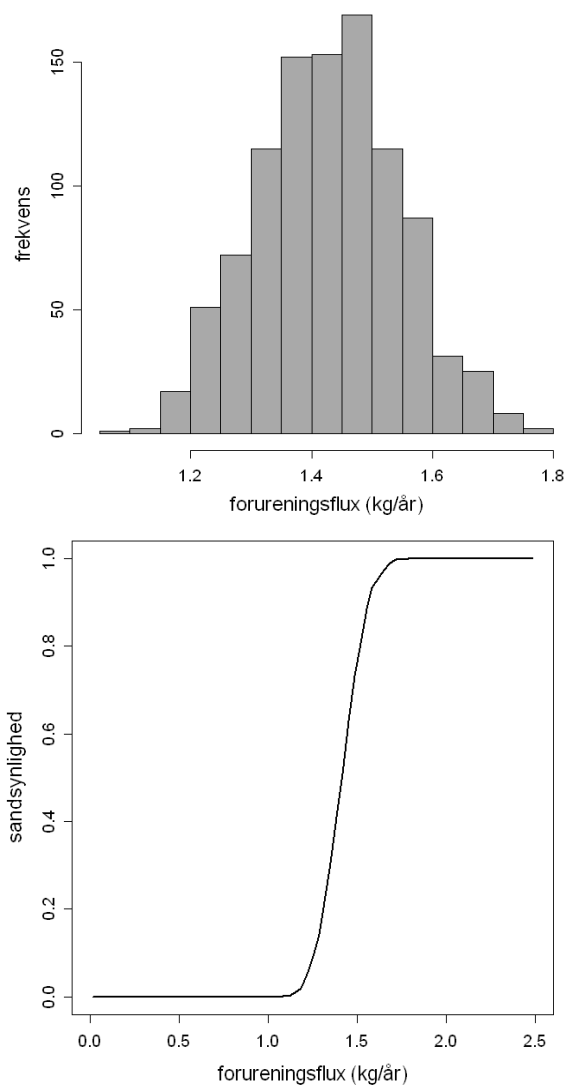
Studie	Type af studie	Antal måle-punkter	Areal m ²	Punkter per m ²	Flux-usikkerhed	Afstand til transekt (m)
Kubert&Finkel, 2006 *	Syntetisk	64	60	1.07	15%	22.5
		80	80	1.00	40%	22.5
		80	80	1.00	100%	22.5
Li et al., 2007	Syntetisk	9	77.3	0.12	20%	4
		25	77.3	0.32	10%	4
Schwede&Cirpka, 2010	Syntetisk	9	120	0.08	61%	16
		9	120	0.08	2%	33
Cai et al., 2010	Felt	56	16	3.50	7%	n.n.
		49	77.7	0.63	15%	n.n.
Beland-Pelletier et al., 2010	Felt	80	126	0.63	67%	40
Troldborg et al., 2010	Felt	28	1450	0.02	68%	160
Skuldelev	Felt	121	380	0.32	53%	80

* Bemærk at resultaterne fra Kubert & Finkel (2006) er bestemt ved stigende grad af heterogenitet (variansen på log-konduktiviteten er hhv. 0,25, 1 og 2).



Figur 4.8: Estimeret forureningsflux marts 2009 baseret på 1000 conditional simulations af hhv. konduktivitets- og koncentrationsfordelingen. Venstre: histogram af forureningsfluxen. Højre: kumulativ sandsynlighedsfordeling for forureningsfluxen.

Figur 4.9 viser ligeledes et histogram og en kumulativ sandsynlighedsfordeling af den estimerede forureningsflux, men hvor den hydrauliske ledningsevne for ler- og sandomånet er holdt konstant lig med deres respektive geometriske middelværdier (jf. tabel 2.5), og hvor flux-usikkerheden derfor udelukkende skyldes usikkerheden ved koncentrationerne. Det ses, at den gennemsnitlige forureningsflux i dette tilfælde er 1,5 kg/år, mens standardafvigelsen er 0,12 kg/år. Den relative usikkerhed er således 7,5% og dermed betragtelig mindre end når der også tages højde for usikkerheden på den hydrauliske ledningsevne. Dette estimat af den relative usikkerhed stemmer godt overens med resultaterne fra Cai et al. (2010) (jf. tabel 4.3), som i deres studie ikke har taget højde for usikkerheden ved grundvandsflowet.



Figur 4.9: Estimeret forureningsflux marts 2009 baseret på 1000 conditional simulations af koncentrationsfordelingen. Den hydrauliske ledningsevne er fastholdt. Venstre: histogram af forureningsfluxen. Højre: kumulativ sandsynlighedsfordeling for forureningsfluxen.

Tabel 4.4 opsummerer på en række forskellige forureningsflux-beregninger foretaget med den geostatistiske metode. Det ses, at de estimerede gennemsnitlige forureningsfluxe stemmer fint overens med de mere simple beregninger præsenteret i figur 3.7. For eksempel opnås en forureningsflux på 1.5 kg/år, hvis det bedste estimat af både koncentrations- og konduktivitetesfordelingen (dvs. de interpolerede rumlige fordelinger vist i hhv. Figur 4.5 og Figur 4.7) benyttes. Af Tabel 4.4 fremgår det også, at hovedparten af den totale fluxusikkerhed umiddelbart ser ud til at være relateret til usikkerheden på fordelingen af den hydrauliske ledningsevne. Dette skal ses i lyset af den høje grad af heterogenitet, der er observeret for den hydrauliske ledningsevne i transektet. Desuden er der kun relativt få konduktivitetsdata tilgængelige, og disse kan samtidig ikke anses som værende specielt ”stærke”, da de alle er baseret på tolkning af kornstørrelsesfordelinger. Usikkerheden på koncentrationsfordelingen er i tilfældet her derimod mindre afgørende for forureningsfluxen, hvilket tilskrives det relativt stærke koncentrationsdatasæt, der er tilgængeligt ved F-transektet. Samtidig er usikkerhederne ved koncentrationsfordelingen langs transektet sandsynligvis også reduceret betragteligt som følge af anvendelsen af den analytiske løsning til at bestemme den overordnede

trend i koncentrationsdata. På denne måde er der i princippet inkluderet ekstra ”viden”, der beskriver en forureningskilde, ved interpoleringen af koncentrationsdata.

Tabel 4.4: Beregnede forureningsfluxe gennem F-transektet for marts 2009 baseret på forskellige scenarier. C og K refererer til fordelingen af hhv. koncentration sværdier og konduktivitet sværdier langs F-transektet. Bemærk, at alle beregningerne er baseret på de fittede geostatistiske modeller vist i Tabel 4.1 og Tabel 4.2.

Beregningsscenario	Gennemsnitlig forureningsflux (kg/år)	Standardafvigelse på forureningsflux (kg/år)	Relativ flux-usikkerhed (%)
<i>Alle koncentrationdata (F og MLS)</i>			
Interpoleret C og interpoleret K	1,54	-	-
Interpoleret C og usikker K	2,95	1,53	52,0
Usikker C og interpoleret K	1,54	0,12	7,5
Usikker C og usikker K	2,95	1,57	53,1
<i>Koncentrationsdata fra F-boringer</i>			
Interpoleret C og interpoleret K	1,59	-	-
Interpoleret C og usikker K	1,59	0,14	8,7
Usikker C og usikker K	3,05	1,64	53,8
<i>Koncentrationsdata fra F10-boringer</i>			
Interpoleret C og interpoleret K	1,53	-	-
Interpoleret C og usikker K	1,53	0,14	9,5
Usikker C og usikker K	2,93	1,58	53,8
<i>Koncentrationsdata fra F5-boringer</i>			
Interpoleret C og interpoleret K	1,48	-	-
Interpoleret C og usikker K	1,48	0,15	10,4
Usikker C og usikker K	2,84	1,54	54,4

Ligesom i kapitel 3 er fluxberegningerne her også foretaget for forskellige udsnit af de tilgængelige koncentrationsdata fra marts 2009. På den måde kan det analyseres, hvorledes usikkerheden på forureningsfluxen afhænger af antallet af observationspunkter. Fluxusikkerhedsberegningerne er således foretaget for følgende dataudsnit: i) alle koncentrationsdata fra alle F-boringerne, KB26 samt MLS (ialt 122 målinger), ii) koncentrationsdata fra F-boringerne (ialt 26 målinger), iii) koncentrationsdata fra F10'er boringerne (ialt 18 målinger) og iv) koncentrationsdata fra F5'er boringerne (ialt 8 målinger). Resultatet af denne analyse er ligeledes præsenteret i Tabel 4.4. Det ses, at både den estimerede gennemsnitsflux og usikkerheden er relativt upåvirket af antallet af koncentrationsdata. Den totale relative usikkerhed på forureningsfluxbestemmelsen stiger fra 53%, hvor alle koncentrationsdata er medtaget, til knap 55% hvor kun F5'er boringerne er inkluderet. Det skal dog pointeres, at disse resultater alle er baseret på den fittede geostatistiske model præsenteret i tabel 4.1 og som blev bestemt med udgangspunkt i det totale datasæt. Analysen i tabel 4.1 indikerer derfor, at hvis man først én gang har monitoreret et transekt med en høj måledensitet og derudfra estimeret en acceptabel geostatistisk model, da kan der efterfølgende opnås pålidelige estimater af forureningsfluxen og den tilhørende usikkerhed ud fra væsentlig færre målepunkter, forudsat at forureningsfanen ikke udviser store tidlige variationer. Dette kan betyde, at omkostningerne ved efterfølgende monitoringer af transektet (i nogle tilfælde) vil kunne reduceres, uden at det vil gå ud over kvaliteten af forureningsfluxestimererne. Denne konklusion er i overensstemmelse med resultater præsenteret i Cai et al. (2010).

Af tabel fremgår resultaterne af den samme analyse af fluxusikkerhederne som den foretaget ovenover, men hvor den geostatistiske model for koncentrationsfordelingen hver gang er fittet til det respektive data-udsnit (dvs. den geostatistiske model er forskellig for hvert scenarium). De fittede model parametre for hvert scenarium er vist i tabel 4.6. Det er valgt at fastholde kildekonzentrationen ved fitningen af modelparametrene. Det ses, at den relative usikkerhed på de estimerede forureningsfluxe generelt stiger jo flere data der fjernes, men at denne stigning ikke er speciel markant. Således ses der kun en stigning fra 52,6% hvor alle data er inkluderet, til 59%, hvor det kun F5 borerne er inkluderet. Grunden til at usikkerheden ikke stiger mere er, at den analytiske model fittes til de data, der er tilgængelige i hvert af scenarierne. I scenarierne med færre data er det i virkeligheden nemmere at fitte den analytiske model til data, hvilket tydeligt fremgår af tabel 4.6, hvor variansen af koncentrationsfeltet er væsentlig mindre for situationerne, hvor MLS data ikke er medtaget. I situationerne med færre data er der imidlertid væsentlig større usikkerhed på den fittede transportmodel, og trenden i data kan derfor sandsynligvis beskrives lige godt med et meget stort antal forskellige parametre-kombinationer, hvilket vil kunne have en signifikant betydning for forureningsfluxbestemmelsen. En mere optimal metode vil derfor være at tage højde for denne usikkerhed. Dette har vi dog ikke gjort her, men vil være en naturlig udvidelse af metoden på et senere tidspunkt.

Tabel 4.5: Beregnede forureningsfluxe gennem F-transektet for marts 2009 baseret på forskellige scenarier. C og K refererer til fordelingen af hhv. koncentrationsværdier og konduktivitetesværdier langs F-transektet. Beregningerne er baseret på de fittede geostatistiske modeller vist i Tabel 4.6.

Beregningsscenarium	Gennemsnitlig forureningsflux (kg/år)	Standardafvigelse på forureningsflux (kg/år)	Relativ flux-usikkerhed (%)
<i>Alle koncentrationdata (F og MLS)</i>			
Rektangulær metoden	1,96	-	-
Interpoleret C og interpoleret K	1,54	-	-
Usikker C og usikker K	2,95	1,51	52,6
<i>Koncentrationsdata fra F-boringer</i>			
Rektangulær metoden	2,37	-	-
Interpoleret C og interpoleret K	2,08	-	-
Usikker C og usikker K	3,99	2,16	54,1
<i>Koncentrationsdata fra F10-boringer</i>			
Rektangulær metoden (homogen K)	3,45	-	-
Interpoleret C og homogen K	3,16	-	-
Usikker C og usikker K	6,0	3,34	55,0
<i>Koncentrationsdata fra F5-boringer</i>			
Rektangulær metoden (homogen K)	3,06	-	-
Interpoleret C og homogen K	2,30	-	-
Usikker C og usikker K	4,39	2,59	59,0

Tabel 4.6: Modelparameterværdier efter fitning med Maximum Likelihood Estimation for 4 forskellige udsnit af koncentrationsdataene fra marts 2009.

Parameter	Alle data	F-data	F10'er-data	F5'er data
<i>Analytisk transport modelparametre</i>				
C_0 : kildekonzentration (mg/l)	60	60	60	60
a_{th} : horisontal transversal dispersivitet (m)	0,1	0,1	0,05	0.05
a_{tv} : vertikal transversal dispersivitet (m)	0,01	0,005	0,001	0.001
Y : forureningskildens bredde (m)	10	6	12	8
Z : forureningskildens dybde (m)	1,5	3,5	2,5	2.5
<i>Spatiel korrelation modelparametre</i>				
σ_C^2 : varians af koncentrationsfelt (mg^2/l^2)	7,25	0,4	0,03	0.75
λ_C : korrelationslængde i y-retning (m)	3,5	7	13	10
ψ_C : anisotropi faktor ($=\lambda_z/\lambda_y$)	1	1	1	1
τ_C : nugget varians (mg^2/l^2)	0	0	0	0.2

5 Konklusion og anbefalinger

5.1 Datasæt

Forureningen i F-transektet og KB-transektet ved Skuldelev er undersøgt, med særligt fokus på F-transektet, for at få et solidt datagrundlag til at lave undersøgelser af forureningsfluxen og relaterede usikkerheder på denne. Der er desuden i F-transektet lavet undersøgelser til at bestemme geologi og hydrogeologi, som også har afgørende betydning for forureningsfluxen.

Det er ved undersøgelsen fundet, at forureningen i F-transektet ikke ser ud til at variere afgørende over de seks målerunder fra juli 2008 til juli 2009. Det er desuden fundet, at den kraftigste forurening generelt findes i højpermeable zoner. Ud fra den vurderede geologi og hydrogeologi i området er der lavet en forsimplet opdeling af F-transektet i områder med sand og områder med moræneler, og der er fastsat værdier for den hydaruliske ledningsevne, den hydrauliske gradient og vandspejlet, som alle herefter er anvendt ved estimeringen af forureningsfluxen, og usikkerheder på denne.

5.2 Forureningsflux

Der er ikke fundet nogen markant ændring i forureningsfluxen i perioden fra juli 2008 til juli 2009, ved beregning med homogen K og dh/dl i hele transektet. Det er desuden fundet, at med de udvalgte delmængder til beregning af forureningsfluxen er der ikke afgørende variationer i den estimerede forureningsflux, hvilket vurderes at skyldes, at alle de valgte delmængder giver en fornuftig repræsentation af forureningen. Det viser også, at der samlet set er tale om et robust datasæt.

Det er ved beregningen af forureningsfluxen i juli 2008 fundet at den manglende måling i F35-2, der ellers har de højeste koncentrationer, og de samtidig lidt lavere koncentrationer i F40 (der generelt har de næsthøjeste koncentrationer) i forhold til de fleste andre målerunder giver en noget lavere forureningsflux end for de andre målerunder.

Det er desuden fundet at en beregning af forureningsfluxen ud fra det totale areal af transektet og den gennemsnitlige koncentration i alle F-målingerne giver en fornuftig estimering af forureningsfluxen (hvis I og K antages homogene) i forhold til de andre beregninger. En tilsvarende beregning med den gennemsnitlige koncentration af både F- og MLS-målinger giver en klar overestimering af forureningsfluxen i forhold til de andre beregninger, hvilket vurderes at skyldes, at i førstnævnte er arealerne for hver måling mere i samme størrelsesorden end i sidstnævnte, hvor der er mange meget høje målinger, som kun repræsenterer et lille areal.

Det er fundet at brug af et geologisk K -felt opdelt i hhv. sand og moræneler med hver sin K -værdi reducerer den estimerede forureningsflux med ca. 30%. Det er ikke særlig markant, hvilket skyldes, at den kraftigste forurening generelt er fundet i de højpermeable dele af transektet, og de områder, der tilskrives den meget lavere K -værdi i moræneleren, var derfor i forvejen generelt ikke afgørende for forureningsfluxen. Det er desuden fundet, at en del af reduktionen i forureningsfluxen skyldes den ændrede arealopdeling, som er tilpasset til geologien. Dette vurderes specielt at have betydning fordi der for en del af borerne er indsat ekstra celler i bunden, hvor der er moræneler, således at målinger højere oppe i sandet ikke benyttes til beregning i moræneleren, men koncentrationerne i disse i stedet er estimeret ud fra andre målinger i morænele-

ren. Dette har især betydning for beregningerne, hvor der kun er benyttet F-målinger, idet der her generelt ikke er ret høje målinger i moræneleren, hvorimod der i nogle af MLS-målingerne er fundet relativt høje værdier i moræneleren.

5.3 Geostatistisk metode til beregning af forureningsfluxberegning

Der er her udviklet en geostatistisk metode til kvantificering af usikkerhederne på forureningsfluxbestemmelser. Metoden interpolerer og bestemmer usikkerheden på den rumlige fordeling af hhv. koncentrationerne og de hydrauliske ledningsevner langs transektet. Ved hjælp af conditional Monte Carlo simulation forplantes usikkerhederne ved disse interpoleringer videre til bestemmelse af usikkerheden på forureningsfluxen. Den nye metode kan ved bestemmelsen af fluxusikkerheden således tage højde for usikkerhederne forbundet med heterogeniteten i fordelingen af både koncentrationerne og den hydrauliske ledningsevne henover transektet samt for måleusikkerheder.

Usikkerheden ved interpoleringen af koncentrationsdata bestemmes ved hjælp af både en analytisk transportmodel, der beskriver den generelle trend, der typisk observeres i koncentrationsdata langs et transekt, samt en geostatistisk model, der beskriver den variabilitet, der ikke kan simuleres med den analytiske model. Fordelen ved denne tilgang er, at metoden derved kan inkludere viden om en opstrøms forureningskilde, hvilket kan være med til at reducere usikkerheden på fluxestimatet betragteligt.

Metoden er afprøvet på marts 2009 data fra F-transektet ved Skuldelev. Det er på den baggrund fundet at den gennemsnitlige forureningsflux er knap 3 kg/år og at standardafvigelsen på dette estimat er 1,5 kg/år. Det er endvidere konkluderet, at størstedelen af denne usikkerhed kan tilskrives usikkerheden i fordelingen af den hydrauliske ledningsevne over transektet, mens usikkerheden relateret til koncentrationsfordelingen er væsentlig mindre.

Da metoden baserer usikkerhedsbestemmelsen på fittede parameterværdier vil den som udgangspunkt fungere bedst for transekter med en relativ høj måledensitet. For tilfælde med kun få tilgængelige data bør metoden optimalt set udvides således, at der tages højde for usikkerheden i især forureningskildebeskrivelsen, da dette sandsynligvis vil kunne influere usikkerheden af fluxbestemmelsen.

Der er generelt fundet god overensstemmelse mellem resultaterne fra den geostatistiske metode og den mere simple rektangulære metode.

5.4 anbefalinger

Ud fra resultaterne af undersøgelser og beregninger af forureningsfluxen i dette notat anbefales det:

- at opdele transektet efter geologien ved beregning af forureningsfluxen, således at områder med lav hydraulisk ledningsevne ikke bliver regnet med en alt for høj værdi og dermed giver en for høj forureningsflux. Dette vil især være vigtigt, hvor der er fundet høje koncentrationer i områder med lav hydraulisk ledningsevne.
- at benytte minimum omkring 0,1 målepunkter pr. m² langs transektet, hvis et pålideligt estimat af forureningsfluxen ønskes. Baseret på resultaterne fra Skuldelev samt resultater fra litteraturen kan man med denne måledensitet forvente en usikkerhed på højst 50%. Dette er dog forudsat af, at forureningsfanen er dækket af målepunkterne, at der er sket fuldt forurenings-gennembrud ved transektet, at der i samtlige monitoringspunkter måles for både koncentration og hydraulisk ledningsevne og at grundvandsmagasinet ikke er ekstremt heterogent med fx domi-

nerende præferentielt flow. Usikkerheden vil desuden sandsynligvis være afhængig af, at transektet ikke er placeret meget tæt ved kilden, hvor der kan forventes kraftige koncentrationsgradienter.

- at fokusere på at bestemme realistiske værdier for den hydrauliske ledningsevne. Det vil formodentlig have langt større betydning for den estimerede forureningsflux end små variationer i koncentrationen. Så hvis der med relativt få boringer kan opnås en fornuftig repræsentation af forureningen, vil det formodentlig være bedre at fokusere på estimering af K og variationer i denne i området, fremfor at forsøge at opnå en meget detaljeret beskrivelse af koncentrationerne.
- at indrage usikkerhedsvurderinger ved fluxberegninger. Ved større undersøgelser anbefales det at anvende geostatistiske metoder for at beskrive usikkerhederne.

Referenceliste

- Aziz, C.E., Newell, C.J., Gonzales, J.R., 2000. BIOCHLOR - Natural Attenuation Decision Support System. User's Manual Version 1.0. US Environmental Protection Agency. US Environmental Protection Agency
- Beland-Pelletier, C., Fraser, M., Barker, J., Bockelmann, A., Ptak, T., 2010. Estimating contaminant mass discharge: A comparison of the multilevel point measurement and the integral pumping investigation approaches and their uncertainties. *Journal of Contaminant Hydrology* (in press) .
- Cai, Z., Wilson, R.D., Cardiff, M.A., Kitanidis, P.K., 2010. Increasing Confidence in Mass Discharge Estimates Using Geostatistical Methods. *Ground Water* 9999[9999]Copyright © 2010 The Author(s). Journal compilation © 2010 National Ground Water Association
- Domenico, P.A., 1987. An Analytical Model for Multidimensional Transport of A Decaying Contaminant Species. *Journal of Hydrology* 91(1-2), 49-58.
- Farhat, S. K., Newell, C. J., Nichols, E. M., 2006. Mass Flux Toolkit to evaluate groundwater impacts, attenuation, and remediation alternatives - User's manual. Groundwater Services Inc., version 1.
- Guyonnet, D., Neville, C., 2004. Dimensionless analysis of two analytical solutions for 3-D solute transport in groundwater. *Journal of Contaminant Hydrology* 75(1-2), 141-153.
- Kitanidis, P.K., 1997. Introduction to Geostatistics: applications in hydrogeology. Cambridge University Press, Cambridge U.K.
- Kitanidis, P.K., Shen, K.F., 1996. Geostatistical interpolation of chemical concentration. *Advances in Water Resources* 19(6), 369-378.
- Kubert, M., Finkel, M., 2006. Contaminant mass discharge estimation in groundwater based on multi-level point measurements: A numerical evaluation of expected errors. *Journal of Contaminant Hydrology* 84(1-2), 55-80.
- Li, K.B., Goovaerts, P., Abriola, L.M., 2007. A geostatistical approach for quantification of contaminant mass discharge uncertainty using multilevel sampler measurements. *Water Resources Research* 43[6], W06436.
- Pebesma, E.J., 2004. Multivariable geostatistics in S: the gstat package. *Computers & Geosciences* 30(7), 683-691.
- Schwede, R.L., Cirpka, O.A., 2010. Stochastic evaluation of mass discharge from pointlike concentration measurements. *Journal of Contaminant Hydrology* 111(1-4), 36-47.
- Srinivasan, V., Clement, T.P., Lee, K.K., 2007. Domenico solution - Is it valid? *Ground Water* 45(2), 136-146.
- Troldborg, M., Nowak, W., Tuxen, N., Bjerg, P.L., Helmig, R., Binning, P.J., 2010. Uncertainty evaluation of mass discharge estimates from a contaminated site using a fully Bayesian framework. *Water Resources Research*, 46, W12552, doi:10.1029/2010WR009227.
- West, M.R., Kueper, B.H., Unger, M.J., 2007. On the use and error of approximation in the Domenico (1987) solution. *Ground Water* 45(2), 126-135.
- Wexler, E. J., 1992. Analytical solutions for one-, two, and three-dimensional solute transport in ground-water systems with uniform flow. *Techniques of Water-Resources Investigations of the United States Geological Survey*.

Bilag 1 Notat, januar 2009

Anaerob deklorering og kvantificering af masse flux i en forureningsfane med klorerede ethener: Baseline

Vestergade 5, Skuldelev

Januar 2009



DTU Miljø
Marta C. Santos
Poul L. Bjerg

Indhold

1. Indledning	1
1.1. <i>Baggrund</i>	1
1.1.1. Lokaliteten	1
1.1.2. PCE og nedbrydningsprodukter	1
1.1.3. Moniteringstransekter	3
1.2. <i>Formål og strategi</i>	3
2. Materialer og Metoder	4
2.1. <i>Feltundersøgelser</i>	4
2.1.1. Forpumpning	4
2.1.2. Udtagning og analyse af grundvandsprøver	8
2.2. <i>Databehandling</i>	10
2.2.1. Reduktiv deklorering	10
2.2.2. Forureningsflux	10
2.2.3. Mass Flux Toolkit	11
3. Resultater og diskussion	12
3.1. <i>Geologi og hydrogeologi</i>	12
3.2. <i>Redox forhold</i>	14
3.2.1. KB-transekt	14
3.2.2. F-transekt	15
3.3. <i>Forureningsudbredelse og -sammensætning</i>	16
3.3.1. KB-transekt	16
3.3.2. F-transekt	18
3.4. <i>Forureningsflux</i>	21
3.4.1. Beregnet forureningsflux	22
3.4.2. Usikkerheder ved forureningsflux	22
4. Konklusion	24
5. Forslag til aktiviteter til 2009	24
6. Kilder	25

Bilag

- A – Procedure for prøvetagning og analyse af vandprøver på DTU Miljø
- B – Feltmålinger og redox parametre i vandprøver udtaget i juni, juli og august 2008.
- C – Koncentrationer af PCE og nedbrydningsprodukter i vandprøver udtaget i juni, juli og august 2008
- D – Forureningsudbredelse og -sammensætning for KB-transektet i juni 2008
- E – Input data til programmet Mass Flux Toolkit

1. Indledning

1.1. Baggrund

Bestemmelse af forureningsflux kan anvendes i forbindelse med et afværgetiltag, hvor fluxvurderinger kan være et af flere oprensingskriterier. Der eksisterer enkelte danske erfaringer, men metoden er ikke anvendt systematisk. Der er også meget fokus på vurdering af effekten af afværgetiltag. Det centrale spørgsmål er her sammenhængen mellem fjernelsen af forureningskilden og reduktionen i koncentrationer eller forureningsflux nedstrøms. Det kan både være relevant på lokal skala og på større skala nedstrøms flere forureningskilder.

1.1.1. Lokaliteten

Nærværende undersøgelse tager udgangspunkt i lokaliteten ved Vestergade 5 ved Skuldelev, hvor der i perioden 1969-1983 har været drevet metalvirksomhed. Tidligere undersøgelser (siden 2000) har vist en kraftig forurening af jord og grundvand med klorerede ethener, især PCE og TCE, ved og omkring lokaliteten (Region Hovedstaden, 2008a).

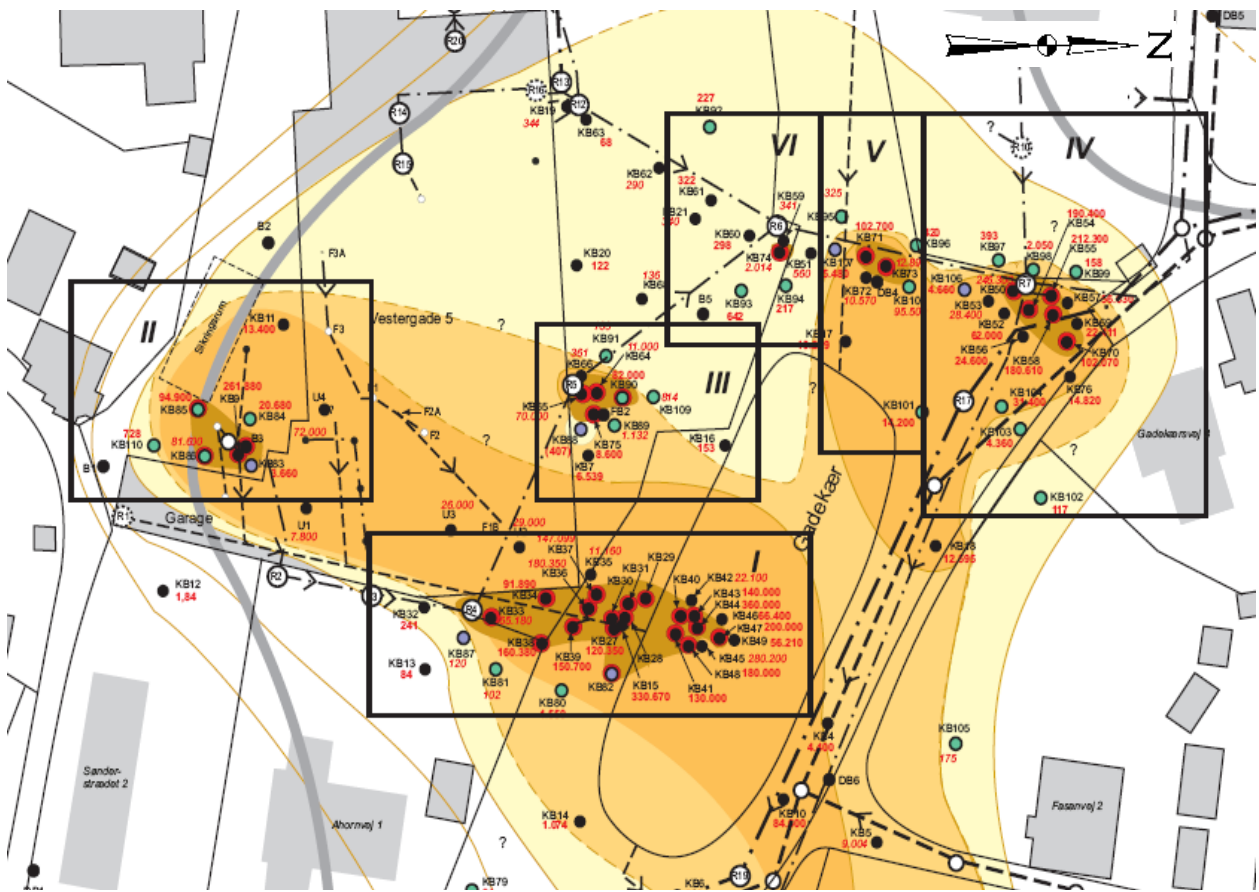
Utætheder i virksomhedens kloaksystem har skabt flere kildeområder. Der er ved tidligere undersøgelser lokaliseret seks kildeområder, hvor der er påvist fri fase PCE, benævnt hot-spot område I-VI. Deres placering fremgår af figur 1. Region Hovedstaden har i efterår 2008 igangsat afværgeforanstaltninger over for forureningen i område I (ved termisk oprensning, ISTD). Derudover er der påbegyndt oprensning af område V (ved ZVI-clay) i december 2008.

Ud fra hot-spot områderne er der påvist en forureningsfane der spreder sig i retning øst for gadekæret. Indhold af klorerede stoffer op til 85 000 µg/l blev fundet i områder uden for hot-spots. Forureningsfanen blev ikke afgrænset ca. 300 m nedstrøms kildeområderne. Den forureningsfane, som er konstateret tidligere i det sekundære magasin, fremgår af figur 2 (Region Hovedstaden, 2008a).

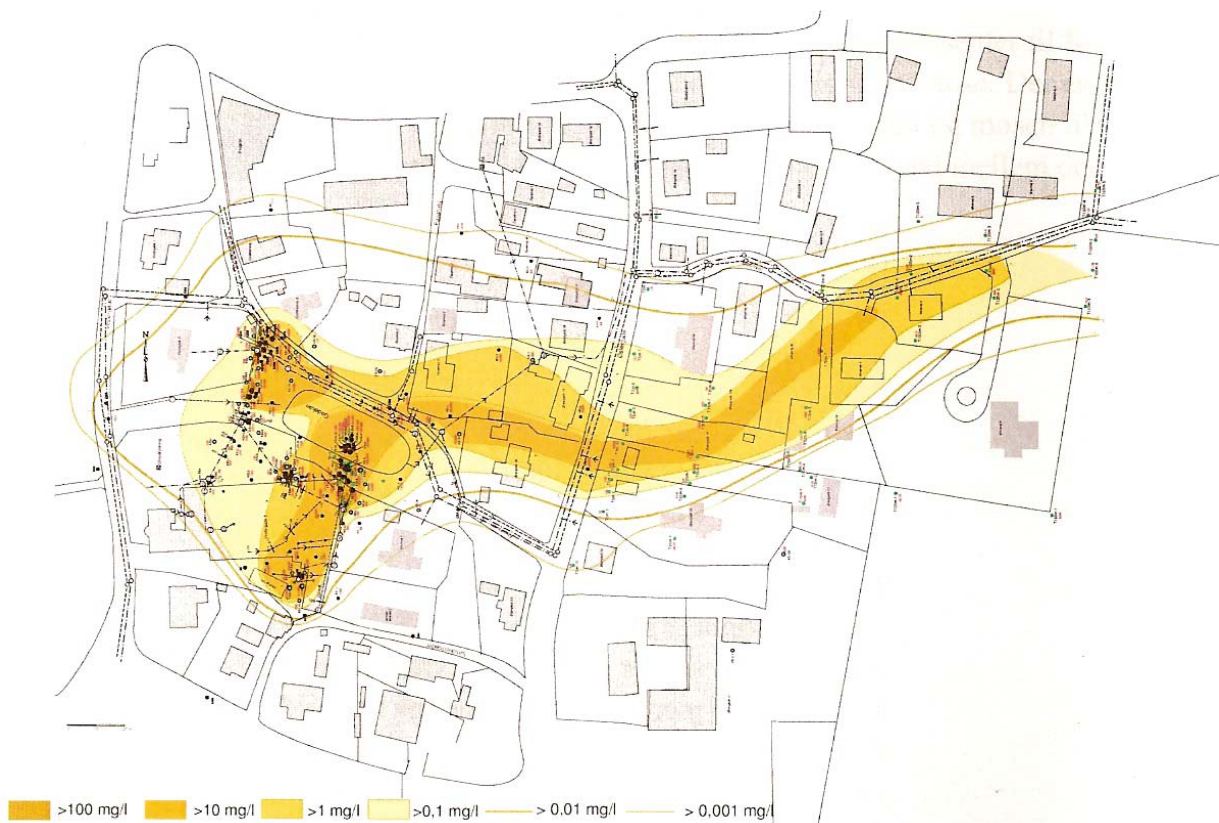
1.1.2. PCE og nedbrydningsprodukter

Klorerede ethener som PCE (tetraklorethylen) har været anvendt til rensning af tøj og til affedtning af metalemner i metalforarbejdende virksomheder. Klorerede ethener er generelt unedbrydelige under aerobe forhold. Nedbrydning af PCE kan fortrinsvis ske ved reduktiv deklorering, hvor der dannes TCE, DCE'er, vinylklorid, ethen og ethan.

Generelt er klorerede opløsningsmidler flygtige og nemt opløselig i vand. De spredes i den umættede zone og trænger let gennem bygningskonstruktioner. Klorerede ethener tilbageholdes kun i mindre grad ved sorption til jorden og spredes derfor med grundvandet i en forureningsfane. PCE, TCE og DCE'er er tungere end vand og vil derfor, hvis stofferne forekommer i fri fase, synke ned ad og forurene grundvandet til de når et impermeabelt lag (Bjerg et al., 2006).



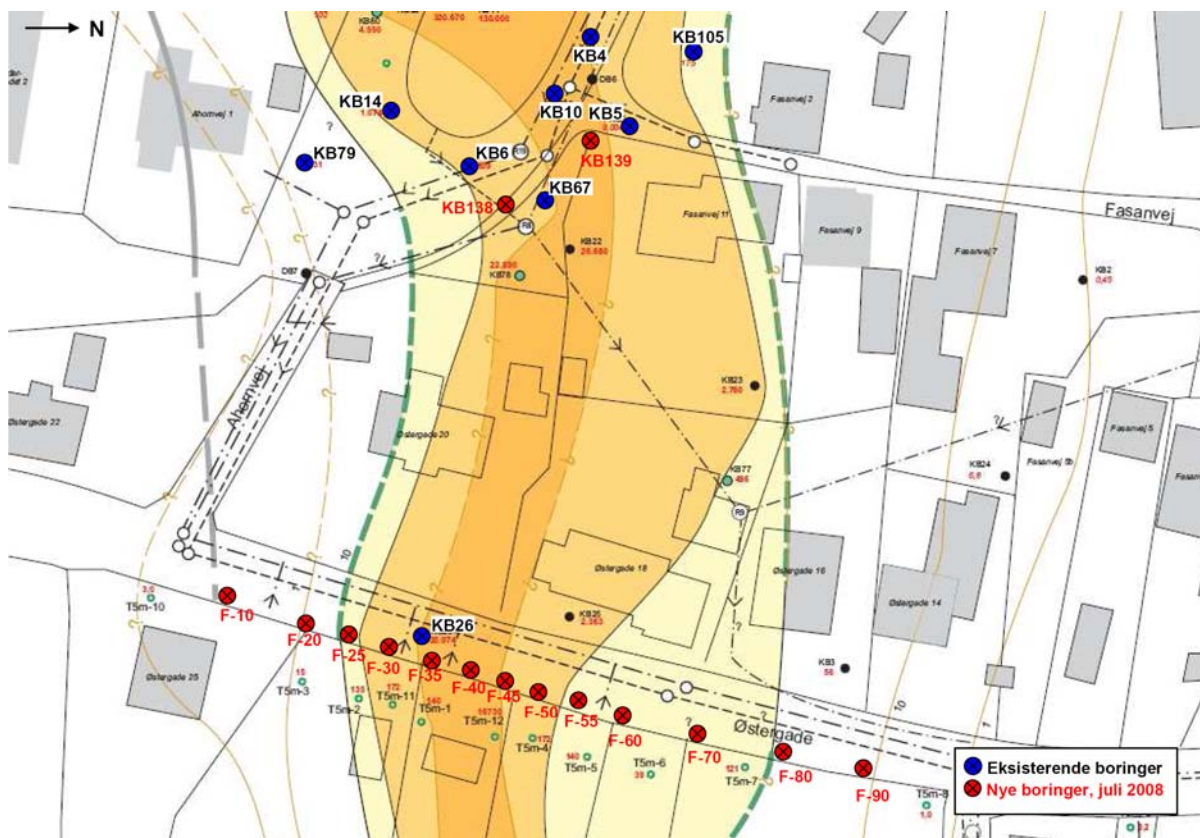
Figur 1 – Placering af hot-spot områderne I-VI ved Vestergade 5, Skuldelev, fra Region Hovedstaden, 2008a.



Figur 2 – Forureningsfane observeret i det sekundære magasin på lokalitet Vestergade 5, Skuldelev, fra Region Hovedstaden, 2008a.

1.1.3. Moniteringstransekter

Der blev i juli 2008 etableret to nye borerer øst for gadekæret. Sammen med udvalgte eksisterende borerer, udgør de et transekt langs en potentialelinje umiddelbart nedstrøms kildeområdet, benævnt KB-transekt. Derudover blev der etableret 26 nye borerer der, sammen med 2 eksisterende borerer (KB26-1 og -2), udgør et transekt, benævnt F-transekt, lokaliseret ca. 80 m nedstrøms kildeområdet. Der blev udtaget jordprøver i de nye borerer. Placering af alle borerer der udgør KB- og F-transektet fremgår af figur 3.



Figur 3 – Placering af alle borerer der udgør KB- og F-transekt.

1.2. Formål og strategi

Det overordnede formål af nærværende undersøgelse er at belyse effekten af oprensningen af lokaliteten ved Vestergade 5, Skuldelev, som er igangsat i efteråret 2008. Som et led i denne undersøgelse er der etableret et transekt (F) ca. 80 m fra kildeområdet, samt to nye borerer umiddelbart nedstrøms kilden. Forureningssituationen umiddelbart nedstrøms kilden bliver brugt til at forudsige forureningssituationen i F-transektet. I projektets første fase skal der etableres et datasæt for at belyse forholdene inden oprensningen er igangsat:

- Bestemmelse af redoxforhold, forurening med PCE, TCE, DCE, VC, ethen og ethan og omfang af anaerob dechlorering i KB-transektet øst for gadekæret og i F-transektet 80 m nedstrøms fra kilden.
- Beregne forureningsfluxen for summen af chlorerede ethener gennem F-tværsnittet baseret på en gennemsnitlig strømningshastighed og hydraulisk gradient.

I de næste faser vil den tidlige udvikling i koncentrationer og forureningsfluxen (for summen af

chlorerede ethener og enkeltstoffer) blive vurderet ved monitoring i begge transekter. Resultatet vil blive vurderet i lyset af oprensningen i kildeområderne og relateret til den totale forureningsmasse i fanen. Bestemmelsen af forureningsfluxen vil blive forfinet ved detailmålinger af den vertikale fordeling af forureningen, stedsspecifikke strømningshastigheder og vurdering af sorptionens betydning.

2. Materialer og Metoder

2.1. Feltundersøgelser

Med henblik på at etablere et baseline-datasæt blev der udtaget grundvandsprøver i juni, juli og august 2008.

Den første felttur foregik den 3. juni 2008 og indebar grundvandsprøvetagning i KB-tværsnittet, øst for gadekæret, samt i borerne KB26-1 og -2, 80 m nedstrøms kilden. Formålet var at belyse forureningsituationen tæt på kilden inden effekten af spunsningen omkring kildeområde I slår igennem, samt at beslutte placeringen af to nye borer i KB-transektet. Alle grundvandsprøver blev analyseret for følgende parametre: ledningsevne, temperatur, pH, opløst ilt, nitrat, sulfat, klorid, og PCE og nedbrydningsprodukter.

Den anden felttur foregik d. 14. og d. 15. juli 2008. Der blev udtaget grundvandsprøver i de fleste af borerne i det nye F-transektet 80 m nedstrøms kilden, samt i udvalgte borer i KB-transektet øst for gadekæret, inklusiv de to nye borer KB138 og KB139. Formålet var at belyse forureningsituationen 80 m nedstrøms kilden, samt at sammenligne de nye resultater i KB-tværsnittet med dem fra den første felttur. Grundvandsprøverne blev analyseret for samme parametre som før samt opløst mangan og jern.

Den tredje felttur foregik 26.-28. august. Der blev udtaget grundvandsprøver i alle borer i F-transektet samt alle borer i KB-transektet bortset fra KB79 og KB105-1. Grundvandsprøverne blev analyseret for de samme parametre samt sulfid og metan.

2.1.1. Forpumpning

Identifikation af borerne er foretaget ved at måle boringsafstanden til et kendt punkt på kort og ved at måle boringsdybden. Alle borerne var opbygget med 63 mm PE filter rør. Der var tilhørende slanger og whale pumper i alle gamle KB borerne. I de nye borerne (F-borerne, KB138 og KB139) blev der sat nye slanger og whale pumper. Måling af grundvandspejlet var altid foretaget inden forpumpning (bortset fra den første felttur) og uden at fjerne pumpen fra boringen.

Forpumpning blev altid foretaget inden prøvetagning. Ved forpumpningen var boringen tømt for et volumen svarende til tre gange vandvolumenet. Vandvolumenet (V i liter i ligning 1) er her defineret som volumen af vand stående i boringen. De lavtydende borerne var tomme efter oppumpning af nogle få liter. Derfor var forpumpning her udført i intervaller og det samlede oppumpede volumen fra hver boring er noteret.

$$V = \pi \cdot h \cdot \frac{D^2}{4} \cdot 1000$$

Ligning 1

$$D \text{ (m)} = 0,063$$

$$h \text{ (m)} = \text{boringsdybden} - \text{vandspejlsdybden}$$

De fleste af boringerne på lokaliteten gav rigeligt med vand. Nogle boringer gav meget lidt vand men prøvetagning var mulig (KB4-1, KB67-2, F35-1, F50-2 og F55-1). Ved anden felttur var nogle boringer formodentligt tørre (DB6-2, KB105-2, F35-2, F80-1 og F90-2), og der blev derfor ikke udtaget vandprøver i dem. Men i tredje felttur var det mulig at udtage vandprøver i boringer F35-2 (meget vandførende), F80-1 og F90-2, selv om de sidste to var meget lidt vandførende, og der derfor blev brugt en slangepumpe. Boringer KB5 og KB79 kunne ikke findes i juli. KB79 lå sandsynligvis under køreplader og blev heller ikke fundet i august, mens boring KB5 blev genfundet i august.

Under renpumpning og prøvetagning var pumpen placeret 1 m over bunden af boringen, bortset fra ved den første felttur og i de meget lidt vandførende boringer. Pejling og renpumpningsdata for tværsnittene KB (umiddelbart øst for gadekæret) og F (80 m nedstrøms) fremgår af hhv. tabel 1 og tabel 2.

Tabel 1 – Pejling og renpumpningsdata i KB tværsnittet, øst for gadekæret. V - vandvolumen

Boring	Filter placering mut	Prøvetagningsdato	Vandspejlskote m DVR90	3*V (l)	Renpumpning volumen (l)	Pumpens placering ved renpumpning og prøvetagning
KB14	2,9-4,9	03-06-2008	--	--	38	Bunden af boring 1 m over bunden af boring
		28-08-2008	3,79	37	> 30	
KB6-1	4,6-5,6	03-06-2008	--	--	64	Bunden af boring 1 m over bunden af boring 1 m over bunden af boring
		15-07-2008	3,76	39	26	
KB6-2	1,3-2,8	28-08-2008	3,81	42	> 40	
		03-06-2008	--	--	24	Bunden af boring ½ m over bunden af boring Bunden af boring
KB138-1	5,1-6,1	15-07-2008	3,74	42	40	
		28-08-2008	3,67	43	29*	42
KB138-2	2,4-3,4	15-07-2008	3,80	17	25*	Bunden af boring 1 m over bunden af boring
		28-08-2008	3,64	18	20	
KB67-1	3,8-4,8	03-06-2008	--	--	26	Bunden af boring 1 m over bunden af boring 1 m over bunden af boring
		15-07-2008	3,73	28	33	
KB67-2	1,7-2,7	28-08-2008	3,77	30	38	
		03-06-2008	--	--	5	Bunden af boring
KB10-1	3,8-4,8	15-07-2008	3,78	9	14	
		28-08-2008	3,91	12	11	
KB10-2	2,0-3,0	03-06-2008	--	--	25	Bunden af boring 1 m over bunden af boring 1 m over bunden af boring
		15-07-2008	3,76	31	30	
KB139-1	5,6-6,6	28-08-2008	3,73	31	39	
		03-06-2008	--	--	25	Bunden af boring ½ m over bunden af boring ?
KB139-2	2,9-3,9	15-07-2008	3,77	13	44	
		28-08-2008	3,79	14	13	
KB4-1	6,0-7,0	15-07-2008	3,56	40	27*	1 m over bunden af boring
		28-08-2008	3,68	43	> 40	
KB4-2	2,5-4,0	15-07-2008	3,56	14	15*	Bunden af boring
		28-08-2008	3,58	18	14	
KB5-1	4,8-6,0	03-06-2008	--	--	20	Bunden af boring 1 m over bunden af boring
		28-08-2008	3,50	51	53	
KB5-2	1,7-2,7	03-06-2008	--	--	20	Bunden af boring ?
		28-08-2008	3,78	24	36	
KB105-1	5,3-6,5	28-08-2008	3,81	38	35	1 m over bunden af boring
KB105-2	1,5-2,5	28-08-2008	3,73	7	8	Bunden af boring
KB105-1	5,3-6,5	03-06-2008	--	--	23	Bunden af boring
KB105-2	1,5-2,5	03-06-2008	--	--	--	Bunden af boring

* første gang renpumpning: 120 l på prøvetagningsdag

Tabel 2 – Pejling og renpumpning data i F-tværsnittet, 80 m nedstrøms kilden. V – beregnet vandvolumen

Boring	Filter placering mut	Prøvetagningsdato	Vandspejlskote m DVR90	3*V (l)	Renpumpning volumen (l)	Pumpens placering ved renpumpning og prøvetagning
F-10-1	6,0-7,0	14-07-2008	3,52	32	30	1 m over bunden af boring
		26-08-2008	3,58	33	52	
F-10-2	3,5-4,5	14-07-2008	3,94	13	27	Bunden af boring
		26-08-2008	3,96	13	34	
F-20-1	6,0-7,0	14-07-2008	3,52	32	32	1 m over bunden af boring
		26-08-2008	3,58	32	40	
F-20-2	3,5-4,5	14-07-2008	3,52	9	24	Lige under vandspejl Bunden af boring
		26-08-2008	3,52	9	36	
F-25-1	8,0-9,0	14-07-2008	3,73	53	26	1 m over bunden af boring
		26-08-2008	3,56	51	41	
F-25-2	5,0-6,0	14-07-2008	3,76	25	28	1 m over bunden af boring
		26-08-2008	3,57	23	50	
F-30-1	6,0-7,0	14-07-2008	--	--	27	1 m over bunden af boring
		26-08-2008	3,59	34	32	
F-30-2	3,5-4,5	14-07-2008	3,67	11	30	1 m over bunden af boring Bunden af boring
		26-08-2008	3,59	10	30	
KB26-1	6,2-7,2	03-06-2008	--	--	26	Bunden af boring
		15-07-2008	3,54	35	28	1 m over bunden af boring
		26-08-2008	3,64	36	28	1 m over bunden af boring
KB26-2	3,8-4,8	03-06-2008	--	--	40	Bunden af boring
		15-07-2008	3,56	13	38	1 m over bunden af boring
		26-08-2008	3,60	13	38	1 m over bunden af boring
F-35-1	8,0-9,0	15-07-2008	3,45	52	1**	Bunden af boring
		27-08-2008	3,39	51	38	
F-35-2	5,0-6,0	26-08-2008	3,59	25	67	1 m over bunden af boring
F-40-1	6,0-7,0	14-07-2008	3,68	35	26	1 m over bunden af boring
		26-08-2008	3,58	34	40	
F-40-2	3,5-4,5	14-07-2008	3,68	11	27	Bunden af boring
		26-08-2008	3,58	10	21	
F-45-1	8,0-9,0	14-07-2008	3,65	54	23	1 m over bunden af boring
		26-08-2008	3,58	53	59	
F-45-2	5,0-6,0	14-07-2008	3,73	26	23	1 m over bunden af boring
		26-08-2008	3,58	25	33	
F-50-1	6,0-7,0	14-07-2008	3,68	35	27	1 m over bunden af boring
		26-08-2008	3,58	34	41	
F-50-2	3,5-4,5	15-07-2008	3,76	13	6** + 2 [□]	Bunden af boring
		27-08-2008	3,67	12	11**	
F-55-1	8,0-9,0	15-07-2008	3,66	54	13** + 4 [□]	Bunden af boring
		27-08-2008	3,48	52	20**	
F-55-2	5,0-6,0	14-07-2008	3,79	27	28	1 m over bunden af boring
		26-08-2008	3,60	25	35	
F-60-1	6,0-7,0	14-07-2008	3,72	36	28	1 m over bunden af boring
		27-08-2008	3,62	35	35	
F-60-2	3,5-4,5	14-07-2008	3,73	12	30	½ m over bunden af boring Bunden af boring
		27-08-2008	3,64	11	15	
F-70-1	6,0-7,0	14-07-2008	3,70	35	27	1 m over bunden af boring
		27-08-2008	3,64	35	35	
F-70-2	3,5-4,5	14-07-2008	3,73	12	27	Bunden af boring
		27-08-2008	3,63	11	12	
F-80-1	6,0-7,0	27-08-2008	3,55	33	33	Bunden af boring
F-80-2	3,5-4,5	14-07-2008	3,54	10	29	½ m over bunden af boring ?
		27-08-2008	3,63	11	15	
F-90-1	6,0-7,0	14-07-2008	3,44	32	25	1 m over bunden af boring
		27-08-2008	3,50	33	31	
F-90-2	3,5-4,5	27-08-2008	3,36	8	2	Bunden af boring

** pumpet dagen før prøvetagning

□ pumpet på prøvetagningsdag

kursiv - usikkerværdier

2.1.2. Udtagning og analyse af grundvandsprøver

Elektroderne til måling af ledningsevne, temperatur, pH og iltindhold (flowcelleparametre) var kalibreret inden første måling på dagen. Efter forpumpning var disse parametre målt i en kombineret flowcelle, som gennemstrømmes af vand direkte fra boringen. Flowcellen er lufttæt. Parametrene blev noteret, når de alle var stabile.

Grundvandsprøverne til kemisk analyse blev først udtaget efter måling af flowcelleparametre. Grundvandsprøverne blev analyseret for indhold af PCE og nedbrydningsprodukter, redox parametre (nitrat, mangan, jern, sulfat, sulfid og metan) og klorid. Alle grundvandsprøver blev udtaget direkte fra en vandstråle. Prøverne til analyse i laboratorium blev opbevaret i en køletaske indtil hjemkomst (bortset fra d. 3. juni, hvor de blev opbevaret i skygge) og opbevaret i 4 °C eller frosset efter hjemkomst.

Detektion- og kvantifikationsgrænser for undersøgte stoffer fremgår af tabel 3. Efter hver GCMS analyse blev der beregnede nye detektionsgrænser ved tilføjelse af gennemsnit for blindprøver til metodens detektionsgrænser. Der henvises til DTU Miljø's analysevejledninger for detaljeret beskrivelse af analysemetoderne.

2.1.2.1. Klorerede ethener inkl. ethen og ethan

Prøverne til analyse af PCE, TCE og nedbrydningsprodukter blev udtaget direkte i 40 ml glasvials med så lidt headspace som muligt, og konserveret i felten med 2 dråber koncentreret eller 4 dråber 4M svovlsyre. De blev opbevaret på hovedet i 4 °C efter hjemkomst.

Til analyse er 1 ml prøve injiceret i et headspaceglas med septum. Headspaceglassene er i forvejen tilsat 0,5 ml intern standard (kloroform) indeholdende 4 vol% svovlsyre. Analysen er foretaget ved brug af gaschromatograf (GC Agilent 6890N) kombineret med en mass selective detector (Agilent 5973). Prøver fra headspace af vials er injiceret ved brug af autosampler (Perkin Elmer Turbomatrix 40). Kollonens dimensioner er 30 m x 0,32 mm x 20 µm (HP-plot) og helium er bæregas. Databelandling er foretaget i programmet GC Enhanced data analysis.

2.1.2.2. Jern og mangan

Prøverne til analyse af jern og mangan blev udtaget med en 50 ml plastik sprøjte og filtreret gennem en 0,45 µm filter (bortset fra juni prøver, ikke filtreret) til 20 ml PE-vials med så lidt headspace som muligt. Prøverne er konserveret i felten med 2 dråber koncentreret eller 4 dråber 4M salpetersyre (HNO₃). De blev opbevaret i 4 °C efter hjemkomst.

Analyse af jern og mangan er foretaget ved Flamme Atom Absorptions Spektrofotometri (AAS) på en Perkin Elmer, AAnalyst 200. Bølgelængderne for jern og mangan var hhv. 248,3 nm og 279,8 nm. Til analysen er lavet standardkurver i intervallet 0,5 til 3,0 mg/l og 0,1 til 1,5 mg/l for hhv. jern og mangan. Prøver udenfor dette interval er fortyndet i en opløsning med 1 % HNO₃. Da vandprøverne udtaget den 3. juni ikke blev filtreret ved prøvetagning, måles der indhold af total jern og total mangan. I øvrige prøver måles der indhold af opløst jern og mangan, som svarer til hhv. Fe(II) og Mn(II).

2.1.2.3. Anioner (klorid, nitrat og sulfat)

Prøverne til analyse af klorid, nitrat og sulfat blev udtaget med en 50 ml plastik sprøjte og filtreret gennem en 0,45 µm filter (bortset fra juni prøver, ikke filtreret) til 5 ml PE-vials, der blev fyldt ca. ¾ op. De blev frosset efter hjemkomst.

Anionerne blev analyseret ved ion-kromatografi (IC) på en Dionex Ion Cromatograf ICS-1500 med Ion Pac AS 14 mm kolonne i kombination med en *anion suppressor* (AMMS III 4-mm P/N 56750) samt autosampleren 234 Auto injector fra Gilson. Til analyse er 0,5 ml prøve brugt. Standarder er fremstillet ud fra NaCl, KNO₃ og Na₂SO₄. Databehandling er foretaget i programmet GC-solution version 2.23.

2.1.2.4. Methan

3 ml prøve er i felten injiceret i et vakuum tørglas med septum. Glasset er i forvejen tilsat 3-4 dråber koncentreret svovlsyre. Analysen er foretaget på gaschromatograf (Shimadzu GC-14 A) med FID detektor og en 1 m pakket kolonne (80/120 Carbopack B/3% SP-1500). 0,2 ml gasprøve er manuelt injiceret og kørt ved 100°C i 1 minut. Til analysen er fremstillet 7 standarder i intervallet 0,2 – 22,3 mg CH₄ / l vand. Standarder er fremstillet ved brug af 100 % metan (Mikrolab, Århus) tilsat samme vakuum tørglas som brugt ved prøvetagning. Databehandling er foretaget i programmet GC Postrun Analysis version 2.21.00.

2.1.2.5. Sulfid

Prøver til sulfid analysen blev udtaget med 5 ml plastik sprøjte og analyseret med det samme på et feltspektrofotometer. Der blev udtaget to prøver i hver boring. Til den ene blev der tilsat felt kits reagenser mens den anden blev målt uden reagenter og svarer til en blindprøve. Blindprøveværdierne blev trukket fra prøveresultater.

Tabel 3 – Detektion- og kvantifikationsgrænser for undersøgte stoffer.

Analyse metode	Stof	Enhed	Detektionsgrænse	Kvantifikationsgrænse
GCMS	PCE	µg/l	0,27	0,89
	TCE	µg/l	0,5	1,66
	Cis-DCE	µg/l	0,31	1,05
	Trans-DCE	µg/l	0,35	1,16
	1,1-DCE	µg/l	0,26	0,88
	VC	µg/l	1,02	3,39
	Ethen	µg/l	0,88	2,95
	Ethan	µg/l	2,6	8,65
IC	Klorid	mg/l	0,38	1,28
	Nitrat	mg/l	0,15	0,49
	Sulfat	mg/l	0,27	0,89
AAS	Jern	mg/l	0,012	0,040
	Mangan	mg/l	0,011	0,042
Spektrofotometer	Sulfid	mg/l	0,10	---
GC	Metan	mg/l	0,02	0,07

2.2. Databehandling

2.2.1. Reduktiv deklorering

Summen af klorerede opløsningsmidler bruges som måling af forureningsniveauet. I det følgende svarer det til summen af de enkelte klorerede etheners koncentration, inklusiv ethen og ethan. Hvor koncentrationen ligger under detektionsgrænsen, beregnes den som nul.

Molkoncentrationer (ligning 2) af alle stoffer fra moderstof til ethen og ethan skal kendes for at bestemme molfraktionen af et enkelt stof.

$$\text{Molkonc. } (\mu\text{mol} / \text{L}) = \frac{\text{Konc. } (\mu\text{g} / \text{L})}{\text{Molvægt } (\mu\text{g} / \mu\text{mol})} \quad \text{Ligning 2}$$

Molfraktionen dvs. den andel, som det enkelte klorerede ethen udgør af summen af klorerede ethener, illustrerer, om der sker en sekventiel deklorering af PCE gennem vinylklorid til ethen. Ved en fuldstændig deklorering af PCE vil molfraktionen af PCE mindskes, mens TCE, DCE, vinylklorid efterfulgt af ethen og eventuelt ethan vil udgøre en stadig større del af den samlede sum af klorerede ethener. Ligning 3 viser beregning af molfraktion af TCE ved PCE som moderstof.

$$\text{Molfraktion TCE(\%)} = \frac{\text{TCE}}{\sum \text{PCE} + \text{TCE} + \text{DCE} + \text{VC} + \text{Ethen} + \text{Ethan}} \cdot 100\% \quad \text{Ligning 3}$$

Udover molfraktionen er også dekloreringsgraden (DKG) brugt i vurderingen af oprensningseffekten. Dekloreringsgraden fortæller om udviklingen i den reductive deklorering. En stigende dekloreringsgrad udtrykker, at de højere klorerede stoffer reduceres til lavere klorerede stoffer. Dekloreringsgraden er beregnet ud fra molkoncentrationer. Ligning 4 viser beregningen af dekloreringsgraden ved PCE som moderstof (Jørgensen et al., 2007).

$$\text{DKG(\%)} = \frac{\text{TCE} + 2 \cdot \text{DCE} + 3 \cdot \text{VC} + 4 \cdot (\text{Ethen} + \text{Ethan})}{4 \cdot (\text{PCE} + \text{TCE} + \text{DCE} + \text{VC} + \text{Ethen} + \text{Ethan})} \cdot 100\% \quad \text{Ligning 4}$$

2.2.2. Forureningsflux

Forureningsfluxen angiver, hvor meget forureningsmasse der bevæger sig tværs over et kontrolplan pr. tid. Den udtrykker den samlede forureningsbelastning fra en eller flere punktkilder opstrøms kontrolplanen. Fluxen estimeres gennem et kontrolplan etableret vinkelret på forureningsfanen. Det er vigtigt, at boringerne i kontrolplanet dækker hele forureningsfanen både horisontalt og vertikalt.

Ved Skuldelev blev forureningsfluxen beregnet vha. niveauspecifik prøvetagning, hvor der måles koncentration og hydraulisk ledningsevne i alle kontrolplanets filtre, og den hydraulisk gradient for området. Fluxen estimeres ved brug af ligning 5 (Tuxen et al., 2006), hvor kontrolplanet er delt i celler og hver celle (i) er tildelt et areal (A), en koncentration (C), en hydraulisk ledningsevne (K) og en gradient (dh/dl). Arealet afhænger af borings- og filterplacering. Den samlede flux gennem kontrolplanet (J_{total}) bestemmes ved at summere fluxene gennem de enkelte celler.

$$J_{total} = \sum_{i=1}^n A_i \cdot C_i \cdot K_i \cdot \frac{dh}{dl}$$

Ligning 5

J_{total} : Total flux (g/år)
 A_i : Areal af celle i (m²)
 C_i : Koncentration (g/m³)
 K_i : Hydraulisk ledningsevne (m/år)
 dh/dl : Hydraulisk gradient
 n : Antal celler

2.2.3. Mass Flux Toolkit

Programmet Mass Flux Toolkit (Farhat et al., 2006), som er bygget op i programmet Excel, kan beregne fluxen gennem et eller flere kontrolplan gennem en forureningsfane. Programmet kræver følgende input:

- Placering af boring i det givne tværsnit
- Monitoringspunkts top og bunden
- Forureningsfanens top og bunden
- Hydraulisk ledningsevne
- Hydraulisk gradient
- Koncentration

Mass Flux Toolkit antager følgende:

- Der er ensartet flow og koncentration i hver grid-celle
- Forureningsfanens top, bund og sider er kendte
- Cellenet for de benyttede data er tæt nok til at karakterisere strukturen af forureningsfanen
- Tværsnittet ligger vinkelret på grundvands flowretning

Efter alle data er indsat i grid-filen, interpolerer programmet mellem data for hydraulisk ledningsevne, hydraulisk gradient og koncentration. Dette sker først vertikalt og bagefter horisontalt. Der kan vælges følgende interpolationsmetoder:

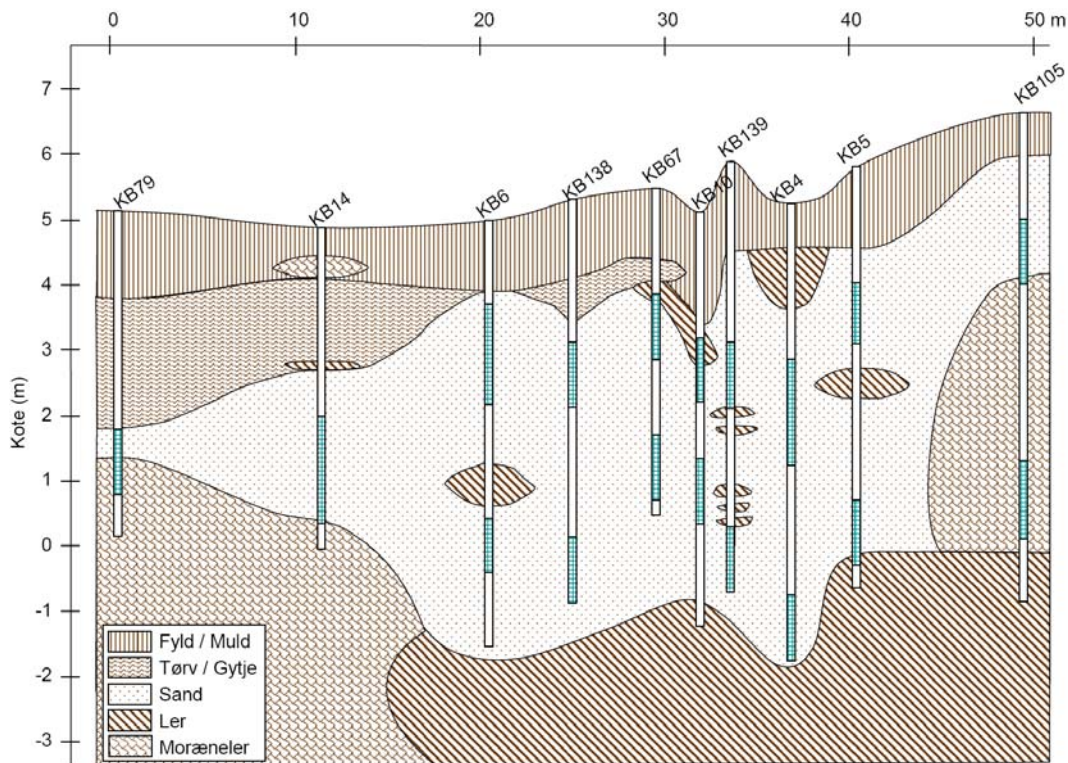
- Brugerdefineret
- Nærmeste nabo
- Lineær interpolation
- Logaritmisk interpolation

Programmet benytter samme formel som ligning 5 til beregning af fluxen gennem tværsnittet.

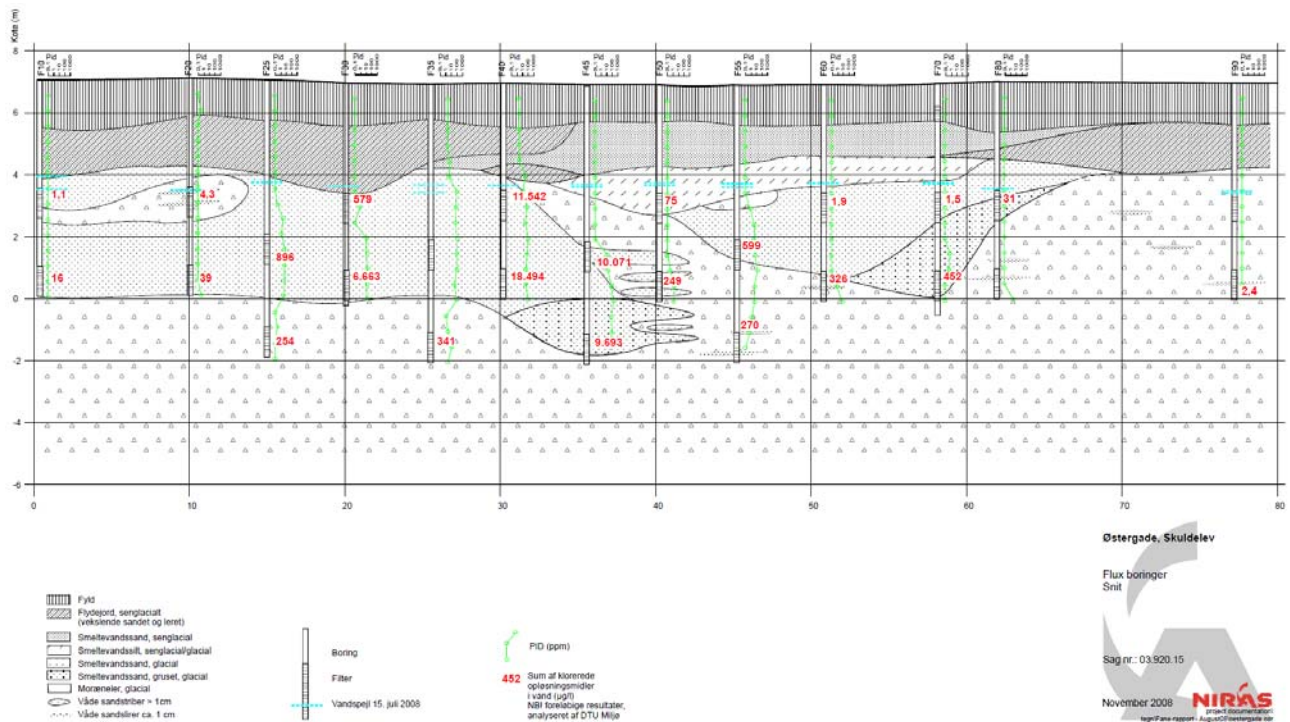
3. Resultater og diskussion

3.1. Geologi og hydrogeologi

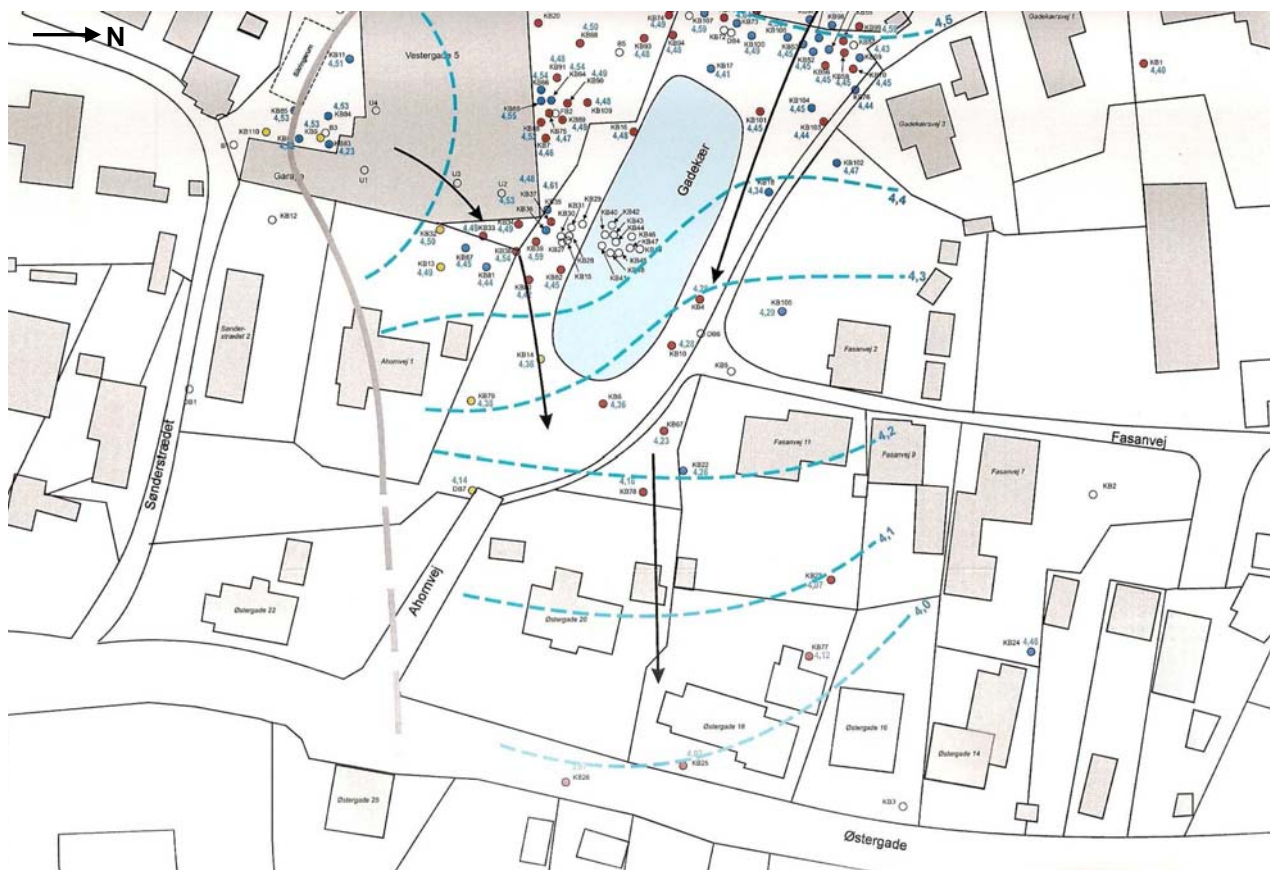
Geologien i de undersøgte transekter fremgår af figur 4 og figur 5. Geologien er baseret på bopingsdata. Kort over grundvandspotentiale målt i september 2007 fremgår af figur 6. Efter gadekæret er strømningsretningen mod øst. Den hydrauliske gradient blev ved brug af potentialelinjer 4,2 og 4,0 (umiddelbart opstrøms F-transektet) estimeret til ca. 5 ‰ (mellem $4,4 \cdot 10^{-3}$ og $5,9 \cdot 10^{-3}$).



Figur 4 – Geologien i KB-transektet øst for gadekæret.



Figur 5 – Geologien i F-transektet 80 m nedstrøms kildeområdet, fra Region Hovedstaden, 2008b.



Figur 6 – Potentiale målt i sekundært magasin (m DVR90), øvre filtre, september 2007, fra Region Hovedstaden, 2008a.

3.2. Redox forhold

I det følgende vurderes redoxforholdene på baggrund af grundvandsanalyser indeholdende de typiske redoxparametre: ilt, nitrat, opløst mangan, opløst jern, sulfat, sulfid og metan. Disse parametre samt ledningsevne, temperatur, pH og kloridindhold er vist i bilag B.

Hvert filter blev redox-karakteriseret på baggrund af kriterier værdier som er subjektive og site-specifikke. Koncentrationsniveauer blev valgt ud fra den samlet vurdering af fanen sammensætning i forhold til de typiske redox parametre. De fortolkede redoxforhold er i figur 7 og figur 8 afbildet for hhv. KB- og F-transektet. Fortolkningerne er lavet samlet for de tre prøvetagninger og skal ikke opfattes som entydige.

3.2.1. KB-transekt

KB-transektet vurderes som jern-sulfatreducerende til methanogene (sydligedel) med et aerob til mangan-jernreducerende område ved KB10-KB5 (nordligedel).

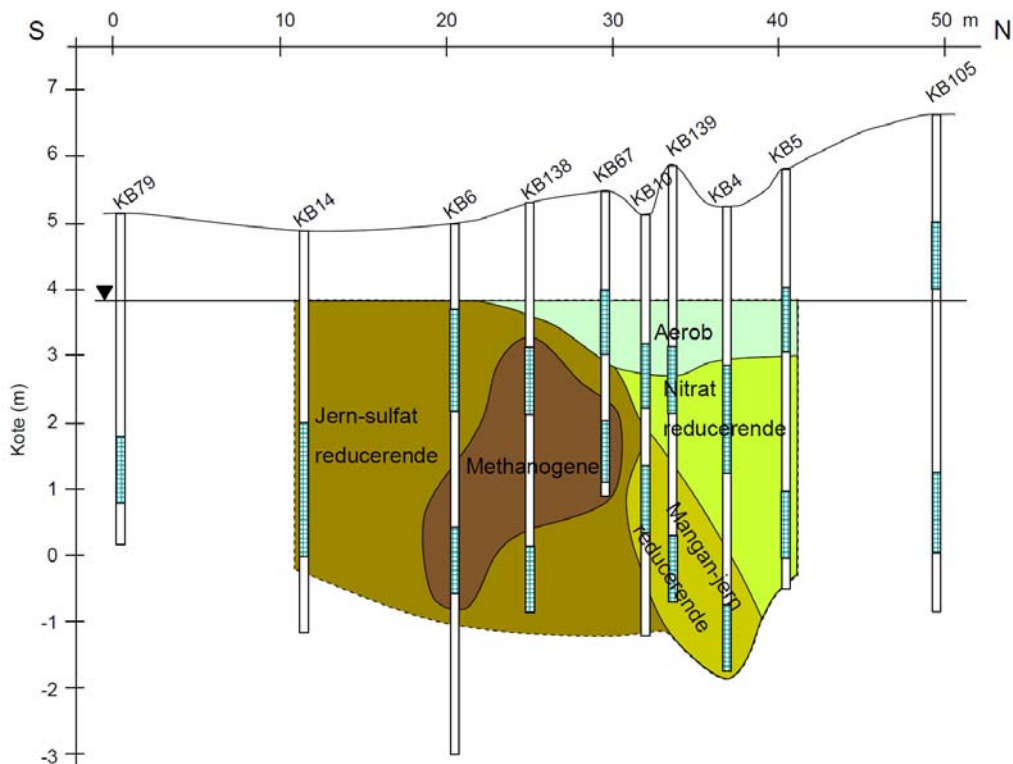
Iltindholdet ligger under 0,5 mg O₂/l for de fleste af boringer langs KB-transektet. Iltindholdet højere end 1,0 mg/l blev fundet i grundvandet fra boringer KB67-2, KB139-2 og KB5-2. Der vurderes at være aerobe forhold langs den nordlige del af KB-transektet til knap 1 m under vandspejlet.

Nitratindholdet under 1,5 mg/l blev fundet i alle grundvandsprøver i KB-transektet. Nitratreducerende forhold findes ved boringer KB5-1, KB4-2, og delvis ved KB139-2 og KB10-2.

Mangan og jernindhold op til hhv. 1,1 og 3,0 mg/l blev fundet i KB-transektet. Hvor der var højt mangan og jern indhold (over hhv. 0,2 og 1,5) og samtidigt højt sulfatindhold (over 60 mg/l) vurderes redoxforholdene som mangan-jernreducerende. Mangan- og jernindhold i grundvandet viser mangan og jern reduktion på prøvetagningspunktet eller opstrøms (Christensen et al, 2000).

Sulfatindhold varierede mellem 22 mg/l og ca. 90 mg/l. Hvor der var lavt sulfatindhold (under 60 mg/l) og samtidigt højt jernindhold (over 0,5 mg/l) vurderes redoxforholdene som jern-sulfatreducerende.

Der blev fundet methanindhold op til 3,9 mg/l. Der findes methanogene forhold (hvor methanindhold var over 1,5 mg/l) ved boringer KB6-1, KB138-2 og KB67-1.



Figur 7 – Tolkede redoxforhold i grundvandet i KB-transektet øst for gadekæret, baseret på data fra juni, juli og august 2008, se bilag B.

3.2.2. F-transekt

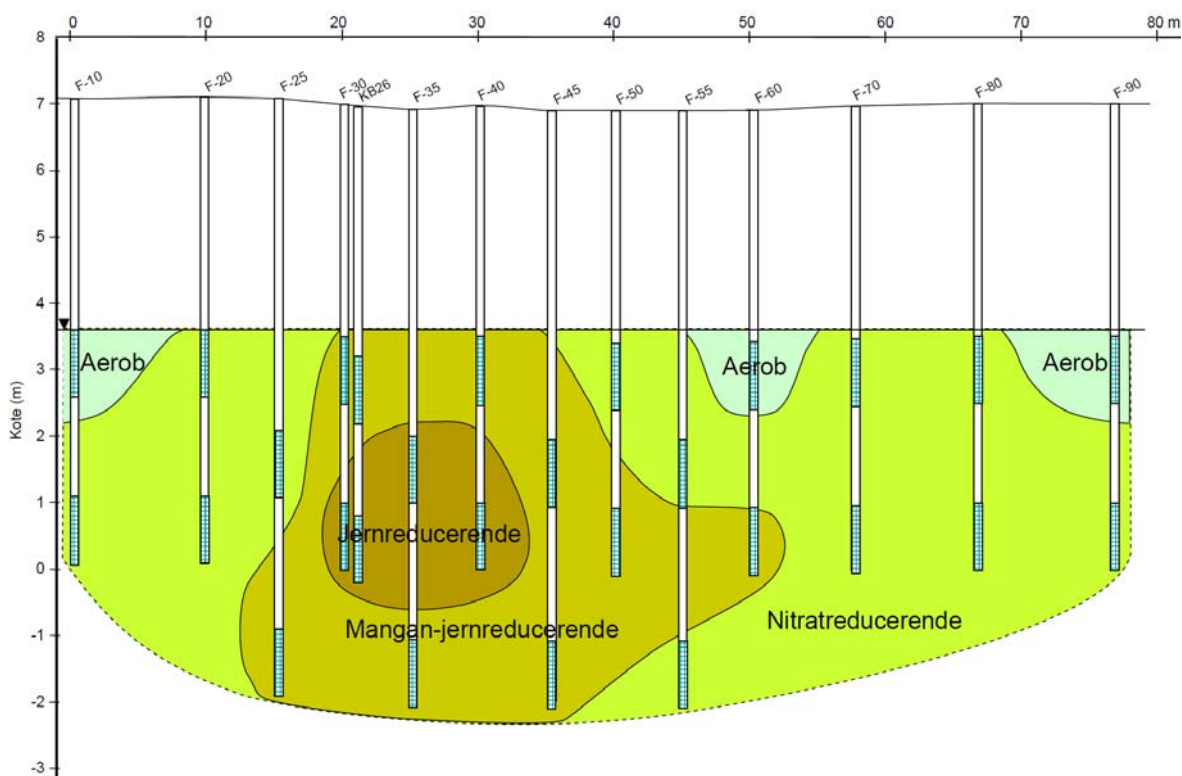
F-transektet vurderes som aerob til nitratreducerende i udkanterne og mangan-jernreducerende til jernreducerende i midten af forureningsfanen.

Iltindholdet ligger under 1,0 mg O₂/l for de fleste af borerne langs F-transektet. Iltindholdet højere end 1,0 mg/l blev fundet i grundvandet fra borerne F10-2 og F60-2. Det viser aerobe forhold ved disse borer. Borerne F50-2, F55-1 og F80-1 er meget lidt vandførende, og derfor kan vandet måske blive iltet i boring inden det når flowcellen, hvilket kan forklare de høje værdier fundet på iltmålinger i vandet fra disse borer.

Hvor grundvandet havde højt nitratindholdet (over 10 mg/l) og samtidigt lavt mangan- og jernindhold (under hhv. 0,3 og 0,2 mg/l) blev redoxforholdene vurderet som nitratreducerende. Det svarer til de fleste af borerne i udkanterne af F-transektet.

Mangan-jernreducerende forhold findes i midten af F-transektet. Her har grundvandet højt mangan- og jernindhold (over hhv. 0,3 og 0,2 mg/l) og samtidigt lavt nitratindhold.

Mere reducerende forhold findes i kernen af F-transektet mellem borerne F30-1 og F40-1. Grundvandet her karakteriseres ved methanindholdet over 1,5 mg/l (op til 3,6 mg/l). Området er sandsynligvis som minimum jernreducerende. Sulfatreducerende forhold er mindre sandsynlige da sulfat ikke udviser nogen tendens til lavere værdier i dette område. Dermed er det også tvivlsomt om methanindholdet er et udtryk for aktiv methanproduktion. Methanindholdet fundet i grundvandet fra F-transektet kan stamme fra methanproduktion enten i prøvetagningspunktet eller opstrøms i kildeområdet, da methan kan transporteres i forureningsfanen (Christensen et al, 2000).



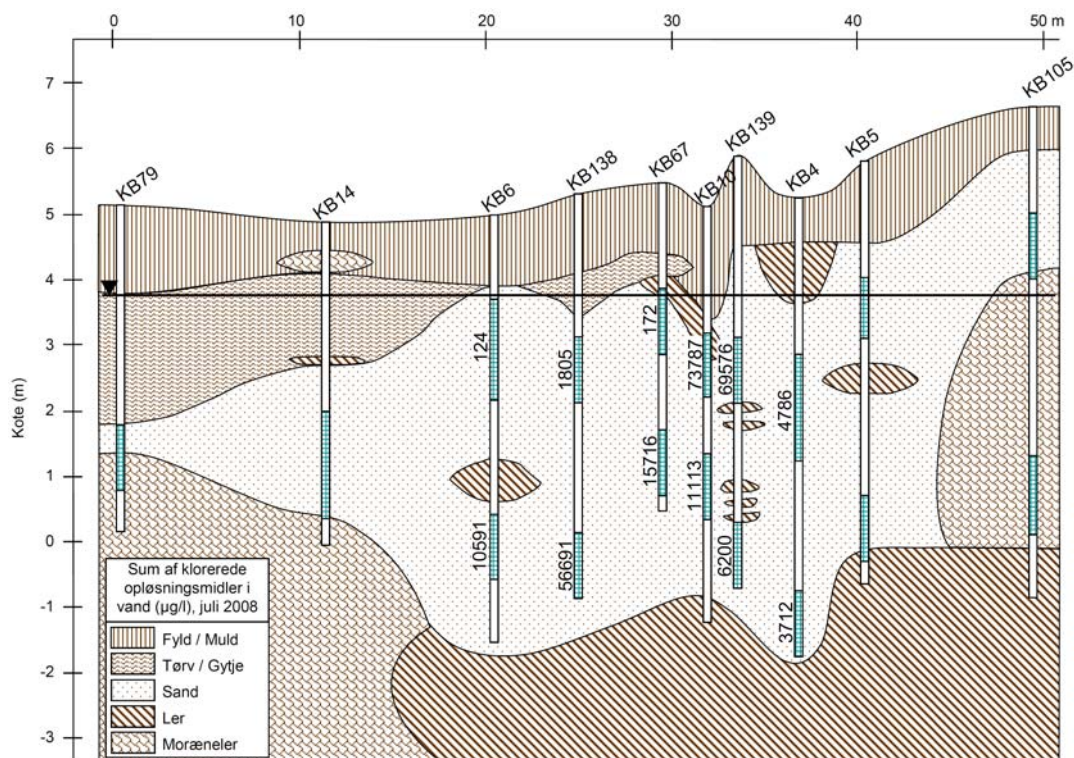
Figur 8 – Tolkede redoxforhold i grundvandet i F-transektet 80 m nedstrøms kilden, baseret på data fra juni, juli og august 2008, se bilag B.

3.3. Forureningsudbredelse og -sammensætning

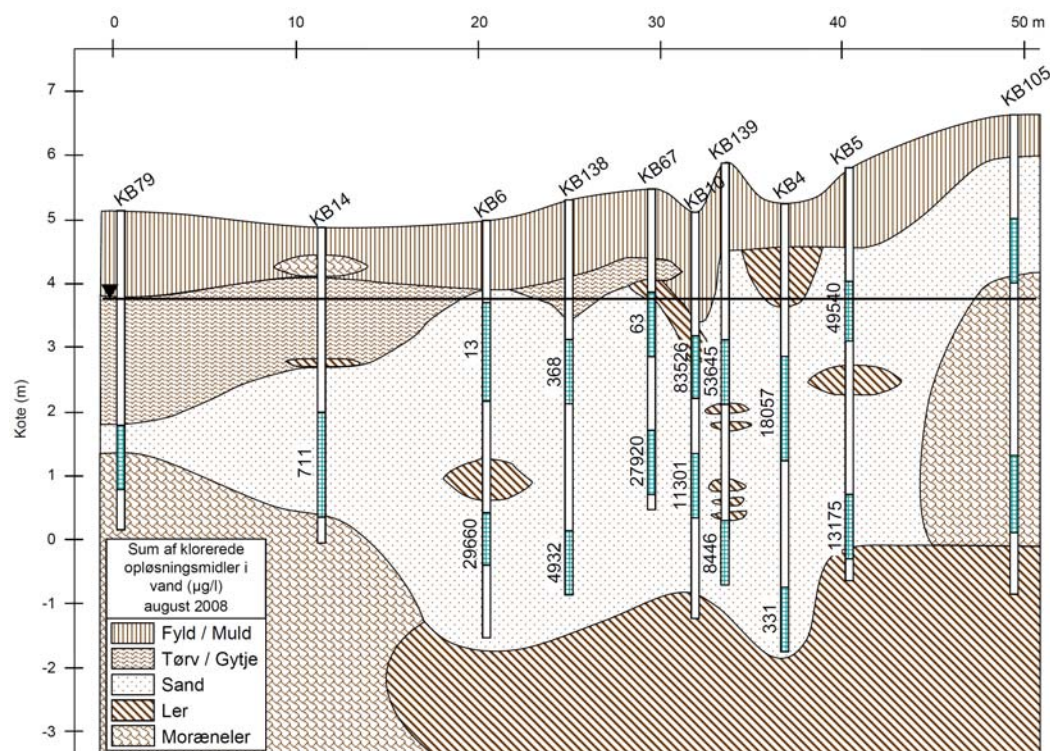
Det følgende er baseret på koncentrationer af PCE, TCE og nedbrydningsprodukter i grundvandsprøver udtaget i juni, juli og august 2008. Resultaterne af laboratorium analyser ved GCMS fremgår af bilag C. Udbredelsen af forureningen er vist som sum af klorerede ethener inklusiv ethen og ethan.

3.3.1. KB-transekt

Udbredelsen af forureningen på tværs af strømningsretningen umiddelbart øst for gadekæret fremgår af figur 9 og figur 10. Der er omtrent samme forureningsbillede i hele perioden. Midten af fanen med sum af klorerede ethener op til ca. 80 000 µg/l ligger ved KB10-2 og KB139-2 mellem kote 2 og 3 m. Fordeling af forureningen er meget uhomogen. Forureningsfanen er ikke endeligt afgrænset horisontalt i KB-transektet. Vertikalt er forureningen i KB-transektet afgrænset af et ler/morænelerlag fra ca. koten -2 m.



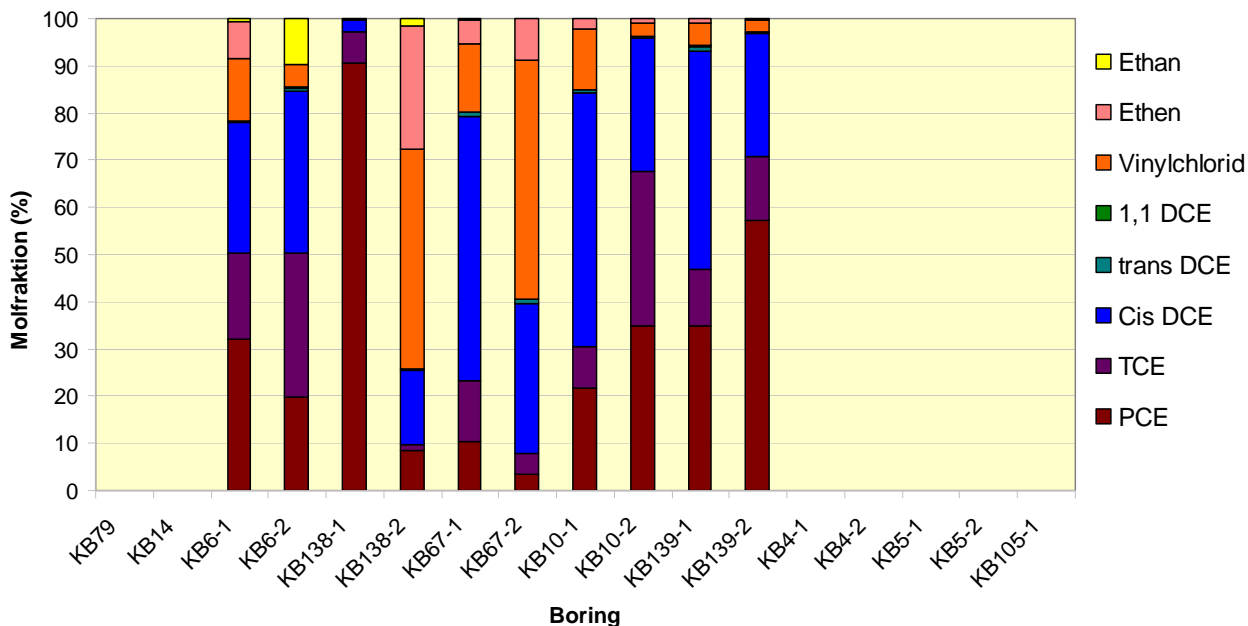
Figur 9 – Forureningsudbredelse og geologien i KB-transektet øst for gadekæret, juli 2008.



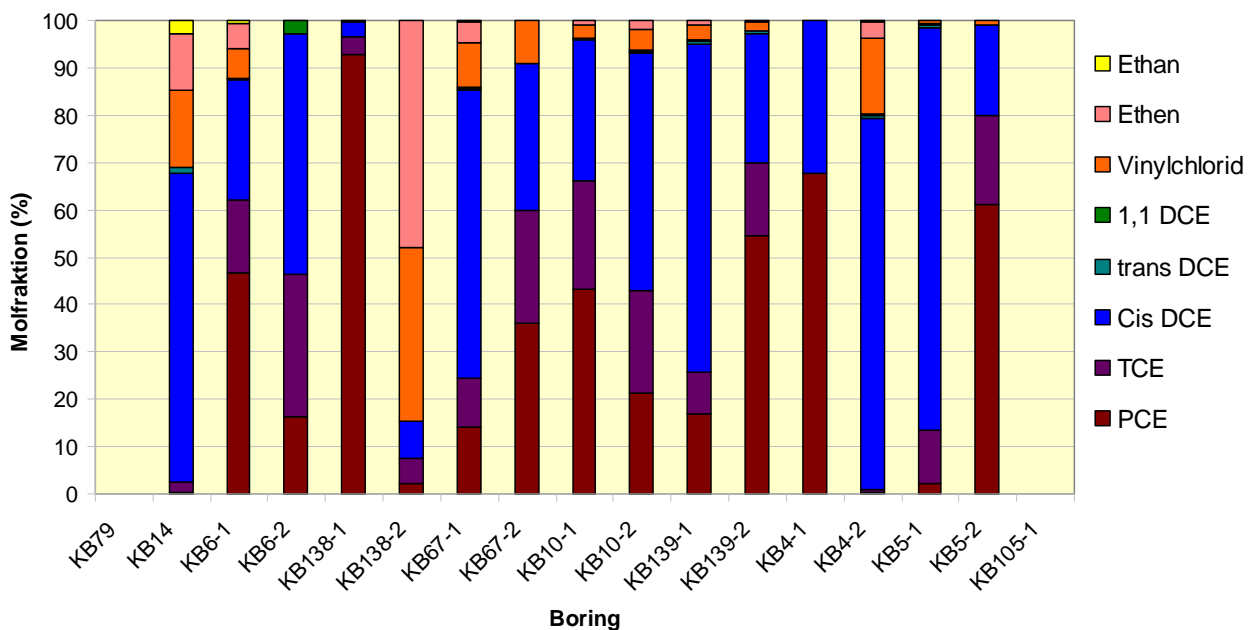
Figur 10 – Forureningsudbredelse og geologien i KB-transektet øst for gadekæret, august 2008.

Forureningssammensætning langs KB transektet er vist i figur 11 og figur 12. Forureningssammensætningen er en blanding af moderstoffer og nedbrydningsprodukter. PCE dominerer i de mest forurenede borer. Cis-DCE udgør 37 % af forureningen i gennemsnit af molfraktioner. PCE og TCE udgør hhv. 32 % og 13 % af forureningen. Vinylklorid blev også fundet langs KB-transektet, med gennemsnitlige molfraktioner af 15 % og 7 % i hhv. juli og august.

Der er ikke en sammenhæng mellem redox forhold og forureningssammensætning i KB-transektet. Kun for KB14 og KB138-2 gælder det, at der under de mest reducerende forhold blev fundet flest nedbrydningsprodukter.



Figur 11 – Forureningssammensætning i vandprøverne udtaget i juli 2008 i KB-transektet øst for gadekæret.



Figur 12 – Forureningssammensætning i vandprøverne udtaget i august 2008 i KB-transektet øst for gadekæret.

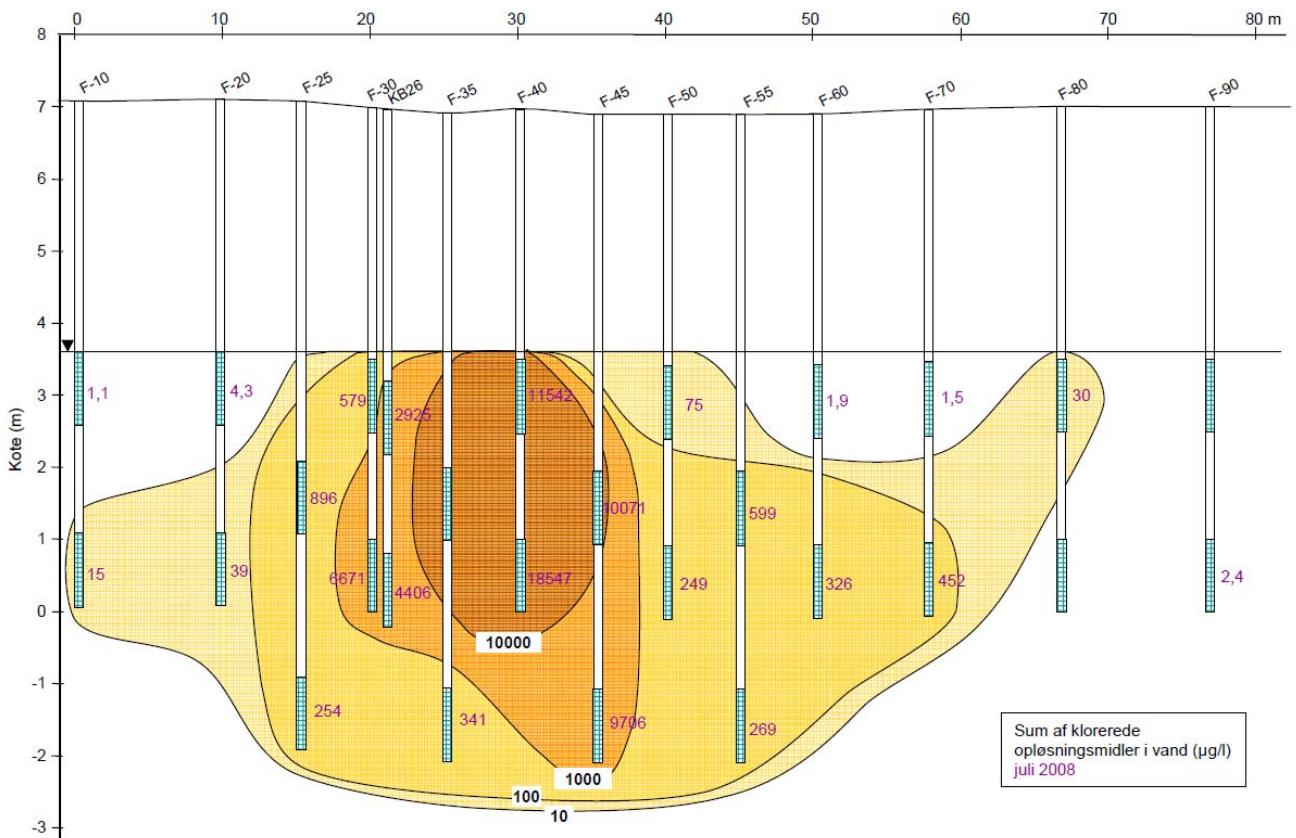
3.3.2. F-transekt

Udbredelsen af forureningen på tværs af strømningens retning 80 m nedstrøms kilden fremgår af figur 13 og figur 14. Midten af fanen med sum af klorerede opløsningsmidler mellem 10 000 µg/l

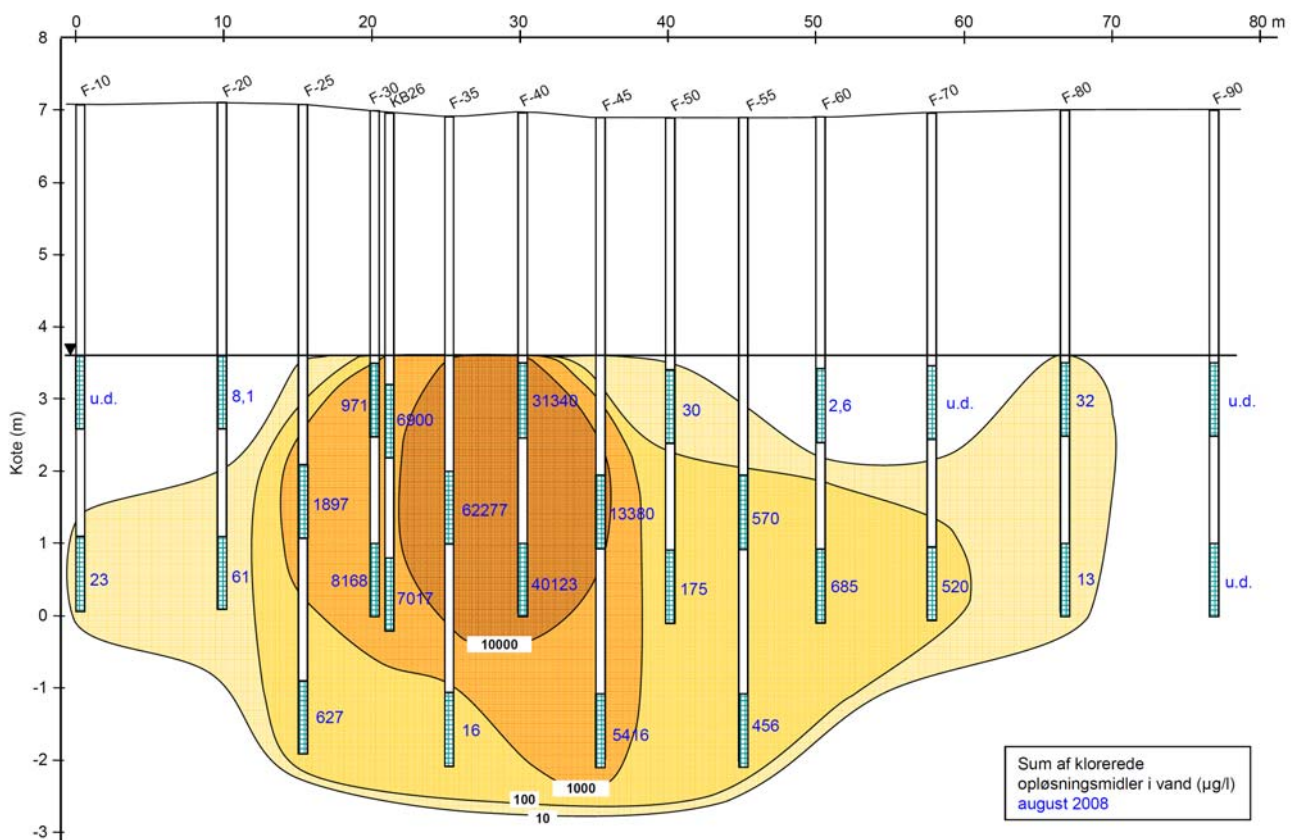
og ca. 60 000 µg/l ligger ved F35-2, F40-1 og -2 og F45-2 ned til omtrent 4 m under vandspejlet. Forureningsfanen er tydeligt afgrænset horisontalt, med sum af klorerede opløsningsmidler under 5 µg/l ved F10-2 og F90-1 og -2. Forureningsfanen er ikke endeligt afgrænset vertikalt men der antages ud fra PID analyser i F-boringer og Geoprobe analyser i T5m-transektet, at F-boringerne dækker langt den største del af forureningsfanen.

Forureningssammensætning langs F-transektet er vist i figur 15 og figur 16. PCE og TCE udgør i gennemsnit hhv. 19 % og 20 % af forureningen på molbasis. Cis-DCE er tydeligvis det dominerende stof og udgør i gennemsnit 55 % af forureningen på molbasis. Ethen udgør mindre end 5 % af forureningen i alle F-transekts boringer. Det samme gælder for vinylklorid bortset fra boringen F55-1.

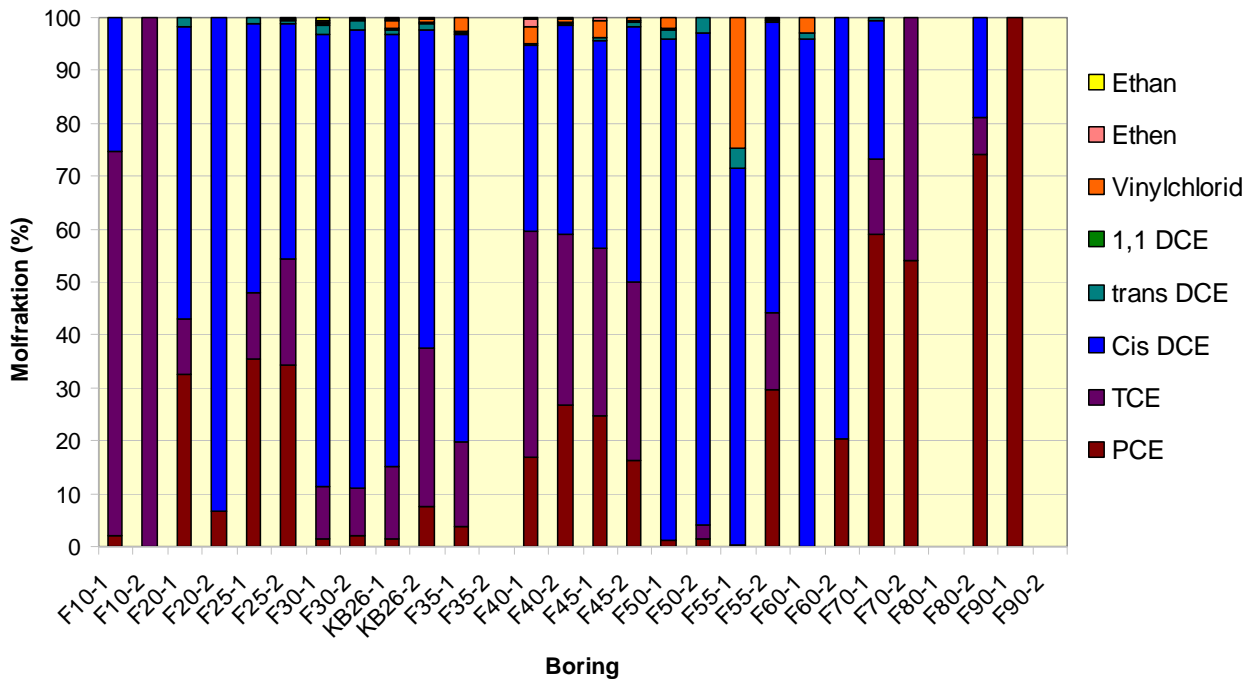
Der er ikke en sammenhæng mellem redox forhold og forureningssammensætning i F-transektet. Kun for F30-1 gælder det, at der under de mest reducerende forhold blev fundet flest nedbrydningsprodukter.



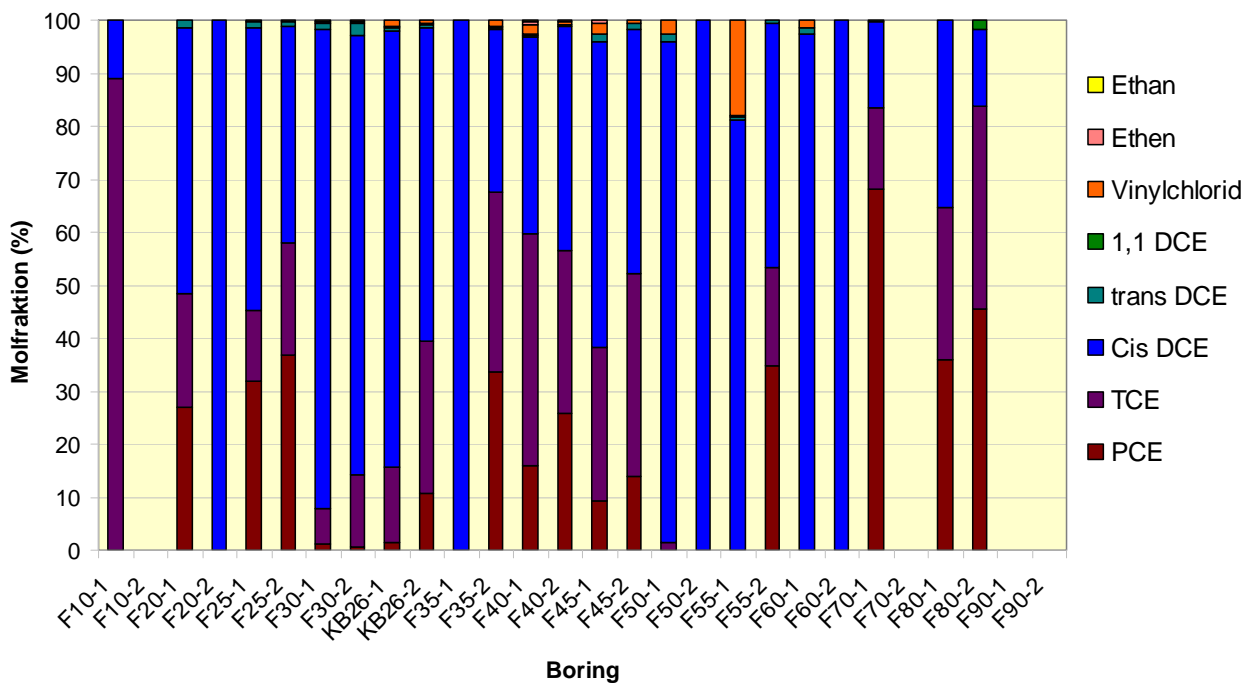
Figur 13 – Forureningsudbredelse i F-transektet 80 m nedstrøms kilden, juli 2008.



Figur 14 – Forureningsudbredelse i F-transektet 80 m nedstrøms kilden, august 2008. u.d.: under detektionsgrænse



Figur 15 – Forureningssammensætning i vandprøverne udtaget i juli 2008 i F-transektet 80 m nedstrøms kilden.



Figur 16 – Forureningssammensætning i vandprøverne udtaget i august 2008 i F-transektet 80 m nedstrøms kilden.

3.4. Forureningsflux

3.4.1. Beregnet forureningsflux

Forureningsfluxen blev estimeret som sum af koncentrationer af klorerede ethener, inklusiv ethen og ethan, i µg/l. Der blev brugt juli og august data fra F-transektet samt data fra et transekt benævnt T5m. T5m transektet refererer til geoprobe sonderinger med niveauspecifik vandprøvetagning fra midlertidige filtre udført af NIRAS i oktober 2007 (Region Hovedstaden 2008a). T5m-transektets placering (på tværs af strømningsretningen i 5 meters afstand til boringen KB26) svarer omtrent til samme placering som F-transektet (figur 3).

Forureningsfluxen igennem F-transektet blev estimeret til ca. 18 kg/år i august 2008 (tabel 4). Fluxen i juli 2008 blev estimeret til 6,9 kg/år, hvor boringen F35-2, der svarer til det mest forurenede område, ikke blev prøvetaget (boringen var formodentligt tør). På baggrund af Geoprobe sonderingerne, blev forureningsfluxen i T5m-transektet estimeret til 5,7 kg/år, som svarer omtrent til juli fluxen i F-transektet. Input data til programmet Mass Flux Toolkit fremgår af bilag E.

Den højeste sum af klorerede stoffer fundet i F-transektet var 62 mg/l. Guilbeault et al (2005) rapporteret maksimalkoncentrationer af PCE eller TCE af samme størrelsesorden (tabel 5). Disse koncentrationer svarer til forureningsfluxe af samme størrelsesorden som i Skuldelev i august 2008.

Tabel 4 – Forureningsflux i F-transektet og T5m-transektet som sum af klorerede etheners koncentrationer i µg/l. Estimeret ved brug af programmet Mass Flux Toolkit på baggrund af data i figur 13, figur 14 og fra Region Hovedstaden 2008a samt hydrauliske ledningsevnen $5 \cdot 10^{-5}$ m/s og hydrauliske gradienten $5 \cdot 10^{-3}$.

	Forureningsflux (kg/år)	
	Min. – Maks.	Gennemsnit
T5m – oktober 2007	---	5,7
F – juli 2008	6,3 – 7,5	6,9
F – august 2008 uden F35-2	11,1 – 14,4	12,8
F – august 2008	17,0 – 18,9	18,0

Tabel 5 – Forureningsfluxparametre i F-transektet sammenlignede med litteraturen.

Lokaliteten	Forureningsflux (kg/år)	Stof	Højeste koncentration (mg/l)	Antal filtre / gennemsnitligt celleareal	Kilde
Skuldelev (F), Danmark	18	PCE, TCE, cis-DCE	62	28 / 12,1 m ²	---
Rundforbivej, Danmark	1,2	TCE	> 0,1	28 / --	Tuxen et al. 2006
Rødekro, Danmark	84	PCE	--	--	Denager 2008
Rødekro, Danmark *	3,7	PCE	0,5-1,0	21 / --	Denager 2008
Ontario, Canada	21	PCE	38	322 / 0,5 m ²	Guilbeault et al 2005
New Hampshire, USA	15	PCE	148	257 / 1,8 m ²	Guilbeault et al 2005
Florida, USA	31	TCE	180	146 / 6,1 m ²	Guilbeault et al 2005

* 250 dage efter damprensning

3.4.2. Usikkerheder ved forureningsflux

Faktorer som heterogen geologi og komplekse forureningsfordelinger bidrager til usikkerheder ved kvantificering af forureningsfluxe. Ifølge Tuxen et al., 2006, forårsages de største usikkerheder af 3 faktorer:

- Afgrænsning af fane (placering og antal boringer / filtre)
- Tidsmæssige koncentrationsvariationer
- Variationer i hydraulisk ledningsevne

3.4.2.1. Afgrænsning af fane

Afgrænsning af fanen og kvaliteten af fluxbestemmelsen afhænger af placering og antal af boringer / filtre. Den højeste koncentration af klorede stoffer blev fundet i F35-2 i august 2008 og derfor, med en gennemsnitlige ledningsevne for hele magasinet, har F35-2 det højeste bidrag til den samlede forureningsflux. Hvis F35-2 udelades bliver massefluxen undervurderet med 29 %.

Forureningsfanen er ikke endeligt afgrænset vertikalt ved bunden af F40 og toppen af F35. Der antages at F35-2 svarer til den højeste koncentration i transektet. Men det er muligt at der findes områder som er mere forurenede men ikke dækket med de eksisterende boringer, hvilket betyder at den estimeret forureningsflux muligvis ikke repræsenterer den totale forureningsmasse fra kildeområdet.

Programmet Mass Flux Toolkit antager at forureningsfanens grænser er kendte og at cellenettet er tæt nok til at karakterisere strukturen af forureningsfanen. Dette betyder, at der til hver monitoringspunkt skal sættes en afgrænsende værdi i forureningsfanens top og bund celler, så programmet kan interpolere data mellem dem. Derfor var det nødvendigt at sætte fiktive monitoringspunkter.

Fanens bundgrænse blev estimeret som bunden af filtre i F25, F35, F45 og F55, dvs., ca. kote -2 m. Nul koncentrationsværdier blev derfor tildelt bundceller ved F30, F40 og F50. Koncentrationsværdier i fanens top ved F25, F35, F45 og F55 (lige under vandspejlet) skønnes mellem koncentrationer i de to nabofiltre. Både den laveste og den højeste af disse to koncentrationer, benævnt hhv. min. og maks., blev tildelt top celler ved F25, F35, F45 og F55. Den estimerede flux er gennemsnitten af min. og maks. fluxe.

3.4.2.2. Variationer i koncentration og ledningsevne

De estimerede juli og august forureningsfluxe har samme størrelsesorden. Der blev ikke taget grundvandsprøver af F35-2 i juli og samtidigt har denne boring det højeste bidrag til august fluxen. Derfor, for at sammenligne juli med august fluxen, er det nødvendigt at fjerne F35-2 fra august data. August fluxen uden F35-2 er 1,8 gange højere end juli fluxen, hvilket afspejler direkte at august koncentrationer er ca. 2 gange højere end juli koncentrationer.

Bestemmelse af den hydrauliske ledningsevne er afgørende da den indgår lineært i fluxberegningen og grundvandsmagasins hydrauliske ledningsevne kan variere flere størrelsesordener. Den gennemsnitlige hydrauliske ledningsevne blev på baggrund af resultater af pumpetestene udført af NIRAS ved boringer KB7 og KB22-1 (hhv. $7 \cdot 10^{-5}$ og $3 \cdot 10^{-5}$ m/s) vurderet til $5 \cdot 10^{-5}$ m/s.

3.4.2.3. Interpolationsmetode og netforfining

Der er benyttet lineær interpolation i beregningerne i denne rapport. Interpoleringsfejlen, som er forskellen i resultater mellem de 3 interpoleringsmetoder, er under 20 % og 25 % for hhv. maks. og min. flux. Derfor er valg af interpolationsmetode ikke kritisk for estimering af forureningsflux i forhold til de øvrige usikkerheder. Cellenettet blev forfinet med 6 x 1 (rækker x kolonner), som svarer til 60 rækker x 16 kolonner. På denne måde er hver celle kun 0,1 m høj, som er den korteste kote forskel mellem filtrene. Selv om interpoleringsfejlen nedsættes med en forfining i rækker, var fluxen beregnet uden forfining kun 6 % lavere end den beregnet med 6 x 1 forfining.

4. Konklusion

Et nyt transekt (F) ca. 80 m nedstrøms kildeområdet er blevet etableret. For at belyse forholdene inden oprensning blev et baseline datasæt etableret i KB-transektet umiddelbart øst for gadekæret og i F-transektet.

Redoxforholdene blev vurderet som nitratreducerende til methanogene i det meste af KB-transektet og nitratreducerende til jernreducerende i det meste af F-transektet. I F-transektet svarer de mest reducerende forhold til midten af forureningsfanen.

Udbredelse af forureningen i KB-transektet er meget uhomogen. Sum af klorerede ethener op til ca. 80 mg/l blev fundet i den mest forurenede boring i KB-transektet (KB10-2). Centrum af fanen i F-transektet ligger tydeligt ved F35-2, F40-1 og -2 og F45-2 med sum af klorerede ethener mellem 10 og 60 mg/l. Forureningsfanen er i begge transekter afgrænset vertikalt og i F-transektet også horisontalt.

Forurenings sammensætningen i begge transekter er en blanding af moderstoffer og nedbrydningsprodukter. PCE dominerer i KB-transektet, mens cis-DCE tydeligt dominerer i F-transektet. For KB14, KB138-2 og F30-1 gælder det, at der under de mest reducerende forhold blev fundet flest nedbrydningsprodukter. Der er derudover ikke sammenhæng mellem redox forhold og forurenings sammensætning i KB-transektet eller F-transektet.

Forureningsfluxen gennem F-transektet blev vha. niveau-specifik prøvetagning estimeret til ca. 18 kg/år i august 2008. Fluxen blev beregnet for summen af klorerede ethener i µg/l og er baseret på gennemsnitlige strømningshastighed og hydraulisk gradient. Brug af en gennemsnitlig hydraulisk ledningsevne udgør en stor usikkerhed ved fluxberegningen. Den estimerede forureningsflux repræsenterer muligvis ikke den totale forureningsmasse fra kildeområdet, da der kan være forurenede områder, som ikke er dækket med de eksisterende boringer.

5. Forslag til aktiviteter til 2009

- Monitoring i udvalgte boringer i KB-transekt og F-transekt hver 3. måned mhp. vurdering af den tidlige udvikling i:
 - koncentrationer af klorerede ethener og forureningsfluxen;
 - redox forhold og nedbrydning af klorerede ethener;

- hydraulisk gradient (KB25, KB3 og KB127 samt F-transektet).
- Karakterisering af sekundært magasin
 - Stedsspecifikke strømningshastigheder ved enten slug eller pumpe test samt ved sigteanalyser på opboret materiale.
 - Sammenhæng mellem grundvandsspejldata og den tidlige udvikling i koncentrationer og forureningsfluxen.
 - Sorptionens betydning ved analyse af jordprøver for indhold af organisk kulstof.
- Detaljeret vertikal fordeling af forureningen i F-transektet ved etablering af 2-3 multi-level samplers i kernen af forureningsfanen ved F40/F45.
- Sammenhæng mellem observationer af den tidlige udvikling i forureningsfluxen og massejernelse på kilden.
- Numerisk modellering af sammenhæng mellem kildeoprensning og forureningsflux.

6. Kilder

Bjerg,P.L., Hansen,M.H., Christiansen,C., Scheutz,C. & Broholm,M.M. (2006): Anaerob deklorering og oprensning af lavpermeable aflejringer. Institut for Miljø & Ressourcer, Danmarks Tekniske Universitet & Københavns Amt, Kgs. Lyngby, 2006.
<http://www.er.dtu.dk/publications/fulltext/2006/MR2006-275.pdf>

Christensen,T.H., Bjerg,P.L., Banwart,S.A., Jakobsen,R., Heron,G., Albrechtsen,H.-J. (2000): Characterization of redox conditions in groundwater contaminant plumes. *Journal of Contaminant Hydrology* 45, 165-241.

Denager,T. (2008): Stimulering af reduktiv deklorering i grundvand efter termisk oprensning. Bachelorprojekt, DTU Miljø, Danmarks Tekniske Universitet.

DTU Miljø, Analysevejledning til Ion Cromatograf Dionex DX-120

DTU Miljø, Analysevejledning til Flame Atomic Absorption Perkin Elmer – Analyst 200

DTU Miljø, Analysevejledning til GCMS 3 Agilent

Farhat,S.K., Newell,C.J., Nichols,Eric M. (2006): Mass Flux Toolkit User's Manual.
<http://www.gsi-net.com/Software/massfluxtoolkit.asp>

Frederiksborg Amt (2005): Vestergade 5, Skuldelev. Supplerende undersøgelser. April 2005. NIRAS A/S. (s. 17-21)

Guilbeault,M.A., Parker,B.L., Cherry,J.A. (2005): Mass and Flux Distributions from DNAPL Zones in Sandy Aquifers. *Ground water* 43 (1), 70-86.

Jørgensen,T.H., Nissen,L., Nielsen,L., Petersen,P.A., Hansen,M.H., Scheutz,C., Jakobsen,R.,

Bjerg,P.L., Larsen,T.H., Durant,N.D., Cox,E. & Rasmussen,P. (2007): Pilotprojekt med stimuleret in situ reduktiv deklorering - Hovedrapport. Miljøstyrelsen, København. Miljøprojekt, 1148.

Region Hovedstaden, Koncern Miljø (2008a): Vestergade 5, Skuldelev. Afgrænsning af forureningsfanen og risikovurdering. Januar 2008. NIRAS A/S.

Region Hovedstaden, Koncern Miljø (2008b): Vestergade 5, Skuldelev. Supplerende undersøgelser. September 2008. NIRAS A/S.

Tuxen,N., Troldborg,M., Binning,P.J., Kjeldsen,P. & Bjerg,P.L. (2006): Risikovurdering af punktkilder. Institut for Miljø & Ressourcer, Danmarks Tekniske Universitet & Københavns Amt, Kgs. Lyngby. <http://www.er.dtu.dk/publications/fulltext/2006/MR2006-219.pdf>

Bilag

- A – Procedure for prøvetagning og analyse af vandprøver på DTU Miljø
- B – Feltmålinger og redox parametre i vandprøver udtaget i juni, juli og august 2008.
- C – Koncentrationer af PCE og nedbrydningsprodukter i vandprøver udtaget i juni, juli og august 2008
- D – Forureningsudbredelse og -sammensætning for KB-transektet i juni 2008
- E – Mass Flux Toolkit procedure

Groundwater sampling

This note describes sampling of groundwater for analysis of field parameters, inorganic compounds and chlorinated hydrocarbons. An overview of appropriate sampling containers, filtration, preservation and analytical methods are provided in Appendix 1. All samples for laboratory analysis are stored in an ice chest during the day.

Before sampling

The purpose of the sampling, configuration of the well and compounds to be analyzed should be considered before sampling. Based on the following information an appropriate pump should be selected:

- Accessibility
- Construction of well
- Expected water table level
- Expected yield
- Purging volume
- Tubes: diameter, length, materials etc.
- Sample containers

Sampling

All relevant information for interpretation of the results is noted on groundwater sampling record. The following list should be considered during sampling:

- Identification
 - Borehole, samples, time, date.
- Purging
 - Measure water level to top of pipe before start of pumping
 - Place tubing or pump 1 m below water table
 - Monitor flow: use bucket/watch or flow meter
 - 3 borehole volumes should be removed if possible
 - Measure pH, EC, oxygen, redox, temperature, in line if possible
- Sampling conditions
 - Move tubing or pump to a depth just above screen
 - Field parameters are constant and sample color clear, if possible
 - Lower flow
 - Note field parameter values on groundwater sampling record

Field electrode parameters

pH, oxygen, electrical conductivity and temperature

These analyses are all field electrode measurements. They should be performed in an airtight flow cell if the MP1 pump is used (submersible centrifugal pump). The parameters should be measured with time, until stable values are obtained. For samples taken by other pumps, samples should be analyzed in the small flow cell, or alternatively they may be measured immediately after sampling in a glass sample container at the field laboratory.

Sampling of groundwater for analyses of chlorinated hydrocarbons

- Samples must only come in contact with non-sorbing materials (e.g. glass or steel).
- Sample names should be written on the cap of the 40 ml glass vials.
- Samples are taken directly from an unbroken water jet into the vials ensuring little or no headspace. Samples are preserved by immediately adding 4 drops of 4 M sulfuric acid.
- Samples are stored upside down at 4 °C until analyses in the lab using GC/MS.

Sampling of inorganic and redox sensitive compounds in groundwater

Alkalinity

Samples for alkalinity should be filtrated before the analysis as particles may affect the acid consumption of the sample. The alkalinity should be measured in the field within 2 hours by Gran titration (Stumm and Morgan, 1981). Groundwater having a high buffer capacity can alternatively be analyzed using a standard titration and an indicator – this method is quicker but less precise. The determination of alkalinity can be affected by presence of volatile fatty acids (Christensen et al., 2001).

Chloride, Bromide, Nitrate, Nitrite and Sulfate

Chloride and bromide are conservative compounds. Nitrate, Nitrite and Sulfate are redox sensitive. However, samples should **not** be preserved by addition of acid. Samples should be filtrated (0.45 µm) to remove particles and stored in a 5 ml PE container filled up to $\frac{3}{4}$. Samples should be frozen for extended storage until analysis in the lab using ion chromatography.

Iron and Manganese (dissolved)

Iron and manganese are redox sensitive. Samples for total iron and total manganese should be filtrated in order to remove particles, stored in 20 ml PE containers and preserved by addition of 4 drops of 4 M HNO₃ (pH<2) (IT'S VERY IMPORTANT TO FILTRATE **BEFORE** ADDITION OF ACID!!!¹). Samples are stored at 4 °C until analyses in the lab by means of flame atomic absorption spectrophotometry (Bjerg and Christensen, 1993), which measures total iron and total manganese (which probably correspond to Fe(II) and Mn(II) respectively).

Sulfide

Sulfide is redox sensitive and very volatile and special precautions are necessary during sampling. After lowering the flow, a syringe is filled by water from an unbroken stream. Flush 3 times with sample. Samples should not be filtrated. At the field laboratory the syringe is emptied directly into a reagent glass for immediate test kit analysis.

¹ Dissolved Fe and Mn mainly present as Fe(II) and Mn(II) respectively at pH 5-8 (Christensen et al., 2000).

Ammonium

Ammonium is redox sensitive, and the samples should be filtrated to remove particles. Nitrification under aerobic conditions can happen, so the analysis by test kit should be performed the same day as sampled in the field.

Dissolved organic carbon

Samples for dissolved organic carbon should be filtrated in order to remove particles, stored in 20 ml PE containers and preserved by addition of 2 drops of 4 M HNO₃. Samples are stored at 4 °C until analyses in the lab by means of a total organic carbon analyzer.

Methane analysis in groundwater

Goal

Determine the content of methane in water samples using gas chromatography (GC). The method is used in the concentration area 2,2-22,3 mg CH₄/l.

Principle

Methane is a gas with low solubility in water. The methane in the sample is therefore easily lost to the atmosphere. The low solubility is utilized in the analysis, where a water sample of known volume is shaken in a closed glass container with a known volume, by means of which almost all methane is transferred to the head space. Standards are made with the same water to head space ratio. From the head space of the glass container a gas sample is taken and injected into a gas chromatograph.

The gas sample is led through a column, which separates the various components of the sample, to a flame-ionization-detector (FID), which detects the various components of the sample. A computer records the signal from the detector in terms of a chromatogram and quantifies the area of each peak that represents a component in the sample.

Analysis

The samples are analyzed on a Shimadzu GC.14A with a packed column with 80/120 Carbopack B/3% SP-1500. Samples are analyzed under the following conditions:

GC column:	packed column with 80/120 Carbopack B/3% SP-1500
Injection volume:	0.2 ml
Run time:	0.95 min
Temperature program:	100°C
Splittless injection	
Primary gas pressure:	1.5 kg/cm ²
Carrier gas pressure:	1.25 kg/cm ²
Hydrogen pressure:	0.5 kg/cm ²
Air pressure:	0.5 kg/cm ²
Range:	2 (adjust depending on concentration level in samples)
Data treatment:	GC Solution

Sampling procedure

- After lowering the flow, a 5 ml plastic syringe without needle is filled with water from an unbroken stream. The sample can also be taken in a closed system with the syringe directly mounted. The syringe is filled slowly to avoid that 'false air' enters at the piston and to avoid a vacuum in the syringe whereby methane would be transferred to the gas phase. To avoid air in the syringe it might be flushed with the sample.
- Supply the syringe with a needle. Adjust the volume to 3.00 ml and make sure there is no air in the syringe. Transfer the sample to a 6 ml evacuated glass vial equipped with a screw lid containing a membrane and previously prepared with 2-3 drops of concentrated (72%) sulfuric acid.
- Shake the vial and store it upside down at 4 °C until analyses in the lab by GC.

References

- Bjerg, P. L. and Christensen, T. H., 1993. A Field Experiment on Cation Exchange-Affected Multi-component Solute Transport in a Sandy Aquifer. *Journal of Contaminant Hydrology*, 12, 4, 269-290.
- Christensen, T. H., Bjerg, P. L., Banwart, S. A., Jakobsen, R., Heron, G., Albrechtsen, and H.-J., 2000. Characterization of redox conditions in groundwater contaminant plumes. *Journal of Contaminant Hydrology*, 45, 165-241.
- Christensen, T. H., Kjeldsen, P., Bjerg, P. L., Jensen, D. L., Christensen, J. B., Baun, A., Albrechtsen, H.-J., and Heron, G., 2001. Biogeochemistry of landfill leachate plumes. *Applied Microbiology and Biotechnology*, 16, 659-718.
- Stumm, W. and Morgan, J. J., 1981. *Aquatic Chemistry*. John Wiley & Sons, New York

Appendix 1: Sampling and analysis of inorganic and chlorinated compounds.

Flow cell parameters

Compound	Container	Filtration	Preservation	Analytical method
pH	Flow cell	No	None	Field electrode
Conductivity	Flow cell	No	None	Field electrode
Temperature	Flow cell	No	None	Field electrode
Oxygen	Flow cell	No	None	Field electrode

Field laboratory

Compound	Container	Filtration	Preservation	Analytical method	Durability/ Analyse
pH	Polyethylene PE	No	None	Field electrode	Within few hours
Conductivity	PE	No	None	Field electrode	Within 24 hours
Temperature	PE	No	None	Field electrode	Immediately
Oxygen	PE or flask. Without head-space	No	None	Field electrode	Immediately
Alkalinity TAL	PE or flask. Without head-space	No	None	Titration	Within few hours
Ferrous iron Fe ⁺⁺	PE or flask. Without head-space	Yes, if necessary	None	Test kit Spectrometric	Within few hours
Sulfide HS ⁻	Sampling in a syringe.	No	None	Test kit Spectrometric	Immediately
Ammonia NH ₄	PE	Yes, if necessary	None	Test kit Spectrometric	Within few hours

Analysis for the DTU Environment laboratory

Compound	Container	Filtration	Preservation	Analytical method
Chloride Cl ⁻	PE 5 ml vial	Yes, if necessary	Frozen	Ion chromatography
Nitrate NO ₃	PE 5 ml vial	Yes if necessary	Frozen	Ion chromatography
Nitrite NO ₂	PE 5 ml vial	Yes, if necessary	Frozen	Ion chromatography
Sulfate SO ₄	PE 5 ml vial	Yes, if necessary	Frozen	Ion chromatography
Total iron Filtration=>Fe(II)	PE 20 ml vial	Yes, always. Immediately 0.45 µm filter	4 drops of 4 M HNO ₃	Atomic absorption AAS
Total Manganese Filtration=>Mn(II)	PE 20 ml vial	Yes, always. Immediately 0.45 µm filter	4 drops of 4 M HNO ₃	Atomic absorption AAS
Methane	Syringe and 6 ml evacuated glass vial	No	Previously to sampling (in the lab) with conc. H ₂ SO ₄	Gas chromatography
Chlorinated solvents	Glass 40 ml vials	No	4 drops of 4 M H ₂ SO ₄	GC/MS
DOC	PE 20 ml vial	Yes, always. Immediately 0.45 µm filter	2 drops of 4 M HNO ₃	Total Organic Carbon Analyzer TOC

Bilag B

Feltmålinger og redox parametre i vandprøver udtaget i juni, juli og august 2008 i KB transektet.

Boring	Dato	Lednings- evne µS/cm	Temp. °C	pH	Opløst ilt mg/l	Nitrat mg/l	Opløst mangan mg/l	Opløst jern mg/l	Sulfat mg/l	Sulfid mg/l	Methan mg/l	Klorid mg/l
KB14	03-06-2008	696	9,6	6,84	0,07	<0,66	-	-	56,92	0,09		35
	28-08-2008	718	11,5	6,82	0,10	1,06	0,339	2,213	48,56	0,09	0,5	33,06
KB6-1	03-06-2008	593	9,6	6,96	0,05	<0,66	-	-	44,94	0,02		64
	15-07-2008	624	14	6,95	0,45	<0,66	1	4,4	41,94			65
	28-08-2008	612	11,1	6,96	0,12	<0,66	0,896	3,041	47,06	0,02	2,1	65,81
KB6-2	03-06-2008	722	10,3	6,74	1,9-2,3	<0,66	-	-	21,87	ub		59
	15-07-2008	610	13,1	6,7	0,48	<0,66	1,1	13	22,47			65
	28-08-2008	820	13,6	6,63	0,58 ca.	1,24	0,800	0,723	165,46	-0,02	0,0	23,46
KB138-1	15-07-2008	474	11,6	7,12	0,14	<0,66	0,6	0,9	35,95	0,01		52
	28-08-2008	464	10,9	7,11	0,08	<0,66	0,601	1,094	37,06	<=0,10	0,2	50,30
KB138-2	15-07-2008	739	13,1	6,91	1,7	<0,66	0,9	0,1	35,95	0,09		75
	28-08-2008	743	14,1	6,78	0,26	<0,66	1,061	1,091	49,10	0,09-0,19	1,8	62,20
KB67-1	03-06-2008	762	10	7,01	0,13	<0,66	-	-	59,92	0,02		101
	15-07-2008	780	11,4	6,93	0,2	<0,66	0,7	0,9	56,92			102
	28-08-2008	790	11,9	6,90	0,07	<0,66	0,700	0,789	56,41	0,02	3,9	98,64
KB67-2	03-06-2008	763	13,9	6,82	1,97	<0,66	-	-	53,93	-		82
	15-07-2008	791	16,2	6,77	4,08	<0,66	0,9	0,1	62,91			59
	28-08-2008	500 ca.	14,2	6,82	2,3 ê	7,13	0,117	0,041	104,35	-	0,0	54,00
KB10-1	03-06-2008	702	10,2	6,93	0	<0,66	-	-	59,92	0		86
	15-07-2008	682	11,8	6,91	0,06	<0,66	0,5	2,1	71,90			90
	28-08-2008	756	13,1	6,87	0,04	<0,66	0,740	2,316	75,29	0,01-0,10	0,7	103,87
KB10-2	03-06-2008	748	12	6,92	2,1	<0,66	-	-	53,93	0,02		105
	15-07-2008	690	14,2	6,86	0,65ê	<0,66	0,5	0,2	44,94			83
	28-08-2008	643	15,5	7,00	0,35	0,84	0,430	0,099	31,19	<=0,12	0,8	53,82
KB139-1	15-07-2008	645	10,7	6,93	0,04	<0,66	0,4	2,5	59,92	0,02		72
	28-08-2008	662	11,9	6,99	0,08	0,71	0,294	1,688	70,94	0,00	0,1	76,08
KB139-2	15-07-2008	570 - 630	13,7	6,97	6	2,61	0,3	0,2	83,88	0,08		119
	28-08-2008	903	14,6	7,00	3,70 ca.	0,89	0,502	0,339	90,00	-	0,9	116,61
KB4-1	03-06-2008	780	10,3	7,01	0,3	<0,66	-	-	77,89	0		91
	28-08-2008	1189	11,6	6,97	0,45	<0,66	0,244	1,728	145,60	<=0,10	0,1	284,17
KB4-2	03-06-2008	710	10,4	6,89	0,05	<0,66	-	-	86,88	0,05		88
	28-08-2008	760 ca.	13,9	6,82	0,06	1,51	0,910	0,316	61,26	0,05	1,1	87,72
KB5-1	28-08-2008	693	11,8	6,88	0,12	<0,66	0,144	0,912	78,40	<B	0,1	116,30
KB5-2	28-08-2008	750	16,6	6,93	2,7 ↓	1,37	0,059	0,060	52,70	-	0,6	86,21
KB105-1	03-06-2008	807	10,3	7,1	0,07	<0,66	-	-	128,82	-		95

Feltmålinger og redox parametre i vandprøver udtaget i juni, juli og august 2008 i F transektet.

Boring	Dato	Lednings- evne µS/cm	Temp. °C	pH	opløst ilt mg/l	nitrat mg/l	opløst mangan mg/l	opløst jern mg/l	sulfat mg/l	sulfid mg/l	metan mg/l	klorid mg/l
F10-1	14-07-2008	885	11,4	6,95	0,2	30,5	0,5	0,02	89,88	ub		112
	26-08-2008	1600	12,1	6,85	0,61	35,06	0,155	< QL	81,97	<=B	0,0	0,00
F10-2	14-07-2008	670	13,7	7,02	2,55	66	<0,1	0,01	47,93	ub		28
	26-08-2008	650	14,0	7,00	2,5	56,00	< QL	< QL	47,15	<=B	0,0	26,08
F20-1	14-07-2008	830-833	11	6,78	0,07	6,6	0,2	<0,01	95,87	0		63
	26-08-2008	850	12,2	6,90	0,10	6,86	0,178	< QL	86,73	0,00	0,0	75,93
F20-2	14-07-2008	968	12,5	6,93	0,68	37,2	<0,1	<0,01	59,92	<0,15		167
	26-08-2008	990	14,0	6,98	0,95	39,31	< QL	< QL	54,40	<0,15	0,0	174,85
F25-1	14-07-2008	855-860	10,9	7,09	0,6	2,04	0,3	0,06	119,83	ub		56
	26-08-2008	840	12,8	7,02	0,39	1,02	0,314	0,315	93,62	<B	0,0	60,34
F25-2	14-07-2008	750	11,4	7,03	0,27	2,39	0,3	<0,01	68,90	ub		56
	26-08-2008	866	13,1	6,95	0,21	5,18	0,626	< QL	68,31	<=B	0,0	100,84
F30-1	14-07-2008	440-460	11,6	6,86	0,31	0,62	1	0,1	68,90	ub		75
	26-08-2008	747	13,1	6,79	0,20	0,31	1,033	0,205	68,75	<=B	1,6	67,50
F30-2	14-07-2008	1080	13,5	6,93	0,5	8,4	0,4	0,44	65,91	0		132
	26-08-2008	1138	15,2	6,91	0,56 ca.	7,08	0,468	0,218	45,57	0,00	0,2	170,89
KB26-1	03-06-2008	728	10,4	6,04	0,06	<0,66	-	-	65,91			62
	15-07-2008	707	11,4	6,78	0,04	<0,66	1,2	4,64	68,90	ub		64
	26-08-2008	743	12,5	6,81	0,19	0,75	1,197	3,24	70,25	<=B	1,6	65,77
KB26 -2	03-06-2008	738	10,7	6,88	0,02	5,3	-	-	68,90			99
	15-07-2008	804	12,8	6,84	0,2	7,1	0,5	0,81	68,90	ub		105
	26-08-2008	919	14,2	6,79	0,14	7,66	0,573	0,598	73,25	<=B	0,3	144,37
F35-1	15-07-2008	1000	11,4	7,02	0,59	<0,66	0,5	9,26	311,57	<0,20		84
	27-08-2008	1160	13,7	7,03	0,87	0,80	0,460	8,32	264,56	<0,20	0,2	85,32
F35-2	26-08-2008	752	12,6	6,95	0,12	0,71	0,827	0,384	60,40	<=B	3,6	102,85
F40-1	14-07-2008	783	11,5	6,99	0,13	<0,66	1	6,46	77,89	-		101
	26-08-2008	1432	11,6	6,95	0,08	0,80	0,868	2,096	55,39	-	2,1	74,65
F40-2	14-07-2008	720-790	12,1	6,98	0,7	4,03	0,6	2,44	74,90	0		141
	26-08-2008	1200 ca.	13,2	6,95	0,28	1,15	0,665	3,118	77,08	0,00	0,9	98,17
F45-1	14-07-2008	853	10,4	6,95	0,13	<0,66	0,5	2,33	110,85	ub		157
	26-08-2008	737	11,0	7,00	0,11	1,02	0,390	1,226	96,02	<=B	0,7	106,12
F45-2	14-07-2008	890	11,5	6,97	0,28	<0,66	0,4	1,54	86,88	ub		137
	26-08-2008	890	12,5	6,95	0,27	2,92	0,403	1,288	93,41	<=B	0,2	139,01
F50-1	14-07-2008	1181	11,3	6,88	0,16	11,1	1	1,41	119,83	ub		232
	26-08-2008	1290	11,8	6,94	0,08	6,73	0,763	0,160	120,19	<B	0,1	308,92
F50-2	15-07-2008	750-850	12,9	6,99	7,25	1,59	0,9	<0,01	119,83	<0,15		299
	27-08-2008	1448	15,7	6,98	8,93	2,61	0,830	< QL	115,40	<0,15	0,3	346,14
F55-1	15-07-2008	750-770	11	7,2	5,73	0,71	0,3	0,09	107,85	<0,30		82
	27-08-2008	794	12,5	7,10	2,30	0,97	0,281	0,063	108,69	<0,30	0,2	80,59
F55-2	14-07-2008	650	12,3	6,92	0,22	33,6	0,3	<0,01	53,93	ub		53
	26-08-2008	653	13,1	6,93	0,11	41,48	0,354	0,045	56,95	<=B	0,0	51,07
F60-1	14-07-2008	707	11,5	6,79	0,13	<0,66	0,9	1,22	38,95	0,05		52
	27-08-2008	705	13,3	6,81	2,10	0,664	0,948	1,740	47,00	0,05	0,4	54,07
F60-2	14-07-2008	1200-1300	13,5	7	3,9	92,963	0,1	0,23	65,91	0		267
	27-08-2008	1551	15,2	7,01	1,67	113,86	0,121	0,046	85,68	0,00	0,3	251,66
F70-1	14-07-2008	640	11,8	7	0,25	41,169	0,1	<0,01	71,90	ub		42
	27-08-2008	699	13,7	6,93	0,20↓	58,212	0,099	< QL	70,31	<=B	0,0	49,20
F70-2	14-07-2008	1290-1300	13,1	7,06	1	70,829	0,1	<0,01	68,90	0		130
	27-08-2008	1193	15,0	6,88	0,30		0,063	0,092		0,00	0,0	
F80-1	27-08-2008	1010	13,6	6,99	6,25	22,53	0,124	0,062	65,25	0,00	0,0	178,57
F80-2	14-07-2008	790-800	12,6	6,87	0,9	40,9	0,1	<0,01	56,92	ub		122
	27-08-2008	1050	14,8	6,91	0,98	25,39	0,144	< QL	60,31	<=B	0,0	182,84
F90-1	14-07-2008	785	11,4	6,86	0,1	66	0,1	<0,01	98,86	ub		70
	27-08-2008	760	12,6	6,91	0,17	54,69	< QL	< QL	108,33	<B	0,0	58,79

Bilag C

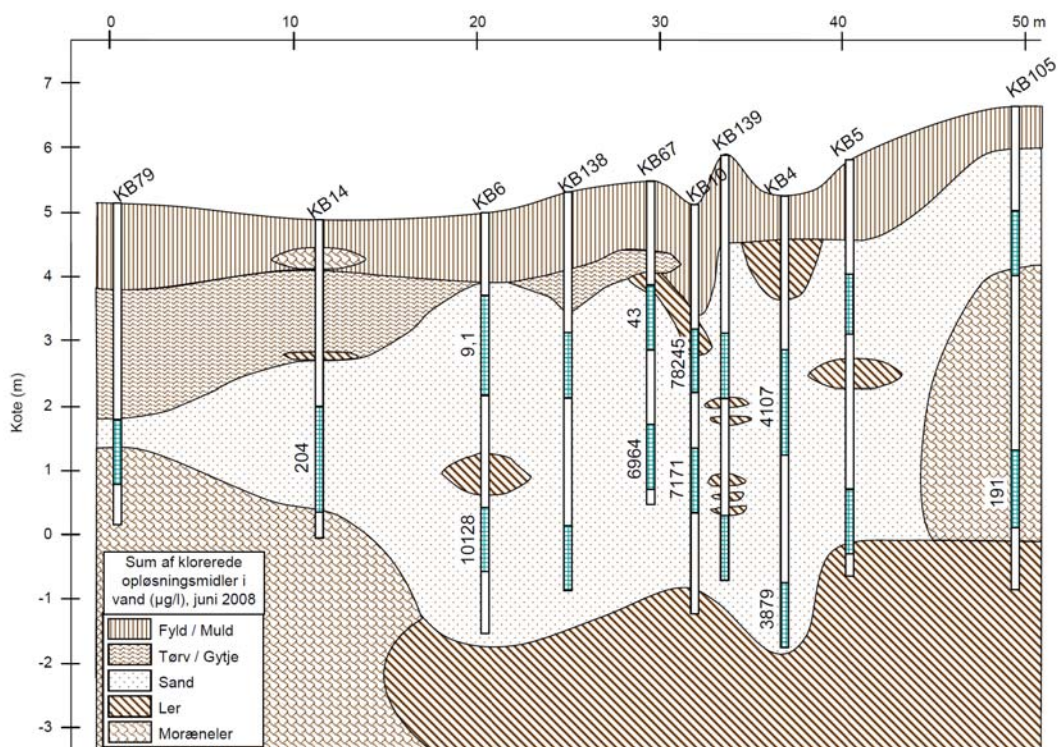
Koncentration af klorerede opløsningsmidler i vand, juli 2008. Rødt skrift: > linear range; Kursiv: resultat af 2x (KB10-2 10x) fortynding; Kontrol: TCE 695±105 µg/l, cis-DCE 605±90 µg/l.

Prøve	Koncentration (µg/l)								Sum	
	Ethen	1,1 DCE	trans DCE	cis DCE	Ethan	PCE	Vinylchlorid	TCE	Min.	Maks.
Kontrol	<0,9	<0,5	9,5	723,8	<2,6	<3,0	<1,0	636,0		
F10-1	<0,9	<0,5	<0,9	3,1	<2,6	0,4	<1,0	12,0	15	21
F10-2	<0,9	<0,5	<0,9	<2,5	<2,6	<3,0	<1,0	1,1	1,1	12
F20-1	<0,9	<0,5	0,6	16,9	<2,6	17,0	<1,0	4,4	39	44
F20-2	<0,9	<0,5	<0,9	3,8	<2,6	0,5	<1,0	<5,3	4,3	16
F25-1	<0,9	<0,5	2,1	99,7	<2,6	118,7	<1,0	33,6	254	259
F25-2	<0,9	1,2	4,0	303,2	<2,6	400,6	1,3	185,6	896	899
Kontrol	<0,9	<0,5	8,5	617,8	<2,6	<3,0	<1,0	577,6		
F30-1	7,4	15,7	112,3	5497,3	9,2	174,5	15,4	838,8	6671	6671
F30-2	<0,9	0,9	10,2	480,4	<2,6	18,2	1,5	67,6	579	582
KB26-1	3,4	8,4	35,8	3429,4	3,8	105,0	43,5	777,0	4406	4406
Kontrol	<0,9	<0,5	9,1	609,6	<2,6	<3,0	<1,0	509,0		
KB26-2	1,5	3,6	30,2	1525,7	<2,6	331,8	13,1	1019,1	2925	2928
F35-1	<0,9	0,5	1,7	244,8	<2,6	20,5	5,3	68,3	341	345
F40-1	53,4	17,9	47,3	5209,0	19,3	4298,9	308,7	8592,6	18547	18547
F40-2	<0,9	7,8	41,1	3489,9	5,7	4077,0	44,8	3876,1	11542	11543
F45-1	12,2	5,1	58,0	2976,4	<2,6	3228,2	151,9	3273,8	9706	9708
F45-2	<0,9	8,6	65,1	3956,2	<2,6	2267,4	37,5	3736,2	10071	10074
F50-1	<0,9	0,4	4,3	236,9	<2,6	4,4	3,3	<5,3	249	258
F50-2	<0,9	<0,5	2,0	68,7	<2,6	2,0	<1,0	2,6	75	80
F55-1	<0,9	<0,5	11,3	209,7	<2,6	1,4	47,1	<5,3	269	279
F55-2	<0,9	0,8	2,3	260,6	<2,6	240,5	<1,0	95,2	599	604
Kontrol	<0,9	<0,5	8,4	618,4	<2,6	0,6	<1,0	550,9		
F60-1	<0,9	0,5	3,4	315,6	<2,6	0,6	6,0	<5,3	326	335
F60-2	<0,9	<0,5	<0,9	1,3	<2,6	0,6	<1,0	<5,3	1,9	13
F70-1	<0,9	0,4	1,4	80,2	<2,6	310,0	<1,0	60,2	452	457
F70-2	<0,9	<0,5	<0,9	<2,5	<2,6	0,9	<1,0	0,6	1,5	10
F80-2	<0,9	<0,5	<0,9	3,7	<2,6	24,9	<1,0	1,8	30	36
F90-1	<0,9	<0,5	<0,9	<2,5	<2,6	2,4	<1,0	<5,3	2,4	16
Kontrol	<0,9	<0,5	8,3	597,9	<2,6	<3,0	<1,0	498,7		
KB6-1	205,5	9,3	22,3	2504,1	22,0	4981,2	777,3	2274,4	10796	10796
KB6-2	<0,9	<0,5	0,6	36,5	3,2	36,0	3,2	44,1	124	125
KB138-1	7,8	7,7	14,7	821,2	<2,6	53223,3	56,8	3043,4	57175	57178
Kontrol	<0,9	<0,5	10,1	684,6	<2,6	63,0	<1,0	635,5		
KB138-2	174,6	1,4	5,5	370,8	12,2	334,4	695,6	37,4	1632	1632
KB67-1	220,4	18,8	147,4	8647,2	20,7	2738,1	1442,9	2700,8	15936	15936
KB67-2	5,7	0,3	1,7	71,0	<2,6	13,6	72,5	12,6	177	180
KB10-1	64,6	10,4	68,9	5401,4	4,4	3725,5	828,1	1242,8	11346	11346
KB10-2	127,9	34,0	195,9	15549,3	<26,0	32858,1	1030,8	24119,2	73915	73941
KB139-1	12,3	5,1	42,9	2278,0	<5,2	2937,9	155,9	779,6	6212	6217
KB139-2	27,4	30,1	230,6	12552,7	16,4	47239,0	741,4	8765,6	69603	69603
Kontrol	<0,9	<0,5	10,2	675,5	<2,6	<3,0	<1,0	624,7		
Blindprøver gennemsnit	0,0	0,2	0,6	2,2	0,0	2,7	0,0	4,8		
DL	0,9	0,5	0,9	2,5	2,6	3,0	1,0	5,3		
QL	3,0	1,1	1,7	3,2	8,7	3,6	3,4	6,5		
Linear range	3987	4126	4276	4367	14750	4416	4409	4469		

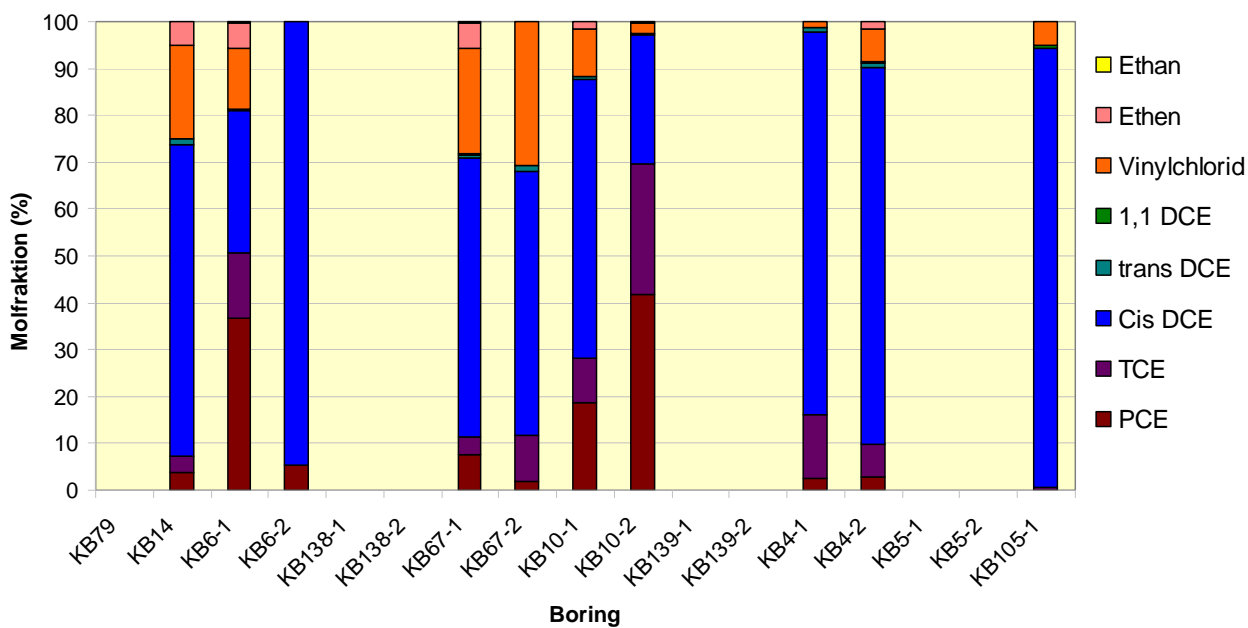
Koncentration af klorerede opløsningsmidler i vand, august 2008. Rødt skrift: > linear range; Kursiv: resultat af 2x (KB139-2 20x) fortynding;
 Kontrol: TCE 695±105 µg/l, cis-DCE 605±90 µg/l; Blind: blindprøvegennemsnit.

Prøve	Koncentration (µg/l)									Sum	
	Ethen	1,1 DCE	trans DCE	cis DCE	Ethan	PCE	Vinylchlorid	TCE	Min.	Maks.	
Kontrol	<0,9	<0,3	8,1	805,2	<2,6	<6,7	<1,2	663,3			
F10-1	<0,9	<0,3	<0,4	1,9	<2,6	<6,7	<1,2	21,5	23	36	
F10-2	<0,9	<0,3	<0,4	<1,6	<2,6	<6,7	<1,2	<0,9	ND	15	
F20-1	<0,9	<0,3	0,6	24,2	<2,6	22,2	<1,2	13,8	61	66	
F20-2	<0,9	<0,3	<0,4	8,1	<2,6	<6,7	<1,2	<0,9	8,1	21	
F25-1	<0,9	<0,3	5,3	262,7	<2,6	267,7	1,2	89,9	627	631	
F25-2	<0,9	1,9	10,1	580,3	<2,6	893,1	1,7	410,3	1897	1901	
F30-1	<0,9	16,0	93,1	7166,9	4,0	138,3	6,7	743,2	8168	8169	
F30-2	<0,9	1,6	21,2	764,6	<2,6	10,4	2,3	170,5	971	974	
KB26-1	<0,9	13,0	53,1	5451,0	<2,6	148,8	48,6	1302,6	7017	7021	
Kontrol	<0,9	<0,3	<0,4	18,0	<2,6	ND	<1,2	<0,9			
KB26-2	<0,9	8,2	42,2	3463,9	<2,6	1071,2	22,2	2292,7	6900	6904	
F35-1	<0,9	<0,3	<0,4	15,8	<2,6	<6,7	<1,2	<0,9	16	29	
F35-2	<0,9	43,5	130,5	14146,0	14,3	26389,0	352,9	21200,5	62277	62278	
F40-1	59,9	39,2	96,5	11803,9	25,3	8759,8	380,5	18957,5	40123	40123	
F40-2	5,8	20,1	95,8	10256,7	6,0	10781,1	91,3	10083,0	31340	31340	
F45-1	6,5	5,5	71,1	2689,5	<2,6	749,6	62,0	1831,8	5416	5419	
F45-2	<0,9	10,8	122,9	5001,1	<2,6	2564,4	32,7	5648,0	13380	13384	
F50-1	<0,9	<0,3	2,4	165,8	<2,6	<6,7	2,9	3,5	175	185	
Kontrol	<0,9	<0,3	6,8	706,5	<2,6	<6,7	<1,2	583,2			
F50-2	<0,9	<0,3	<0,4	30,0	<2,6	<6,7	<1,2	<0,9	30	43	
F55-1	<0,9	0,9	3,6	394,8	<2,6	<6,7	56,4	<0,9	456	467	
F55-2	<0,9	<0,3	2,7	200,4	<2,6	259,2	<1,2	108,2	570	575	
F60-1	<0,9	<0,3	8,4	670,6	<2,6	<6,7	6,1	<0,9	685	696	
F60-2	<0,9	<0,3	<0,4	2,6	<2,6	<6,7	<1,2	<0,9	2,6	16	
F70-1	<0,9	<0,3	1,0	54,5	<2,6	394,5	<1,2	70,2	520	525	
F70-2	<0,9	<0,3	<0,4	<1,6	<2,6	<6,7	<1,2	<0,9	ND	15	
F80-1	<0,9	<0,3	<0,4	3,5	<2,6	6,0	<1,2	3,9	13	19	
F80-2	<0,9	0,4	<0,4	3,2	<2,6	17,1	<1,2	11,3	32	37	
F90-1	<0,9	<0,3	<0,4	<1,6	<2,6	<6,7	<1,2	<0,9	ND	15	
F90-2	<0,9	<0,3	<0,4	<1,6	<2,6	<6,7	<1,2	<0,9	ND	15	
Kontrol	<0,9	<0,3	6,3	635,2	<2,6	<6,7	<1,2	522,9			
Kontrol	<0,9	<0,3	7,3	710,2	<2,6	<6,7	<1,2	554,9			
KB14	28,8	0,8	10,5	547,8	7,3	4,2	87,7	23,7	711	711	
KB6-1	351,3	24,5	43,7	5722,9	32,7	17925,9	905,4	4654,0	29660	29660	
KB6-2	<0,9	<0,3	<0,4	5,7	<2,6	3,1	<1,2	4,6	13	19	
KB138-1	<0,9	<0,3	<0,4	90,1	<2,6	4684,2	4,5	153,0	4932	4936	
Kontrol	<0,9	<0,3	5,5	589,1	<2,6	<6,7	<1,2	442,6			
KB138-2	90,8	1,4	<0,4	49,8	<2,6	25,3	153,4	47,6	368	371	
KB67-1	343,0	32,7	139,7	15818,7	20,5	6257,5	1581,4	3726,1	27920	27920	
KB67-2	<0,9	<0,3	<0,4	15,0	<2,6	29,8	2,8	15,7	63	68	
KB10-1	146,4	29,5	178,3	18296,6	11,6	45006,5	1066,2	18790,9	83526	83526	
KB10-2	49,9	12,4	46,4	4705,0	<2,6	3423,6	274,1	2789,2	11301	11303	
Kontrol	<0,9	<0,3	8,6	919,4	<2,6	<6,7	<1,2	671,8			
KB139-1	18,0	14,5	59,8	5152,9	<2,6	2172,8	154,3	874,2	8446	8449	
KB139-2	25,4	29,0	129,2	10316,2	8,1	34940,5	471,8	7724,4	53645	53645	
KB4-1	<0,9	<0,3	<0,4	72,3	<2,6	258,6	<1,2	<0,9	331	337	
KB4-2	200,4	37,9	136,9	15329,9	22,9	142,1	2022,2	164,4	18057	18057	
KB5-1	ND	29,4	69,5	10655,9	<2,6	493,9	57,1	1869,1	13175	13178	
KB5-2	11,0	13,1	57,1	6254,8	3,5	34525,6	155,7	8518,8	49540	49540	
Kontrol	<0,9	<0,3	4,5	491,5	<2,6	<6,7	<1,2	353,2			
Blind	0,0	0,0	0,4	1,3	0,0	6,4	0,1	0,4			
DL	0,9	0,3	0,8	1,6	2,6	6,7	1,2	0,9			
QL	3,0	0,9	1,6	2,4	8,7	7,3	3,5	2,1			
Linear range	2024	4126	4276	4367	7290	4416	2176	4469			

Bilag D



Forureningsudbredelse og geologien i KB-transectet øst for gadekæret, juni 2008.



Forurenings sammensætning i vandprøverne udtaget i juni 2008 i KB-transectet øst for gadekæret.

Bilag E

Input data til programmet Mass Flux Toolkit

1. SELECT UNITS SYSTEM

SI Units

2. SELECT CONCENTRATION UNITS

ug/l

3. SELECT ELEVATION UNITS

m MSL

7.00

4. CHOOSE TRANSECT

Transect 1

5. CHOOSE TIME PERIOD

1

6. ENTER TRANSECT DATA

6.1 Distance of Transect 1 from Source

80 m

6.2 Hydraulic Conductivity

6.3 Hydraulic Conductivity Units

cm/sec

6.4 Uniform Hydraulic Conductivity?

Yes $\rightarrow 5 \cdot 10^{-2}$

6.5 Uniform Hydraulic Gradient?

Yes $\rightarrow 5 \cdot 10^{-3}$

6.6 Sampling Interval

Se tabellerne E.1-E.3

7. CHOOSE GRID (OPTIONAL)

	Current Grid	Refine Grid By	Refined Grid
Number of rows		6	
Number of columns		1	

8. SELECT CONSTITUENT FOR CALCULATIONS

9. Select Grid Interpolation Schemes

Linear Interpolation

10. Interpolate Conc. Horizontally

Linear Interpolation

Tabel E.1 – F-transekt med min. koncentrationer

Monitoring Point	Distance of Monitoring Point from Start of Transect (m)	sampling interval (m MSL)		plume (m MSL)		concentration (ug/l)		
		top	bottom	top	bottom	Constituent A sum klorerede juli	Constituent B sum klorerede august	
1	Start of transect	0,00				0	0	
2	End of transect	76,50				0	0	
3	F10	0,01	1,1	0,1	3,6	0,1	15	23
4	F10	0,01	3,6	2,6	3,6	0,1	1,1	0,001
5	F20	9,63	1,1	0,1	3,6	0,1	39	61
6	F20	9,63	3,6	2,6	3,6	0,1	4,3	8,1
7	F25	15,06	-0,9	-1,9	3,6	-1,9	254	627
8	F25	15,06	2,1	1,1	3,6	-1,9	896	1897
9	F25	15,06	3,6	3,5	3,6	-1,9	4,3	8,1
10	F30	19,9	-2,1	-2,2	3,6	-2,2	0	0
11	F30	19,9	1	0	3,6	-2,2	6671	8168
12	F30	19,9	3,5	2,5	3,6	-2,2	579	971
13	KB26	20,66	-2,1	-2,2	3,6	-2,2	0	0
14	KB26	20,66	0,8	-0,2	3,6	-2,2	4406	7017
15	KB26	20,66	3,2	2,2	3,6	-2,2	2925	6900
16	F35	24,93	-1,1	-2,1	3,6	-2,1	341	500
17	F35	24,93	2	1	3,6	-2,1		62277
18	F35	24,93	3,6	3,5	3,6	-2,1	2925	6900
19	F40	29,79	-2,1	-2,2	3,6	-2,2	0	0
20	F40	29,79	1	0	3,6	-2,2	18547	40123
21	F40	29,79	3,5	2,5	3,6	-2,2	11542	31340
22	F45	35,16	-2,1	-2,2	3,6	-2,2	0	0
23	F45	35,16	-1,1	-2,1	3,6	-2,2	9706	5416
24	F45	35,16	2	1	3,6	-2,2	10071	13380
25	F45	35,16	3,6	3,5	3,6	-2,2	75	30
26	F50	39,8	-2,1	-2,2	3,6	-2,2	0	0
27	F50	39,8	0,9	-0,1	3,6	-2,2	249	175
28	F50	39,8	3,4	2,4	3,6	-2,2	75	30
29	F55	44,77	-1,1	-2,1	3,6	-2,1	269	456
30	F55	44,77	1,9	0,9	3,6	-2,1	599	570
31	F55	44,77	3,6	3,5	3,6	-2,1	1,9	2,6
32	F60	50,05	0,9	-0,1	3,6	-0,1	326	685
33	F60	50,05	3,4	2,4	3,6	-0,1	1,9	2,6
34	F70	57,6	1	0	3,6	0	452	520
35	F70	57,6	3,5	2,5	3,6	0	1,5	0,001
36	F80	66,53	1	0	3,6	0	2,4	13
37	F80	66,53	3,5	2,5	3,6	0	30	32
38	F90	76,47	1	0	3,6	0	2,4	0,001
39	F90	76,47	3,5	2,5	3,6	0	0	0,001

Tabel E.2 – F-transekt med maks. koncentrationer

Monitoring Point	Distance of Monitoring Point from Start of Transect (m)	sampling interval (m MSL)		plume (m MSL)		concentration (ug/l)		
		top	bottom	top	bottom	Constituent A sum klørerede juli	Constituent B sum klørerede august	
1	Start of transect	0,00				0	0	
2	End of transect	76,50				0	0	
3	F10	0,01	1,1	0,1	3,6	0,1	15	23
4	F10	0,01	3,6	2,6	3,6	0,1	1,1	0,001
5	F20	9,63	1,1	0,1	3,6	0,1	39	61
6	F20	9,63	3,6	2,6	3,6	0,1	4,3	8,1
7	F25	15,06	-0,9	-1,9	3,6	-1,9	254	627
8	F25	15,06	2,1	1,1	3,6	-1,9	896	1897
9	F25	15,06	3,6	3,5	3,6	-1,9	579	971
10	F30	19,9	-2,1	-2,2	3,6	-2,2	0	0
11	F30	19,9	1	0	3,6	-2,2	6671	8168
12	F30	19,9	3,5	2,5	3,6	-2,2	579	971
13	KB26	20,66	-2,1	-2,2	3,6	-2,2	0	0
14	KB26	20,66	0,8	-0,2	3,6	-2,2	4406	7017
15	KB26	20,66	3,2	2,2	3,6	-2,2	2925	6900
16	F35	24,93	-1,1	-2,1	3,6	-2,1	341	500
17	F35	24,93	2	1	3,6	-2,1		62277
18	F35	24,93	3,6	3,5	3,6	-2,1	11542	31340
19	F40	29,79	-2,1	-2,2	3,6	-2,2	0	0
20	F40	29,79	1	0	3,6	-2,2	18547	40123
21	F40	29,79	3,5	2,5	3,6	-2,2	11542	31340
22	F45	35,16	-2,1	-2,2	3,6	-2,2	0	0
23	F45	35,16	-1,1	-2,1	3,6	-2,2	9706	5416
24	F45	35,16	2	1	3,6	-2,2	10071	13380
25	F45	35,16	3,6	3,5	3,6	-2,2	11542	31340
26	F50	39,8	-2,1	-2,2	3,6	-2,2	0	0
27	F50	39,8	0,9	-0,1	3,6	-2,2	249	175
28	F50	39,8	3,4	2,4	3,6	-2,2	75	30
29	F55	44,77	-1,1	-2,1	3,6	-2,1	269	456
30	F55	44,77	1,9	0,9	3,6	-2,1	599	570
31	F55	44,77	3,6	3,5	3,6	-2,1	75	30
32	F60	50,05	0,9	-0,1	3,6	-0,1	326	685
33	F60	50,05	3,4	2,4	3,6	-0,1	1,9	2,6
34	F70	57,6	1	0	3,6	0	452	520
35	F70	57,6	3,5	2,5	3,6	0	1,5	0,001
36	F80	66,53	1	0	3,6	0	452	13
37	F80	66,53	3,5	2,5	3,6	0	30	32
38	F90	76,47	1	0	3,6	0	2,4	0,001
39	F90	76,47	3,5	2,5	3,6	0	30	0,001

Tabel E.3 – T5m-transekt

	Monitoring Point	Distance of Monitoring Point from Start of Transect (m)	sampling interval (m MSL)		plume (m MSL)		concentration (ug/l)	
			top	bottom	top	bottom	Constituent A sum klorerede Geoprobe	Constituent B
1	Start of transect	0,00					0	0
2	End of transect	131,27					0	0
3	T5m-10	0,001	1,1	0,1	3,6	0	3,0	
4	T5m-10	0,001	3,6	2,6	3,6	0	0,0	
5	T5m-3	18	1,1	0,1	3,6	0	15	
6	T5m-3	18	3,6	2,9	3,6	0	2,0	
7	T5m-2	27	1,2	0,2	3,6	0	135	
8	T5m-2	27	3,6	3,0	3,6	0	135	
9	T5m-11	31,9	-2	-3	3,6	-3	1,0	
10	T5m-11	31,9	1,0	0,0	3,6	-3	5110	
11	T5m-11	31,9	3,6	2,8	3,6	-3	1944	
12	T5m-1	37,4	-2,9	-3	3,6	-3	0	
13	T5m-1	37,4	0,9	-0,1	3,6	-3	2810	
14	T5m-1	37,4	3,6	2,9	3,6	-3	670	
15	T5m-12	47	-2,1	-3,1	3,6	-3,1	2,0	
16	T5m-12	47	0,9	-0,1	3,6	-3,1	16780	
17	T5m-12	47	3,6	2,9	3,6	-3,1	7678	
18	T5m-4	54	0,9	-0,1	3,6	-0,1	172	
19	T5m-4	54	3,6	2,9	3,6	-0,1	162	
20	T5m-5	64,9	0,8	-0,2	3,6	-0,2	140	
21	T5m-5	64,9	3,6	2,8	3,6	-0,2	63	
22	T5m-6	71	-0,1	-1,1	3,6	-1,1	39	
23	T5m-6	71	3,6	3,0	3,6	-1,1	1,0	
24	T5m-7	82	-0,1	-0,2	3,6	-0,2	0	
25	T5m-7	82	2,2	1,2	3,6	-0,2	121	
26	T5m-7	82	3,2	2,7	3,6	-0,2	130	
27	T5m-8	105	0,8	-0,2	3,6	-0,2	1,0	
28	T5m-8	105	3,6	2,8	3,6	-0,2	3,0	
29	T5m-9	131	0,8	-0,2	3,6	-0,2	0,16	
30	T5m-9	131	3,6	2,8	3,6	-0,2	0,19	

Bilag 2 MLS-prøvetagning

MLS-prøvetagning

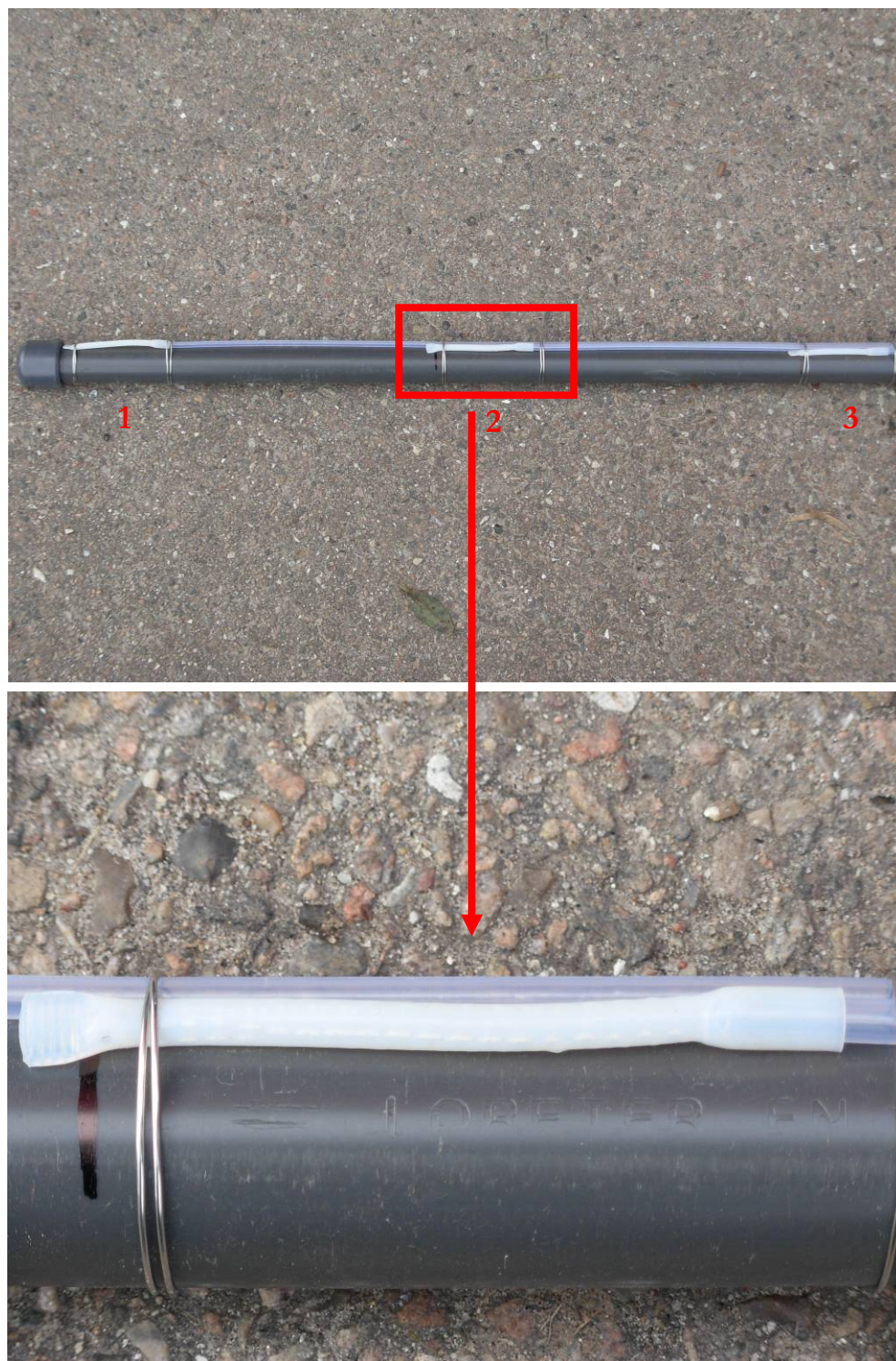
I det følgende gives en kort illustreret beskrivelse af prøvetagningen der blev foretaget med Multilevel Sampler (MLS).

Installering af MLS er vist øverst i Figur 1 (hver slange svarer til 1 filter), og i Figur 2 (bund af Multilevel Sampler med tre filtre vist, og zoom på filter 2).

MLS-prøvetagning er vist nederst i Figur 1, hvor MLS slanger forbindes til slanger til prøvetagningsudstyr (forbindelsen er på billedet fremhævet med en rød cirkel). Desuden er prøvetagningsudstyr med vacuum-måler og én prøvetagningsflaske i gang vist øverst i Figur 3. Renspumpningsvolumen er 40 ml. Nederst i samme figur vises prøvetagning til 40 ml glas vials (de samme som er brugt til F-boringer) med så lidt headspace som muligt (helt uden headspace er ikke muligt pga. vacuum).



Figur 1: Øverst: installering af MLS. Hver slange svarer til 1 filter. Nederst: MLS prøvetagning. Den røde cirkel markerer forbindelse mellem MLS slanger og slanger til prøvetagningsudstyr.



Figur 2: Installering af MLS. Øverst: Bunden af Multilevel Sampler med 3 filtre på billedet (filter 2 er markeret med rød boks). Nederst zoom på filter 2.



Figur 3: Øverst: Prøvetagningsudstyr med vacuum-måler og 1 prøvetagningflaske i gang. Renspumpningsvolumen: 40 ml. Nederst: Prøvetagning til 40 ml glas vials (samme som brugt til F-boringer) med så lidt headspace som muligt (helt uden headspace er ikke muligt pga. vacuum).

Bilag 3 Datasæt for koncentrationer

Datasæt fra almindelige boringer

F Boring	chlorerede ethener µg/l					
	jul-08	aug-08	dec-08	mar-09	jul-09	nov-09
F10-1	15	23	2	0	0	4
F10-2	1	0	1	0	0	3
F20-1	39	61	2	16	43	54
F20-2	4	8	14	0	0	0
F25-1	254	627	559	265	294	272
F25-2	896	1897	1174	404	353	297
F30-1	6671	8168	4059	4916	3813	3521
F30-2	579	971	3282	3259	2188	4530
KB26-1	4406	7017	7450	6323	5581	7906
KB26-2	2925	6900	4311	4698	5427	4102
F35-1	341	16	137	71	71	111
F35-2	-	35344	31360	35284	31001	26613
F40-1	18547	25154	23506	23965	25017	15062
F40-2	11542	23124	28848	26384	23208	13869
F45-1	9706	5416	3082	2778	3218	5120
F45-2	10071	13380	11167	7133	7075	5337
F50-1	249	175	422	173	76	150
F50-2	75	30	3	1	0	0
F55-1	269	456	-	257	95	258
F55-2	599	570	703	659	714	622
F60-1	326	685	142	334	243	323
F60-2	2	3	0	0	0	0
F70-1	452	520	-	267	266	200
F70-2	1	0	-	0	0	8
F80-1	-	13	-	4	24	30
F80-2	30	32	-	24	21	35
F90-1	2	0	-	0	0	3
F90-2		0	-	-	-	-

KB Boring	chlorerede ethener µg/l			
	jul-08	aug-08	dec-08	mar-09
KB14	-	711	-	45
KB6-1	10796	20470	12168	3333
KB6-2	124	13	-	4
KB138-1	-	4932	-	11558
KB138-2	1632	368	29	32
KB67-1	15936	23026	4723	2862
KB67-2	177	63	52	43
KB10-1	11346	51803	-	56349
KB10-2	73915	11301	1080	1258
KB139-1	6212	8446	-	17996
KB139-2	-	53645	40121	42987
KB159-1	-	-	-	-
KB159-2	-	-	24530	31847
KB4-1	-	331	-	10564
KB4-2	-	12708	-	4293
KB5-1	-	9507	6762	14319
KB5-2	-	39091	23422	15716

Datasæt fra MLS

Sum chl. stoffer MLS alle målerunder

chlorerede ethener µg/l

Filter	mar-09	jul-09	nov-09
MLS-I	sum	sum	sum
I-17	408	-	-
I-16	428	859	841
I-15	1520	1215	1540
I-14	2001	1636	2310
I-13	2215	1666	3982
I-12	4284	1741	4323
I-11	4682	1743	3509
I-10	4476	2299	3041
I-9	3790	2390	2822
I-8	3096	1625	2126
I-7	1967	1572	1533
I-6	1320	1112	1467
I-5	1258	1380	1664
I-4	2091	2031	2213
I-3	2835	2199	2243
I-2	2567	2286	2488
I-1	856	602	913

Filter	mar-09	jul-09	nov-09
MLS-II	sum	sum	sum
II-18	136	106	-
II-17	116	321	250
II-16	340	760	602
II-15	381	1240	958
II-14	941	2318	2941
II-13	3512	5302	3827
II-12	5805	9290	6366
II-11	5575	-	-
II-10	8962	8476	10454
II-9	9201	8997	5305
II-8	8933	9389	10822
II-7	8656	11106	11848
II-6	7796	10128	11865
II-5	8925	9621	11601
II-4	9182	8212	11882
II-3	10013	8723	13214
II-2	8528	-	11887
II-1	6209	6790	8644

Filter	mar-09	jul-09	nov-09
MLS-III	sum	sum	sum
III-22	-	35	-
III-21	13741	17842	-
III-20	16925	-	-
III-19	18170	15604	-
III-18	16608	14714	-
III-17	17143	13194	-
III-16	13297	16641	-
III-15	19018	19868	-
III-14	21912	18307	-
III-13	25626	19704	-
III-12	24763	23642	-
III-11	25866	26107	10020
III-10	24537	22689	10960
III-9	23464	23059	11399
III-8	18583	24287	11721
III-7	4086	20635	10492
III-6	11796	3079	9845
III-5	7779	25698	6262
III-4	-	21833	8470
III-3	1543	20049	8452

Filter	mar-09	jul-09	nov-09
MLS-IV	sum	sum	sum
IV-22	794	1575	-
IV-21	1198	2186	1308
IV-20	2498	3601	1709
IV-19	4515	5866	2190
IV-18	2796	3598	2655
IV-17	4425	4876	2331
IV-16	13013	13275	-
IV-15	26275	33216	13203
IV-14	35997	37280	7733
IV-13	35081	39951	14370
IV-12	27350	14793	11123
IV-11	11976	12420	-
IV-10	19445	13735	8920
IV-9	12748	13142	8474
IV-8	22291	14042	8713
IV-7	8222	10622	9175
IV-6	9396	9484	9199
IV-5	8381	10474	9524
IV-4	8670	10684	9073
IV-3	7413	9478	8628
IV-2	3813	4427	6062
IV-1	-	-	8401

Filter	mar-09	jul-09	nov-09
MLS-V	sum	sum	sum
V-24	5	-	-
V-23	-	-	-
V-22	4	-	-
V-21	9	2	-
V-20	10	0	-
V-19	10	27	-
V-18	13	0	-
V-17	6	2	-
V-16	32	1	-
V-15	22	3	21
V-14	38	5	16
V-13	-	8	15
V-12	74	9	17
V-11	302	271	298
V-10	586	359	306
V-9	2098	1127	640
V-8	2770	1983	1559
V-7	2454	1741	1570
V-6	2124	1478	1012
V-5	1233	1103	634
V-4	1189	733	716
V-3	1306	847	822
V-2	-	2079	2293
V-1	2647	-	1827

Farveforklaringer:

<p>Korrelerede værdier (kun lavet hvor der var fejl eller mangler i oprindelige værdier): Korrelationerne er lavet for hvert stof for sig. Korrelationsgraferne er lavet lineært og gennem (0,0). Til korrelationsgraferne er medtaget data hvor der er to sammenhørende målinger (målinger fra hver sin analyserunde på samme prøve), uden fejl og over detektionsgrænsen. For de data hvor korrelation bruges (pga. fejl eller mangler i oprindelige data), er brugt nye analysedata og omregnet med korrelationsfaktoren.</p>			
<p>For disse målinger er cis-DCE eller TCE over 10% højere end den højeste standard til kalibrering, men er beholdt da der ikke findes data at korrelere med, og værdierne ikke er meget over. Desuden tyder andres forsøg på at linear range for cis DCE og TCE faktisk er større end brugt i databehandlingen her.</p>			
<p>For disse målinger er cis-DCE lidt over det angivne linear range, men er beholdt da der ikke var data at korrelere med og værdierne ikke er så meget over. Desuden tyder andres forsøg på at linear range for cis-DCE faktisk er større end brugt i databehandlingen her.</p>			
<p>Marts 09: MLS IV-22 til IV-4 er måske 20-30 % undervurderede.</p>			
<p>For disse to målinger i marts 09 er desuden målt: IV-8 2x: 9.915 og IV-4: 10.613. Data præsenteret i tabellen ovenover er dem hende der havde lavet analysen havde valgt ud til grafer, derfor er de formodentlig de bedste.</p>			
<p>Juli 09: Der er anvendt data fra ny analyse i december på juli 2009 prøver, fordi der blev detekteret stoffer som ikke blev detekteret ved forrige analyse, eller fordi der ikke var analysedata fra forrige analyse.</p>			
<p>Nov 09: Intern Standard afviger tydeligt mere end 15 % fra punkter tæt ved, dog under en faktor 10.</p>			
Nov 09 prøver kørt:	10/2 2010	17/2 2010	26/2 2010

Detektionsgrænser:

Detektionsgrænserne (DL) varierer mellem de forskellige analysekørsler, men i tabellen nedenfor er angivet en general størrelsesorden for de forskellige stoffer vurderet overordnet ud fra de forskellige kørsler. For analyser på juli 2009 data kørt i juli/august er der for nogle af stofferne dog en lidt anden størrelsesorden, derfor er de angivet for sig.

	PCE	TCE	cis DCE	trans DCE	1,1 DCE	Vinylchlorid	Ethen	Ethan
Generel True DL str. orden (µg/l)	2	2	3	1	1	1	1	3
True DL str. orden for juli 09 data kørt i juli /august (µg/l)	12	6	5	13	6	3	4	3

Bilag 4 Kornstørrelsesfordeling

Bilag 4.a: Metode til bestemmelse af kornstørrelsesfordeling

Kornstørrelsesfordeling er et materiales relative fordeling efter kornstørrelse i forskellige fraktioner. På en kornkurve angiver ordinator den masseprocent af mængden, hvis kornstørrelser er mindre end den af abscissen angivne kornstørrelse. Måleintervallet er 0,0002 mm til 2,0 mm. Sigteanalyser udføres for materialer der er større end 0,063 mm; for den del, der er mindre end 0,063 mm, anvendes sedigrafanalyser.

Bestemmelsen af kornstørrelsesfordeling kræver at partiklerne er jævnt dispergeret i en vand opløsning. Efter tørring ved 60 °C i 3 dage blev 50-200 g sediment prøve tilsat 250 ml vand i en 1 L flaske homogeniseret i et ultralydsbad i 5 minutter og derefter rystet i rystemaskinen i 18 timer. Prøverne blev vådsigtet (63 µm sigte) for at splitte grus og sand fraktionen (>63 µm) fra silt og ler fraktionen (≤ 63 µm).

Til sigteanalysen blev fraktionen >63 µm tørt natten over ved 105°C. Prøverne blev derefter tørsigtet (2 mm; 1 mm; 0,5 mm; 0,355 mm; 0,250 mm; 0,180 mm; 0,125 mm; 0,090 mm; 0,063 mm og bundskål) i 15 minutter ved 1,50 amplitude, og vejret med en nøjagtighed på 0,01 gram.

Sedigrafanalysen blev udført på sedigraf 5100. 0,1M Na₄P₂O₇ 10H₂O blev tilføjet til fraktionen <63 µm i en 1 L suspension flaske til en endelig koncentration på 0,002M Na₄P₂O₇. Suspension flasken blev derefter rystet natten over. Sedigrafanalyse blev udført efter fortynding eller fortykkelse af suspensionen til en endelig koncentration på 5g/50ml 0,002M Na₄P₂O₇ 10H₂O. Sedigraf resultaterne er givet som relative bidrag (%) fra de enkelte fraktioner.

Bilag 4.b: Procentvise indhold af ler, silt og sand

Prøvernes procentvise indhold af hhv. ler, silt og sand baseret på kornstørrelsesfordelingen er angivet i tabellen nedenfor.

Procentvise indhold af ler, silt og sand i prøverne.

Prøve Boring-dybde (mut)	silt + ler	ler	silt ^a	sand ^b
	% < 0,063 mm	% < 0,002 mm	%	%
F60-6,5	2,9	#N/A	#N/A	97,1
F80-4,0	3,9	#N/A	#N/A	96,1
F40-7,0	4,2	#N/A	#N/A	95,8
F25-4,0	4,9	#N/A	#N/A	95,1
F35-5,5	5,3	#N/A	#N/A	94,7
F45-8,5	5,6	3,1	2,5	94,4
F70-6,5	6,6	#N/A	#N/A	93,4
F45-6,5	6,9	#N/A	#N/A	93,1
F30-4,5	8,4	#N/A	#N/A	91,6
F60-4,0	9,2	#N/A	#N/A	90,8
F25-6,5	9,7	#N/A	#N/A	90,3
F40-4,0	9,8	#N/A	#N/A	90,2
F45-6,0	10,5	#N/A	#N/A	89,5
F30-6,5	12,4	2,6	9,8	87,6
F25-5,0	13,1	3,9	9,1	86,9
F10-6,0	15,2	7,1	8,1	84,8
F70-6,0	16,3	7,6	8,7	83,7
F55-5,0	27,0	10,9	16,1	73,0
F30-4,0	27,5	13,8	13,8	72,5
F50-6,5	28,7	12,4	16,2	71,3
F10-4,0	29,4	13,2	16,1	70,6
F45-5,5	30,9	13,8	17,1	69,1
F50-4,5	32,9	#N/A	#N/A	67,1
F30-3,5	36,6	16,4	20,2	63,4
F20-6,5	39,2	12,8	26,5	60,8
F45-4,0	41,5	21,0	20,5	58,5
F90-6,5	41,7	#N/A	#N/A	58,3
F10-4,5	43,1	20,7	22,4	56,9
F90-4,0	43,2	20,8	22,4	56,8
F25-9,0	48,4	23,2	25,2	51,6
F35-9,0	50,8	#N/A	#N/A	49,2
F45-5,0	54,4	22,8	31,6	45,6
F20-4,5	62,6	26,8	35,7	37,4
F80-7,0	65,5	29,0	36,5	34,5
F55-8,5	71,0	#N/A	#N/A	29,0
F50-3,5	75,0	26,4	48,6	25,0
F55-6,0	76,8	29,5	47,3	23,2
F45-9,0	90,8	#N/A	#N/A	9,2

a: Silt % er udregnet som "silt+ler" - "ler". b: Sand er udregnet som 100 % - "silt+ler".

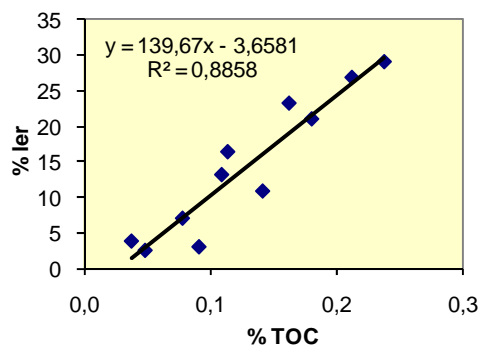
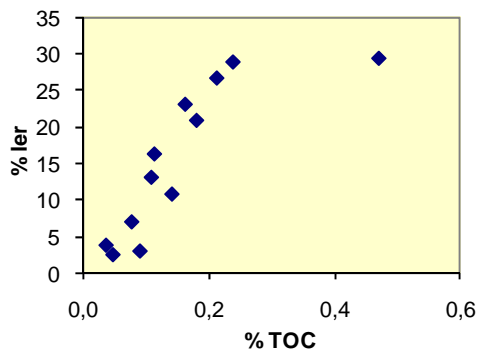
Prøver vurderet som sand er farvet grønne, prøver vurderet som moræneler er sorte.

Bilag 5 Organisk kulstof i sedimentprøver

Af tabellen ses resultater fra undersøgelsen af organisk kulstof ($\text{TOC} = f_{oc}$).

Prøve Boring-dybde (mut)	% TOC gennemsnit	% TOC spredning	% < 0,002 mm (% ler)
F10-4,0	0,109	0,012	13,2
F10-6,0	0,0780	0,003	7,1
F20-4,5	0,213	0,052	26,8
F25-5,0	0,0374	0,002	3,9
F25-9,0	0,163	0,002	23,2
F30-3,5	0,114	0,014	16,4
F30-6,5	0,0482	0,002	2,6
F45-4,0	0,181	0,034	21,0
F45-8,5	0,091	0,021	3,1
F55-5,0	0,142	0,004	10,9
F55-6,0	0,469	0,022	29,5
F60-4,0	0,111	0,002	#N/A
F80-7,0	0,238	0,011	29,0

Resultaterne er desuden plottet i nedenstående grafer, med % ler i forhold til % TOC. Højre graf er et zoom af venstre hvor det yderste punkt er udeladt.



Bilag 6 Organisk kulstof i vandprøver

Resultater for NPOC i F-transekktet for marts 2009 ses af figuren nedenfor.

