

Kemisk grundvandskortlægning

Birgitte Hansen, Lone Mossin, Loren Ramsay, Lærke Thorling,
Vibeke Ernstsén, Jeppe Jørgensen og Margrethe Kristensen

G E O - V E J L E D N I N G 6



Kemisk grundvandskortlægning

G E O - V E J L E D N I N G 6

Birgitte Hansen, Lone Mossin, Loren Ramsay, Lærke Thorling, Vibeke Ernstsen,
Jeppe Jørgensen og Margrethe Kristensen

DE NATIONALE GEOLOGISKE UNDERSØGELSER FOR DANMARK OG GRØNLAND
KLIMA- OG ENERGIMINISTERIET



Kemisk grundvandskortlægning

Geo-vejledning 6

Særudgivelse

Formel for kalkmætningsgrad s. 36 er rettet d. 28.3.2011

Omslag: Henrik Klinge

Forsidefoto: Bente Fyrstenberg Nedergaard

Repro: GEUS

Oplag: 100

2009

Trykt: ISBN 978-87-7871-261-5

www: ISBN 978-87-7871-262-2

Vejledningen kan hentes på nettet: www.geus.dk

Pris (indbundet): 200 kr.

© De Nationale Geologiske Undersøgelser for Danmark og Grønland, GEUS
Øster Voldgade 10
DK-1350 København K
Telefon: 38142000
E-post: geus@geus.dk

Udarbejdet i samarbejde med By- og Landskabsstyrelsen, Miljøministeriet.

Forord

I 1998 blev det besluttet, at der over en årrække skulle foretages en kortlægning af grundvandsforekomsterne i Danmark med henblik på fremtidig beskyttelse af ressourcen ved vedtagelse af Folketingets tillæg til Vandforsyningsloven. Kortlægningen blev i 2003 indbygget i Miljømålsloven, og blev til og med 2006 udført af de nu nedlagte amter.

Administrationen af kortlægningsopgaven videreføres nu af statens miljøcentre under By- og Landskabsstyrelsen i Miljøministeriet.

Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelser (GEUS) har til opgave at bistå med udviklingsprojekter, faglig koordinering og udarbejdelse af vejledninger, således at grundvandskortlægningen så vidt muligt kan udføres ensartet i alle egne af landet, hvor der er tale om sammenlignelige problemstillinger. Vejledningerne udgives i en serie kaldet Geo-vejledninger, og skal blandt andet kunne tjene som fagligt grundlag for de udbud af kortlægningsopgaver, som miljøcentrene foretager. Geo-vejledningerne udarbejdes i samarbejde med de statslige miljøcentre.

Kompetencenetværket for grundvands- og sedimentkemi (tidligere ERFA-gruppen for kemisk kortlægning) anbefalede i begyndelse af 2008 igangsætning af nærværende projekt. I foråret 2008 besluttede Styregruppen for den nationale grundvandskortlægning at nedsætte en projektgruppe med det formål at udarbejde en geo-vejledning i kemisk grundvandskortlægning.

Denne geo-vejledning er den første egentlige håndbog i kemisk grundvandskortlægning i Danmark.

Projektet med udarbejdelse af Geo-vejledningen er udført af:

Birgitte Hansen,	GEUS, projektleder
Lærke Thorling,	GEUS
Vibeke Ernstsén,	GEUS
Margrethe Kristensen,	GEUS
Jeppe Jørgensen,	Miljøcenter Aalborg
Lone Mossin,	Århus Kommune
Loren Ramsay,	Alectia

I forbindelse med projektet er der nedsat en faglig følgegruppe. Følgegruppen har bestået af:

Anne Mette Nielsen	GEUS
Arne Mogensen	MC Roskilde
Charlotte Greve	MC Odense
Erling Fuglsang Nielsen	MC Århus
Gert Laursen	Odense Kommune
Gunnar Larsen	MC Odense

Henriette Jakobsen
Henrik Bay
Henrik Olesen
Jacob Qvortrup Christensen
Kenneth Ejsbøl
Kirsten Harbo
Klaus Hinsby
Klaus Petersen
Lisbeth Møllerhøj
Liselotte Clausen
Niels Peter Arildskov
Peter Erfurt
Susie Mielby
Søren Munch Kristiansen
Tina Halkjær
Vibeke Nyvang

MC Roskilde
Niras
Orbicon
Grontmij Carl Bro
MC Ribe
MC Ringkøbing
GEUS
MC Århus
MC Nykøbing Falster
Rambøll
COWI
Sønderborg Kommune/MC Ribe
GEUS
Aarhus Universitet, Geologisk Institut
Alectia
Alectia

Følgegruppen har bistået med faglig kommentering af vejledningen og har deltaget i et følgegruppemøde d. 19. marts 2009, hvor det foreløbige indhold blev diskuteret.

Derudover takkes Peter Scharling, Claus Ditlefsen og Ole Dyrsø Jensen for input til rapporten samt Bente F. Nedergaard for korrekturlæsning og Gitte Hansen for grafisk hjælp.

Projektgruppen anbefaler, at geo-vejledningen revideres efterhånden som nye erfaringer indhentes.

Indholdsfortegnelse

1. Sammenfatning	9
2. Indledning	12
2.1 Indhold.....	12
2.2 Formål	12
2.3 Målgruppe.....	13
2.4 Terminologi.....	13
3. Arbejdsgangen ved kemisk grundvandskortlægning	16
3.1 De fire trin og to modeltyper	16
3.2 Trin 1a: Projektforberedelse	17
3.3 Trin 1b: Den kemiske model på eksisterende data.....	17
3.4 Trin 2A: Nye kemiske kortlægningsresultater	21
3.5 Trin 2B: Den hydro-geokemiske model.....	22
3.6 Generelle anbefalinger til arbejdsgangen	23
4. Datahåndtering	27
4.1 Datagrundlag	27
4.2 Dataoverførsel og -udvælgelse.....	29
4.3 Dokumentation og accept af datagrundlag	31
4.4 Dataforberedelse	32
4.5 Kvalitets- og usikkerhedsvurdering	38
5. Vandindvinding	42
5.1 Samarbejde med kommuner og vandværker.....	42
5.2 Overordnet beskrivelse af vandindvindingen	42
5.3 Vandværksbeskrivelse.....	44
5.4 Tidslig udvikling	46
5.5 Sammenfatning	48
6. Indsamling af nye data	49
6.1 Databehov og prøvetagningsstrategi	49
6.2 Valg af boringer	50
6.3 Vandkemiske data fra nye boringer	53
6.4 Sedimentkemiske data fra nye boringer	54
6.5 Kvalitetskontrol	59
6.6 Dataopbevaring	59
7. Præsentationer	60
7.1 Filterintervalsplot	62
7.2 Fraktildiagram.....	63

7.3	Dybdeplot	65
7.4	Scatterplot	66
7.5	Tidsserie	68
7.6	Temakort	69
7.7	Principskitser	71
8.	Tolkning af kemiske resultater	72
8.1	Formål	72
8.2	Den indledende tolkning	73
8.3	Identifikation af vigtige processer	76
8.4	Identifikation af problemstoffer	82
9.	Sammentolkning	85
9.1	Sammentolkning med arealmæssige påvirkninger (trin 1b)	85
9.2	Geologisk forståelsesramme for tolkning af kemiske data	86
9.3	Sammentolkning af kemiske data med "den geologiske forståelsesmodel (trin 1b)	87
9.4	Sammentolkning af kemiske data i nye undersøgelsesboringer (trin 2a)	88
9.5	Sammentolkning af kemiske data med "den hydrostratigrafiske model" (trin 2b)	89
9.6	Eksempel på sammentolkning: Sammenhæng mellem nitrat og lerdæklag	90
9.7	Eksempel på sammentolkning: Kemiske og hydrogeologiske forhold	92
9.8	Eksempel på sammentolkning: Udbredelsen af højtliggende kalk	96
9.9	Eksempel på sammentolkning: Kilder til arsen i grundvandet	98
9.10	Sammentolkningsmuligheder i 3D	99
10.	Referencer	102
Bilag A1:	Paradigma til rapportering af den kemiske kortlægning under trin 1b	106
Bilag A2:	Paradigma til rapportering af den kemiske kortlægning under trin 2a	107
Bilag A3:	Paradigma til rapportering af den kemiske kortlægning under trin 2b	108
Bilag B:	Paradigma for vandværksbeskrivelse	109
Bilag C:	Geokemiske software programmer	111
Bilag D:	Litteratur	112

1. Sammenfatning

Denne geo-vejledning er den første egentlige håndbog i kemisk grundvandskortlægning i Danmark og kan anvendes bredt i forbindelse med alle typer af grundvandskemiske forsknings- og udviklingsprojekter. Geo-vejledningen indeholder ikke almindeligt lærebogsstof. Det anbefales, at brugeren af geo-vejledningen har et fagligt niveau svarende til litteraturen anvist i bilag D. Det anbefales ligeledes, at geo-vejledningen revideres løbende efterhånden som nye faringer og viden opnås.

Geo-vejledningens primære formål er at tjene som fagligt grundlag for de udbud af kortlægningsopgaver, som de statslige miljøcentre foretager i forbindelse med den nationale grundvandskortlægning (MIM, 2009).

I geo-vejledningen introduceres der nogle nye begreber, som anbefales anvendt i forbindelse med kemisk grundvandskortlægning. Det drejer sig om begreberne: "Den kemiske model på eksisterende data" og "Den hydro-geokemiske model" som defineres som slutprodukterne af henholdsvis trin 1 og trin 2 kortlægningen. Begrebet modeller skal opfattes som et bredt dækkende udtryk, som udgør en præsentation af en samlet syntese af en række resultater og tolkninger.

Geo-vejledningen er inddelt i 2 dele, hvor første del (kapitel 3) handler om arbejdsgangen i en kemisk grundvandskortlægning, hvor der skelnes mellem de opgaver der oftes foretages af det statslige miljøcenter (opdragsgiver) og rådgiver (opdragstager). I geo-vejledningen anbefales det, at arbejdsgangen i den kemiske kortlægning inddeles i fire trin med 2 modeltyper:

1. Projektforberedelse (trin 1a)
2. Den kemiske model på eksisterende data (trin 1b)
3. Nye kemiske kortlægningsresultater (trin 2a)
4. Den hydro-geokemiske model (trin 2b)

Under trin 1a skal der ske en projektforberedelse inden den egentlige kemiske grundvandskortlægning går i gang. Her skal miljøcenteret tage kontakt til kommuner og vandværker med henblik på at sikre, at alle relevante data er indberettet til JUPITER, og afklare om der skal udarbejdes vandværksbeskrivelser. Trin 1b bygger udelukkende på eksisterende data. Dataanalysen skal resultere i opstilling af en kemisk model på eksisterende data inkl. identifikation af eventuelle kemiske problemstoffer og beskrivelse af behovet for yderligere kemiske data og en prøvetagningsstrategi herfor. Trin 2a indeholder indsamling og præsentation af nye kemiske kortlægningsresultater. Under trin 2b sker databehandlingen af både eksisterende og nye kemiske kortlægningsresultater og hele den kemiske grundvandskortlægning syntetiseres i form af opstilling af den hydro-geokemiske model for undersøgelsesområdet.

Anden del af geo-vejledningen (kapitel 4-9) er en værktøjskasse med detaljerede beskrivelser af datahåndteringen, vandindvinding inkl. vandværksbeskrivelser, indsamling af nye

data, præsentationer, tolkning og sammentolkning af data, som er selve indholdet i en kemisk grundvandskortlægning.

Geo-vejledningen sætter fokus på datahåndteringen, som er en vigtig del af den kemiske kortlægning. Datahåndteringen inkluderer bl.a. en beskrivelse af datagrundlaget i en kemisk grundvandskortlægning: kommunale oplysninger om vandindvindingen, drikkevandskemi, oplysninger om geologi, filterplacering, sedimentfarver fra borer, grundvandskemi og sedimentkemi. Desuden beskrives, hvordan data kan overføres fra JUPITER og udvælges, inden den egentlige dataanalyse starter.

Som noget nyt anbefales det i geo-vejledningen, at der udarbejdes en skriftlig accept af datagrundlaget af miljøcenteret med baggrund i rådgiverens datadokumentation inden den egentlige dataanalyse starter. Dette skal sikre, at der undgås forsinkelser og sådan, at rådgiverens opgave i den kemiske kortlægning præciseres.

Under datahåndteringen hører også dataforberedelsen som er udregningen af afledte parametre (vandtype, forvitningsgrad, ionbytningsgrad etc.) på baggrund af de kemiske målinger. Der angives formler til disse udregninger. Desuden sættes der fokus på kvalitetssikring, kvalitetskontrol og usikkerhedsbestemmelser på de kemiske resultater.

En vigtig del af den kemiske grundvandskortlægning er en beskrivelse af den nuværende og fremtidige vandindvinding og vandkvalitet indenfor undersøgelsesområdet. Den kemiske kortlægning skal både indeholde en beskrivelse af de overordnede forhold for vandindvinding og vandkvalitet, og samtidig skal der tilvejebringes en vandværksbeskrivelse for alle private og kommunale vandværker i undersøgelsesområdet. Det anbefales indledningsvis at undersøge, om der allerede foreligger en tilstrækkelig detaljeret vandværksbeskrivelse hos kommunen, som kan bruges direkte i den kemiske grundvandskortlægning.

Ofte skal der i den kemiske grundvandskortlægning indsamles nye kemiske data, for at opnå et tilstrækkeligt fagligt detaljeringsniveau. Geo-vejledningen beskriver, hvordan databehovet afklares og en prøvetagningsstrategi formuleres. Indsamling af nye kemiske data kræver en afklaring af om eksisterende borer kan anvendes til vandkemisk prøvetagning eller om nye borer skal etableres. I den forbindelse skal det besluttes hvilken type boring, der skal etableres og sammensætningen af analyseprogrammet for de vand- og sedimentkemiske analyser.

I geo-vejledningen skelnes der mellem præsentation og tolkning af kemiske data samt sammentolkning af kemiske data med andre datatyper. Det er vigtigt, at dataaccepten fra miljøcenteret foreligger inden arbejdet påbegyndes. Kunsten i udarbejdelse af præsentationer består i at udvælge de vigtigste og mest informative, da der findes et utal af muligheder. I geo-vejledningen gives der eksempler på udvalgte egnede kemiske præsentationstyper som filterintervalplot, fraktildiagram, dybdeplot, scatterplot, tidsserie og temakort. Det er vigtigt at angive oplysninger om datasættet i præsentationerne så som datatype, dato for udtræk fra JUPITER, antal borer og antal analyser. I forbindelse med udarbejdelse af temakort gives der anbefalinger til inddeling i koncentrationsintervaller og farveforslag for forskellige kemiske stoffer.

Tolkning af kemiske resultater indebærer identifikation af de betydende geokemiske processer, som er årsag til grundvandets kemiske sammensætning. Det anbefales som minimum at vurdere betydningen af processerne: pyritoxidation, ionbytning og sulfatreduktion. Formålet med vurderingen af de geokemiske processer er at kunne identificere problemstoffer, der kan medføre forringelse af kvaliteten af den nuværende og fremtidige grundvandsressource, der anvendes til drikkevandsformål. Disse problemstoffer kan både skyldes menneskeskabt forurening eller naturlige geokemiske processer i grundvandsmagasinet. Desuden anbefales det, at grundvandets kemiske tilstand vurderes i forhold til mulighederne for, at en normal vandbehandling på vandværket kan fjerne eller omdanne visse kemiske stoffer, inden vandet sendes ud til forbrugerne.

Formålet med sammentolkningen er at medvirke til tolkning og forståelse af de grundvandskemiske forhold. Formålet er også at medvirke til en generel overordnet kvalitetssikring af resultaterne fra hele grundvandskortlægningen ved at sikre, at tolkningsresultaterne i hver fagdisciplin så vidt muligt ikke er i konflikt med hinanden, men spiller sammen i en større forståelse af hele dynamikken i den hydro-geokemiske forståelse af kortlægningsområdet.

De kemiske grundvandsdata bør sammentolkes med andre datatyper som arealmæssige data om påvirkninger på jordoverfladen (kvælstoftilførsel, pesticidanvendelse, forureningskilder etc.), geologiske data (udbredelse af dæklag, grundvandsmagasinet geologiske opbygning, mineralogiske undersøgelser etc.) og hydrologiske data (grundvandsdannelse, hydrauliske egenskaber, vandindvinding etc.). Sammentolkning af data er et område, hvor der er behov for at optimere den systematiske tilgang. Denne geo-vejledning skal opfattes som et skridt på vejen, og ønsket er at give inspiration ved at præsentere en række succesfulde eksempler på sammentolkninger med kemiske data. Geo-vejledningen anbefaler specielt, at de kemiske resultater sammentolkes under trin 1b i "Den geologiske forståelsesmodel" og under trin 2b i "Den hydrostratigrafiske model" for undersøgelsesområdet.

Resultaterne fra den kemiske kortlægning konkretiseres i geo-vejledningen ved paradigmer for rapporteringen. Bilagene A1-A3 indeholder paradigmer for rapportering af kortlægningen under trin 1b, 2a og 2b, mens bilag B indeholder paradigma for en vandværksbeskrivelse. Bilag C indeholder en liste over geokemiske programmer på markedet p.t. dog er geo-vejledningen søgt holdt uafhængig af software-produkter.

2. Indledning

2.1 Indhold

Geo-vejledningen i kemisk grundvandskortlægning vil angive retningslinier for datahåndteringen, tilrettelæggelse af feltarbejde, præsentation, tolkning og rapportering af kemiske data under grundvandskortlægningen. Anbefalingerne i vejledningen bygger på en sammenstilling af den tilgængelige geokemiske viden om grundvand og kemiske kortlægningsmetoder på det tidspunkt, som vejledningen er udarbejdet. Det skal derfor pointeres, at selvom der nu foreligger en vejledning i kemisk grundvandskortlægning, opfordres der til stadig geokemisk nytænkning, udvikling og kreativitet, sådan at fagområdet til stadighed udvikles.

Vejledningen er søgt holdt uafhængig af software-produkter, da markedet er under konstant udvikling. Dog findes der i Bilag C en liste over geokemiske softwareprogrammer på markedet p.t. med vurdering af deres anvendelsesmuligheder indenfor grundvandskemiske problemstillinger.

Geo-vejledningen indeholder praktiske anbefalinger til udførelse af en kemisk grundvandskortlægning. Geo-vejledningen indeholder ikke almindeligt lærebogsstof. Derfor kræver anvendelsen af geo-vejledningen et vist forhåndskendskab til grundvandskemi. I Bilag D henvises til relevant lærebogsstof, som vil være et udmærket udgangspunkt før anvendelse af denne geo-vejledning i kemisk grundvandskortlægning.

I dette indledende kapitel af vejledningen introduceres terminologien, som anbefales anvendt under den kemiske grundvandskortlægning. I kapitel 3 beskrives arbejdsgangen i forbindelse med den kemiske kortlægning, hvor indholdet i en kemisk kortlægning under trin 1 og 2 jf. Administrationsgrundlaget (MIM, 2009) nøje gennemgås. Dernæst indeholder de efterfølgende kapitler 4-9 selve værktøjskassen, hvor det beskrives, hvordan den kemiske kortlægning skal udføres. I værktøjskassen behandles emnerne datahåndtering, vandindvinding, indsamling af nye data, præsentationer og tolkningsværktøjer.

2.2 Formål

Formålet med denne vejledning er at højne kvaliteten af den kemiske grundvandskortlægning, der udføres i forbindelse med den nationale grundvandskortlægning, ved at sikre en ensartet og systematisk tilgang til den kemiske grundvandskortlægning i alle egne af landet. Vejledningen skal danne grundlag for fagligt velfunderede tolkninger af kemiske resultater, som kan sætte fokus på kemiske problemstoffer i grundvandsmagasiner med nuværende og fremtidige drikkevandsinteresser. Den kemiske grundvandskortlægning skal kvalificere de efterfølgende sårbarhedsvurderinger med henblik på at sikre et tilstrækkeligt fagligt grundlag for planlægning og beskyttelse af grundvandsressourcerne.

Formålet med den nationale grundvandskortlægning er at sikre nuværende og fremtidige drikkevandsinteresser. Her indgår grundvandskemien med metoder og resultater, som direkte beskriver den kemiske tilstand af grundvandsmagasinerne. I modsætning hertil bidrager andre fagdiscipliner ofte med mere indirekte metoder og målinger.

Et andet vigtigt formål med denne geo-vejledning er at medvirke til mere fokus på den kemiske grundvandskortlægning som en selvstændig disciplin, da fokus hidtil i stor udstrækning har været på geologiske, geofysiske og hydrologiske undersøgelser. Dette er vigtigt, da den kemiske viden baseres på selvstændige og uafhængige data, der i sammentolkningen med andre datatyper bidrager med viden om vigtige hydrologiske og geologiske årsagssammenhænge. Målet er således også, at opnå en større anerkendelse af den kemiske viden i grundvandskortlægningen på lige fod med de andre discipliner.

2.3 Målgruppe

Geo-vejledningen i kemisk grundvandskortlægning er målrettet miljøcentrene (opdragsgivere) og rådgivere (opdragstagere), som udfører den nationale grundvandskortlægning. Arbejdet med den kemiske grundvandskortlægning involverer også kommuner, vandværker og regioner.

Geo-vejledningen i kemisk grundvandskortlægning er også relevant i forbindelse med geokemisk dataanalyse, som udføres i anden sammenhæng end den nationale grundvandskortlægning, f.eks. i forbindelse med forsknings- og udviklingsprojekter.

2.4 Terminologi

Det er valgt at introducere nogle begreber, som anbefales anvendt i forbindelse med den kemiske grundvandskortlægning. Begreberne er tænkt som en hjælp til at overskue den kemiske grundvandskortlægning og inddele arbejdsprocessen i faglige rationelle trin. Anvendelse af begreberne skal være med til at sikre fremdrift og dokumentation af resultaterne.

Begrebet modeller vil blive brugt som et bredt dækkende udtryk, der udgør en præsentation af en samlet syntese af en række resultater og tolkninger.

Den kemiske model på eksisterende data (trin 1b)

"Den kemiske model på eksisterende data" er en redegørelse af forskellige grundvandsmagasiners geokemiske forhold indenfor kortlægningsområdet, som de kan beskrives på baggrund af eksisterende data. Der vil blive lagt vægt på:

- At beskrive datagrundlaget
- At kvalitetssikre data
- At beskrive vandværkerne og vandindvindingen
- At identificere problemstoffer
- At lave en prøvetagningsstrategi

- At præsentere de eksisterende kemiske data
- At sammentolke med arealmæssige data
- At sammentolke med "Den geologiske forståelses model"

"Den kemiske model på eksisterende data" bygger selvsagt på eksisterende data genereret uafhængigt af den nationale grundvandskortlægning. "Den kemiske model på eksisterende data" vil udgøre en syntese af de eksisterende geokemiske resultater fra kortlægningsområdet tolket i forhold til den "Den geologiske forståelsesmodel", der er et resultat af den indledende geologiske modellering i området (Jørgensen m.fl., 2008).

På baggrund af "Den kemiske model på eksisterende data" laves der en prøvetagningsstrategi for indsamling af nye nødvendige kemiske data. Denne prøvetagningsstrategi skal baseres på en analyse af behovet for nye kemiske kortlægningsdata, der er nødvendige for at opnå en tilfredsstillende geokemisk forståelse af grundvandsmagasinerne i kortlægningsområdet. Den nødvendige databehandling vil blive nærmere præciseret i de efterfølgende kapitler. "Den kemiske model på eksisterende data" rapporteres i forbindelse med trin 1b kortlægningen.

Nye kemiske kortlægningsresultater (trin 2a)

Udmøntningen af prøvetagningsstrategien under trin 1b vil resultere i "Nye kemiske kortlægningsresultater". Denne prøvetagningsstrategi baseres på analyse af behovet for nye kemiske kortlægningsdata, der er nødvendige for at opnå en tilfredsstillende geokemisk forståelse af grundvandsmagasinerne i kortlægningsområdet. Der vil blive lagt vægt på:

- At beskrive det nye datagrundlag
- At kvalitetssikre de nye data
- At opstille et analyseprogram
- At forberede og udføre borearbejde og prøvetagning
- At udføre sediment- og vandkemiske laboratorieanalyser
- At præsentere de nye data
- At beskrive vandkemi, sedimentkemi og lithologi for hver af de nye borer

"Nye kemiske kortlægningsresultater" udgør præsentationer af de nye kemiske data produceret i forbindelse med kortlægningen. Disse præsentationer vil blive nærmere præciseret i de efterfølgende kapitler. "Nye kemiske kortlægningsresultater" rapporteres i forbindelse med trin 2a-kortlægningen.

Den hydro-geokemiske model (trin 2b)

"Den hydro-geokemiske model" er en redegørelse af forskellige grundvandsmagasiners geokemiske forhold indenfor kortlægningsområdet, som de kan beskrives på baggrund af eksisterende og nye data. Der vil blive lagt vægt på:

- At beskrive datagrundlaget
- At kvalitetssikre data
- At præsentere data
- At identificere betydende forureningsstoffer og naturlige stoffer i grundvandet

- At beskrive væsentlige geokemiske processer
- At beskrive den tidslige udvikling
- At vurdere alderen af grundvandet
- At sammentolke med den "Hydrostratigrafiske model"

"Den hydro-geokemiske model" bygger på eksisterende data og de nye kemiske kortlægningsresultater produceret i forbindelse med kortlægningen i området. "Den hydro-geokemiske model" vil udgøre en syntese af alle de geokemiske resultater fra kortlægningsområdet tolket i forhold til "Den hydrostratigrafiske model", som er et slutresultat af den geologiske modellering i området (Jørgensen m.fl., 2008).

"Den hydro-geokemiske model" vil udgøres af forskellige præsentationer og tolkninger af de geokemiske data, samt konceptuelle tværsnit eller 3-D præsentationer. Indholdet af disse udgør en sammentolkning af de geokemiske resultater med de hydrologiske og geologiske resultater. De specifikke præsentationer og tolkninger vil blive nærmere præciseret i de efterfølgende kapitler. "Den hydro-geokemiske model" rapporteres i forbindelse med trin 2b-kortlægningen.

3. Arbejdsgangen ved kemisk grundvandskortlægning

3.1 De fire trin og to modeltyper

Det anbefales, at den kemiske grundvandskortlægning udføres trinvis, og at der opbygges to forskellige typer af modeller, som bygger på et forskelligt datagrundlag (se figur 3.1). Dermed opbygges den geokemiske viden om kortlægningsområdet gradvis. Denne systematisering har til formål at gøre den grundvandskemiske kortlægning overskuelig og vejlede geokemikeren gennem arbejdsprocessen. De fire trin og to modeltyper er:

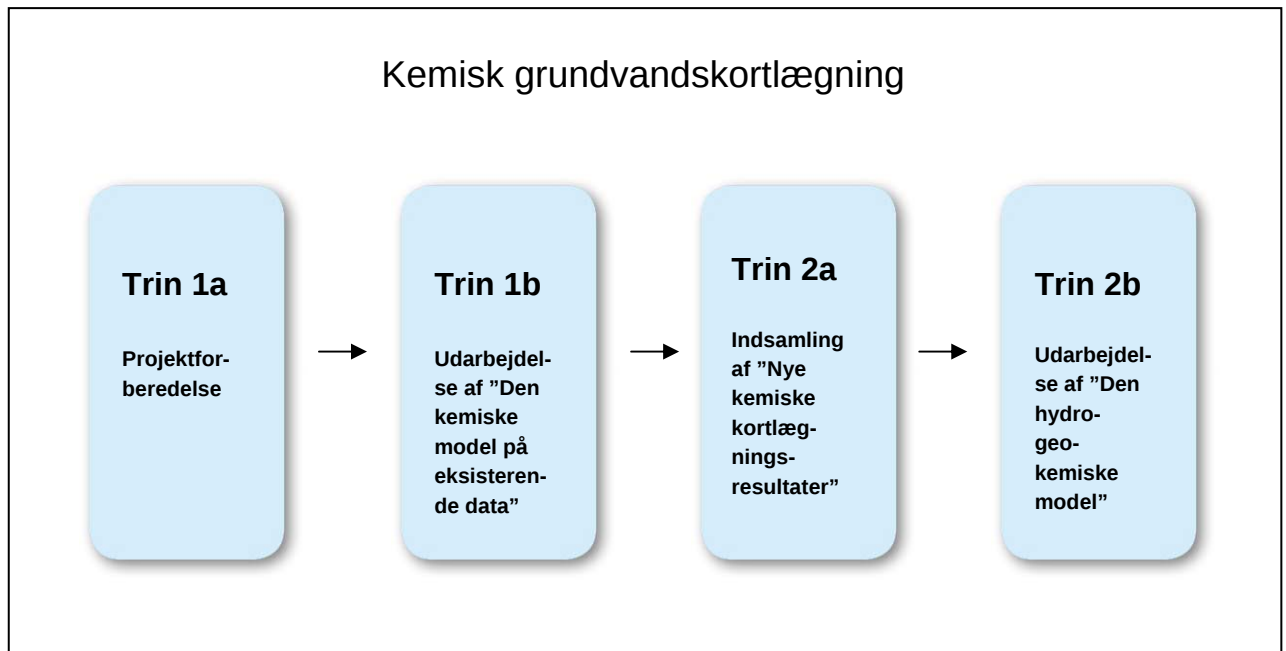
1. Projektforberedelse (trin 1a)
2. Den kemiske model på eksisterende data (trin 1b)
3. Nye kemiske kortlægningsresultater (trin 2a)
4. Den hydro-geokemiske model (trin 2b)

Opbygning af de to modeller under den kemiske grundvandskortlægning er sammentænkt med anbefalinger til opstilling af geologiske modeller fra Jørgensen m.fl. (2008).

Inddelingen i to modeltyper skal medvirke til at højne kvaliteten af den kemiske grundvandskortlægning og skabe en mere ensartet behandling af de kemiske data i den nationale grundvandskortlægning. Samtidig er målet med 4-trinsdelingen, at der opnås en fælles og klar forståelse af, hvad en kemisk grundvandskortlægning skal indeholde.

I tabel 3.1 er vist en oversigt over indholdet af en kemisk grundvandskortlægning. Under trin 1a foregår der en projektforberedelse. "Den kemiske model på eksisterende data" udføres under trin 1b, "Nye kemiske kortlægningsresultater" under trin 2a og "Den hydro-geokemiske model" under trin 2b.

I de næste afsnit vil det nærmere indhold i de to modeltyper og de fire kortlægningstrin blive detaljeret beskrevet. Ligeledes vil der blive fokuseret på usikkerhedsvurderinger, og der vil blive givet nogle generelle anbefalinger til arbejdsgangen i den kemiske grundvandskortlægning.



Figur 3.1. Flowdiagram, som viser arbejdsgangen i en kemisk grundvandskortlægning.

3.2 Trin 1a: Projektforberedelse

Under trin 1a skal der indledningsvis ske en projektforberedelse inden den egentlige kemiske grundvandskortlægning sættes i gang. Formålet er at sikre fremdrift i den kemiske grundvandskortlægning.

Miljøcentret skal under projektforberedelsen tage kontakt til relevante kommuner og evt. relevante vandværker med henblik på at sikre, at alle væsentlige data (nyere og ældre) er tilgængelige i JUPITER inden selve projektstarten under trin 1b. Dette er nærmere beskrevet i kapitel 4.

Under projektforberedelsen skal miljøcentret også afklare med kommunen, i hvilket omfang der er behov for udarbejdelse af vandværksbeskrivelser for alle eller nogle vandværker under den kemiske grundvandskortlægning, som beskrevet i kapitel 5. Dette er vigtigt i forhold til at afklare, om opgaven med vandværksbeskrivelser skal udbydes til en rådgiver.

Projektforberedelsen inkluderer desuden miljøcenterets udformning af udbud, tilbud fra rådgiveren og kontraktudformning.

3.3 Trin 1b: Den kemiske model på eksisterende data

Formål

Under trin 1b skal "Den kemiske model på eksisterende data" opstilles. Formålet er at skabe et overblik over den eksisterende kemiske viden i forhold til den geologiske opbygning og drikkevandsinteresserne i kortlægningsområdet. På den baggrund skal eventuelle problemstoffer i kortlægningsområdet identificeres. Desuden skal behovet for nye kemiske kortlægningsdata beskrives ud fra bl.a. en vurdering af datatætheden og lokale kemiske

problemstoffer, og der skal udarbejdes en prøvetagningsstrategi for fremskaffelse af disse data.

Datagrundlag

Datagrundlaget for "Den kemiske model på eksisterende data" består af:

- "Den geologiske forståelsesmodel" for området i form af beskrivelser, figurer og principskitser.
- Grundvands- og drikkevandsanalyser fra JUPITER,
- Farvebeskrivelser af jordlagene i borerne fra JUPITER.

"Den geologiske forståelsesmodel" for området opstilles som regel uafhængigt af den grundvandskemiske kortlægning. Når grundvandskemien skal sammentolkes med "Den geologiske forståelsesmodel" er det vigtigt, at det sker i samarbejde med geologen, der har opstillet modellen.

Datahåndtering

De eksisterende data skal under trin 1b håndteres som beskrevet i kapitel 4, hvilket inkluderer følgende:

1. Overførsel fra JUPITER
2. Dokumentation og accept af data
3. Dataforberedelse

Det er vigtigt at opspore eventuelle kemiske analyser og vandværksoplysninger (f.eks. nye indvindingsboringer), som ikke findes i JUPITER ved første dataoverførsel. Relevante manglende data skal så vidt muligt lægges i JUPITER, inden et nyt dataudtræk laves under trin 2b.

Datagrundlaget for "Den kemiske model på eksisterende data" vil udover de eksisterende kemiske data også udgøre viden om den overordnede geologi i området. Den geologiske viden tilgås ved samarbejde med geologen, som opstiller "Den geologiske forståelsesmodel" for området.

Når datagrundlaget er accepteret af miljøcentret, kan den videre dataanalyse gå i gang. I forbindelse med den afsluttende del af datahåndteringen skal der ske en dataforberedelse, hvor de kemiske data opdeles i forhold til forskellige grundvandsmagasiner i området. Derudover skal en række kemiske parametre beregnes eller estimeres. De beregnede kemiske parametre for grundvandet inkluderer vandtype, forvitningsgrad, ionbytningsgrad, kalkmætningsgrad og hårdhed. De estimerede parametre for grundvandssedimentet inkluderer nitratfront og nitratreduktionskapacitet. Dataforberedelsen er detaljeret beskrevet i kapitel 4.

Vandindvinding

Opstilling af "Den kemiske model på eksisterende data" indbefatter en beskrivelse af den overordnede drikkevandskvalitet inden for kortlægningsområdet. Derudover skal der foreligge en vandværksbeskrivelse for hvert almene offentlige og private vandværk inden for kortlægningsområdet. Beskrivelse af vandindvindingen i kortlægningsområdet er nærmere beskrevet i kapitel 5.

		Trin 1a	Trin 1b	Trin 2a	Trin 2b
Emne	Aktivitet	Projekt-forberedelse	Den kemiske model på eksisterende data	Nye kemiske kort-lægnings-resultater	Den hydro-geokemiske model
Kontraktforhold	Udbud, tilbud og kontrakt	•			
Datagrundlag	Dataindberetning	•			
	Eksisterende data		•		•
	Nye undersøgelsesdata			•	•
Datahåndtering	Dataoverførsel og udvælgelse		•	•	•
	Dokumentation og accept af data		•		•
	Dataforberedelse		•	•	•
Vandindvinding	Vandværksbeskrivelser		•		
	Identifikation af problemstoffer		•		
	Overordnet beskrivelse		•		
Indsamling af nye data	Prøvetagningsstrategi		•		
	Analyseprogram			•	
	Borearbejde			•	
	Prøvetagning			•	
	Sedimentkemiske analyser			•	
	Vandkemiske analyser			•	
Præsentationer	Andre datatyper		•	•	•
	Udvalgte kemiske præsentationer		•	•	•
Tolkninger	Forureningsstoffer				•
	Naturlige stoffer				•
	Geokemiske processer				•
	Tidslig udvikling				•
	Aldersvurdering				•
Sammen-tolkninger	Til arealmæssige data		•		
	Til "Den geologiske forståelses-model"		•		
	Til geologiske og hydrologiske data på boringsniveau			•	
	Til "Den hydrostratigrafiske model"				•
Kvalitetssikring	Datakontrol		•	•	•
	Usikkerhedsvurdering		•	•	•
Slutprodukter	Accept af datagrundlag		•		•
	Prøvetagningsstrategi		•		
	Rapport		•	•	•

Tabel 3.1. Oversigt over indholdet i en kemisk grundvandskortlægning (bemærk at listen ikke er kronologisk, her henvises til tabel 3.2).

Kommunerne er ansvarlig myndighed i forhold til vandforsyningerne hvad angår fysisk tilsyn, vandkvalitet og indvindingstilladelser jfr. BEK nr. 1664 af 14/12/2006 om vandkvalitet og tilsyn med vandforsyningsanlæg. Typisk vil kommunernes vandforsyningsplaner indeholde en vandværksbeskrivelse, som består af en gennemgang af vandværkernes fysiske forhold, deres vandkvalitet og vandbehandlingsanlæg. Desuden indeholder vandforsyningsplanerne også informationer om planer for den fremtidige vandforsyningsstruktur i området. Disse informationer fra kommunerne skal indsamles forud for en beskrivelse af vandindvindingen i kortlægningsområdet.

Prøvetagningsstrategi

Den kemiske trin 1b-kortlægning skal resultere i en prøvetagningsstrategi, som baseres på en analyse af behovet for nye kemiske kortlægningsdata i forhold til de 3-dimensionelle grundvandsmagasiner i det aktuelle område (se kapitel kapitel 6).

Præsentationer

I forbindelse med opstilling af "Den kemiske model på eksisterende data" skal der laves en række præsentationer af data. Disse præsentationer er detaljeret beskrevet i kapitel 7.

Præsentationen af de kemiske data skal resultere i identifikation af eventuelle kemiske problemstoffer i kortlægningsområdet. Denne identifikation er vigtig for fokuseringen af den efterfølgende kemiske grundvandskortlægning under trin 2 inkl. valg af kemisk analyseprogram til de nye undersøgelser under trin 2a.

Sammentolkninger

Under trin 1b skal der ske en sammentolkning af de grundvandskemiske data med arealmæssige data som f.eks. kendte forureningskilder samt kvælstofbelastningen og pesticidforbruget fra jordbrugsproduktionen. Dette sker for at identificere problemstofferne og foregår ved udarbejdelse af GIS-kort, som beskrevet i kapitel 9.

Desuden skal der under trin 1b ske en sammentolkning af de grundvandskemiske data med "Den geologiske forståelsesmodel". Denne sammentolkning skal resultere i en indledende forståelse for grundvandsmagasinernes kemiske tilstand, identifikation af behovet for nye kemiske data og identifikation af problemstoffer i undersøgelsesområdet.

Slutprodukter

"Den kemiske model på eksisterende data" skal resultere i 3 slutprodukter:

1. Skriftlig accept af datagrundlaget fra miljøcentret inden den egentlige databehandling går i gang under trin 1b.
2. Mindre rapport om behovet for yderligere data og prøvetagningsstrategi for produktion af nye kemiske kortlægningsresultater under trin 2a.
3. Opsamlingsrapport (se paradigma i bilag A1) som indbefatter alle resultaterne fra trin 1b's opstilling af "Den kemiske model på eksisterende data".

3.4 Trin 2A: Nye kemiske kortlægningsresultater

Formål

Under trin 2a behandles "Nye kemiske kortlægningsresultater". Formålet er at fremskaffe ny kemisk viden om grundvandsmagasinerne på baggrund af prøvetagningsstrategien fra trin 1b, sådan at grundvandskortlægningen opnår et tilstrækkeligt fagligt detaljeringsniveau.

Datagrundlag

Databehandlingen i forbindelse med trin 2a bygger kun på de nye kortlægningsdata, som genereres under den kemiske grundvandskortlægning i området.

Indsamling af nye data

Prøvetagningsstrategien fra trin 1b kortlægningen danner baggrund for tilrettelæggelse af feltarbejdet til fremskaffelse af de nye kemiske kortlægningsdata, som inkluderer:

1. Udvælgelse af lokaliteter
2. Valg af feltmetoder
3. Vand- og sedimentkemisk analyseprogram

Feltarbejde, prøvetagning og laboratorieanalyse af vand- og sedimentkemi finder sted under trin 2a arbejdet med "Nye kemiske kortlægningsresultater".

Alle de nye kemiske kortlægningsdata skal kvalitetssikres og lagres i JUPITER, som beskrevet i kapitel 6.

Datahåndtering

Datausikkerheden af de nye kemiske kortlægningsdata skal beskrives. Der skal ske en kvalitetssikring af de nye data både med hensyn til ID og faglig kvalitetsvurdering af de enkelte analyseparametre. I forbindelse med databehandlingen af de nye kemiske data skal disse opdeles i forhold til forskellige grundvandsmagasiner i området.

Derudover skal der ske en dataforberedelse, hvor en række kemiske parametre beregnes eller estimeres for de nye kemiske kortlægningsdata. De beregnede kemiske parametre for grundvandet inkluderer vandtype, forvitringsgrad, ionbytningsgrad, kalkmætningsgrad og hårdhed. De estimerede parametre for grundvandssedimentet inkluderer nitratfront, nitratreduktionskapacitet og evt. forsuringsfront. Databehandlingen er detaljeret beskrevet i kapitel 4.

Præsentationer

I forbindelse med "Nye kemiske kortlægningsresultater" skal der laves en række præsentationer af data. Disse præsentationer er detaljeret beskrevet i kapitel 7.

Slutprodukt

"Nye kemiske kortlægningsresultater" skal resultere i ét slutprodukt:

1. En opsamlingsrapport (se paradigma i bilag A2) som indbefatter alle de nye kemiske resultater fra trin 2a.

3.5 Trin 2B: Den hydro-geokemiske model

Formål

Under trin 2b skal "Den hydro-geokemiske model" opstilles. Formålet med "Den hydro-geokemiske model" er, på baggrund af samtlige geokemiske data, at skabe en samlet forståelse for hydro-geokemien i kortlægningsområdet på et tilstrækkeligt fagligt detaljeringsniveau for grundvandskortlægningen. Modellen udgøres af en syntese af alle de geokemiske resultater tolket i forhold til områdets geologiske og hydrologiske forhold.

Datagrundlag

Data som bruges i forbindelse med opstilling af "Den hydro-geokemiske model" bygger både på de eksisterende data og de nye kortlægningsdata, som genereres under den kemiske grundvandskortlægning i området.

Datahåndtering

I den kemiske grundvandskortlægning under trin 2b er det nødvendigt at foretage en ny dataoverførsel fra JUPITER for at opnå et komplet datasæt, som også inkluderer de nye kemiske data og eventuelle nyindberettede data fra kommuner. Det nye datagrundlag skal accepteres af miljøcenteret, inden den kemiske dataanalyse går i gang. Dette er nærmere beskrevet i kapitel 4.

Datagrundlaget for "Den hydro-geokemiske model" vil, udover de eksisterende kemiske data og de nye kemiske kortlægningsresultater, også udgøre viden om den overordnede hydrostratigrafi i området. Denne viden tilgås ved tæt samarbejde med geologen, som opstiller "Den hydrostratigrafiske model" for området.

Præsentationer

I forbindelse med opstilling af "Den hydro-geokemiske model" skal der laves en række præsentationer. Disse præsentationer er detaljeret beskrevet i kapitel 7.

Tolkninger

Opbygningen af "Den hydro-geokemiske model" indebærer en række geokemiske tolkninger af data som inkluderer beskrivelse af følgende forhold:

- Identifikation af miljøfremmede stoffer
- Identifikation af naturligt forekommende kemiske stoffer
- Identifikation af betydende geokemiske processer i grundvandet
- Vurdering af grundvandets alder og frontbevægelser (f.eks. nitrat- og forsuringsfronter)

Disse tolkninger er detaljeret beskrevet i kapitel 8.

Sammentolkninger

I "Den hydro-geokemiske model" for kortlægningsområdet er der sket en sammentolkning af geokemiske, geologiske, geofysiske og hydrologiske forhold. Sammentolkningen af disse data udføres bl.a. ved udarbejdelse af konceptuelle tværsnit og eventuelt også 3-D præsentationer. Disse sammentolkningsmuligheder er nærmere beskrevet i kapitel 9.

Slutprodukt

Det endelige produkt af hele den kemiske grundvandskortlægning er:

1. Skriftlig accept af datagrundlaget fra miljøcentret inden databehandlingen går i gang under trin 2b.
2. En dokumentationsrapport (se paradigma i bilag A3), hvor hele det kemiske kortlægningsforløb dokumenteres og "Den hydro-geokemiske model" for kortlægningsområdet præsenteres.

3.6 Generelle anbefalinger til arbejdsgangen

Geo-vejledningen skal bruges som inspiration til miljøcentrenes udformning af udbudsmateriale til den kemiske grundvandskortlægning under trin 1 og trin 2. Udbudene vil variere fra område til område afhængig af områdernes størrelse, den geokemiske problemstilling og krav til datatæthed. Udover indholdet i de 4 trin og 2 kemiske modeltyper, som er beskrevet i de foregående afsnit, vil der i dette afsnit blive givet nogle generelle anbefalinger til arbejdsprocessen omkring den kemiske grundvandskortlægning.

Den iterative tolkningsproces

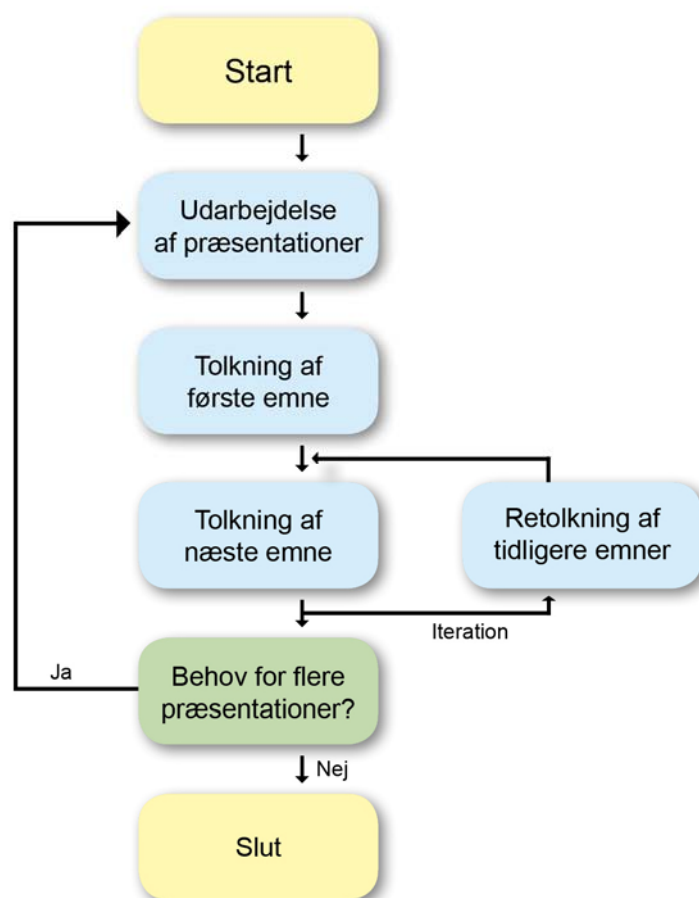
Tolkning af kemiske data vil foregå ved en iterativ proces, hvor oplysninger, der fremkommer fra forskellige dele af arbejdet, influerer på hinanden. Derfor kan der ikke opstilles en liste af aktiviteter, der udføres i en bestemt rækkefølge. Dog anbefales det, at der startes med udarbejdelse af præsentationerne, som er nærmere beskrevet i kapitel 7, således at de er tilgængelige for fortolkningen, som er nærmere beskrevet i kapitel 8 og sammentolkningen, som er beskrevet i kapitel 9. Figur 3.2 skitserer denne fremgangsmåde.

Det generelle formål med tolkning af de kemiske resultater i de 4 trin og 2 modeltyper, er at forstå de processer, der er årsagen til grundvandets kemiske sammensætning. På dette grundlag skal det være muligt at vurdere karakteren af den påvirkning, som grundvandet eventuelt har været udsat for, og som kan reguleres i forbindelse med indsatsplanlægningen. Mere konkret er formålet at forstå de vigtigste geokemiske processer og identificere eventuelle kritiske menneskeskabte og naturlige kemiske stoffers rumlige og geografiske udbredelse.

Miljøcentrets samarbejdsrelationer

I hele forløbet med den kemiske grundvandskortlægning er det miljøcentret som har projektledelsen og dermed er initiativtager til samarbejde med rådgiver, kommune, vandværker og andre interessenter.

Det er miljøcentrets ansvar at afholde et passende antal dialogmøder, som foreslået i tabel 3.2. Under trin 1a anbefales det, at miljøcentret holder et indledende møde med kommuner og evt. vandværker, hvor formålet er at opfordre til indberetning af kemiske data, som ikke allerede findes i JUPITER og få overblik over behovet for vandværksbeskrivelser.



Figur 3.2 Den iterative fremgangsmåde ved tolkning af kemiske data.

Dernæst skal der holdes et opstartsmøde mellem miljøcentret og rådgiveren inden opstarten af den kemiske grundvandskortlægning. Derudover holdes der møder mellem miljøcentret og rådgiver afhængig af behovet i den enkelte grundvandskortlægning. Det anbefales, at der afslutningsvis holdes et møde mellem miljøcentret og rådgiveren, hvor rådgiveren præsenterer det færdige produkt af den kemiske grundvandskortlægning.

Samarbejde mellem geokemiker og geolog

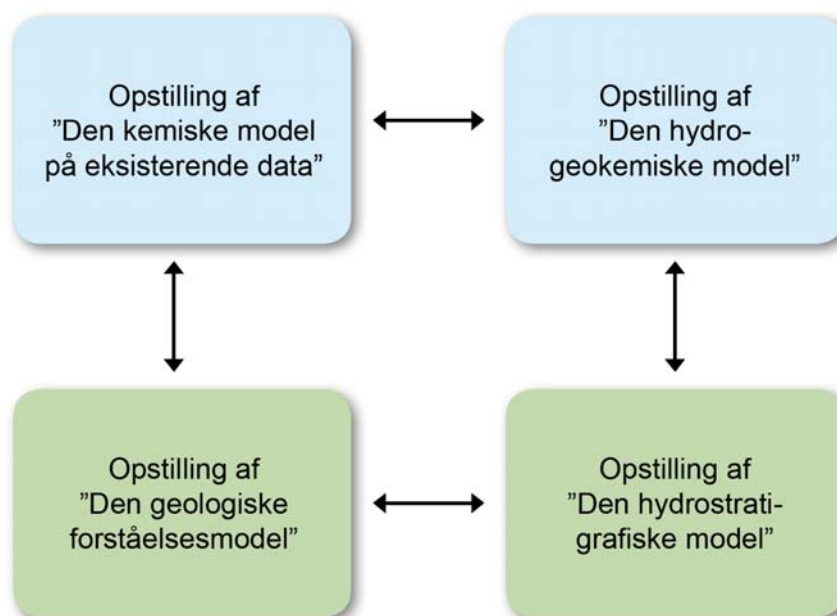
Opstilling af de to typer kemiske modeller (se figur 3.1) udføres bedst af den samme rådgiver for at sikre en optimal udnyttelse og en god dynamik i opbygningen af den geokemiske viden om kortlægningsområdet.

Opstilling af "Den kemiske model på eksisterende data" kræver, at der indhentes viden om "Den geologiske forståelsesmodel" for kortlægningsområdet.

Ligeledes kræver opbygningen af "Den hydro-geokemiske model", at der sammentolkes med "Den hydrostratigrafiske model" for området.

Det vil sige, at der gennem hele det kemiske grundvandskortlægningsforløb er brug for et tæt samarbejde med geologen, som opstiller de geologiske modeller for at opnå det bedste faglige resultat. Dette samarbejdsbehov er gensidigt, idet geologen på den anden side også har brug for et godt samarbejde med geokemikeren for at opbygge de geologiske modeller på det bedste faglige grundlag.

Det er derfor en fordel, hvis den kemiske grundvandskortlægning og opstilling af de geologiske modeller foregår på samme tid og allerbedst af samme rådgiver, således at der er mulighed for at samarbejde og at udveksle viden. Dette samarbejde kan foregå ved en iterativ proces, som vist i figur 3.3.



Figur 3.3. Princip skitse for den iterative proces ved udveksling af viden mellem geokemikeren og geologen under udarbejdelse af kemiske og geologiske modeltyper.

Afgrænsning af området

Afgrænsning af det kemiske grundvandskortlægningsområde foretages af miljøcentret og medtages i udbuddet. Det kemiske grundvandskortlægningsområde vil tage udgangspunkt i et Område med Særlige Drikkevandsinteresser (OSD) og indvindingsområder til almene vandværker uden for OSD. Det anbefales, at der udlægges en bufferzone omkring OSD-området afhængig af den kemiske datatæthed i randområderne af grundvandskortlægningsområdet og de aktuelle kemiske problemstillinger i området som f.eks. beligheden af lossepladser og andre jordforureninger.

Varighed af kemisk grundvandskortlægning

En kemisk grundvandskortlægning vil typisk tage 1-2 år. Forhold som vil medvirke til en smidig, effektiv og hurtig kemisk kortlægning er f.eks.:

1. Klar og præcis problemformulering i udbuddet, som tager udgangspunkt i den geo-vejledning
2. Let datatilgængelighed
3. Hurtig accept af data

- Godt samarbejde med geologen som udfører den geologiske modellering i området
- Koordinering af borearbejde med øvrige geologiske kortlægningsaktiviteter

Kvalitetssikring

De færdige rapporter bør kvalitetssikres. Kvalitetssikringen bør foretages af en geokemisk kyndig person, der ikke har været involveret i arbejdet.

Ansvars- og rollefordeling mellem miljøcenter og rådgiver

I tabel 3.2 gives anbefalinger til ansvars- og rollefordelingen mellem miljøcenter (grøn farve) og rådgiver (rød farve). Aktiviteterne, der skal foregå, er markeret med et A i kronologisk rækkefølge fra A1 til A10, mens milepælene er markeret med M i kronologisk rækkefølge fra M1 til M11.

Aktiviteterne A1, A5, A6 og A7 er i tabel 3.2 vist som værende miljøcentrets ansvarsområde. Miljøcentret vil ofte vælge at udlicitere opgaverne A5-A7 til andre rådgivere som f.eks. brøndborefirma og analyselaboratorium. Ligeledes kan miljøcenteret i nogle tilfælde vælge selv at udføre flere af rådgiveraktiviteterne, som er vist med rødt.

	Trin 1a	Trin 1b	Trin 2a	Trin 2b
Kontraktforhold	M1: Udbud M2: Tilbud M3: Kontrakt	M4: Accept af datagrundlag M8: Godkendelse af trin 1b rapport	M10: Godkendelse af trin 2a rapport	M12: Godkendelse af trin 2b rapport
Data	A1: Kontakt til kommuner og vandværker ang. indberetning af data og behov for vandværksbeskrivelse	A2: Dataudtræk fra JUPITER A3: Datahåndtering		A9: Dataudtræk fra JUPITER
Indsamling af nye kemiske data			A5: Udførelse af feltarbejde A6: Prøvetagning A7: Laboratorieanalyse	
Dataanalyse		A4: Dataanalyse	A8: Analyse af nye kemiske data	A10: Dataanalyse
Rapportering		M5: Datadokumentation M6: Prøvetagningsstrategi M7: Trin 1b resultater	M9: Trin 2a resultater	M11: Trin 2b resultater
Dialog	Møde mellem MC og kommuner og evt. vandværker	Opstartsmøde mellem MC og rådgiver		Afslutningsmøde mellem MC og rådgiver
Projektledelse	MC			

Tabel 3.2 Et typisk kortlægningsforløb hvor rolle- og ansvarsfordeling mellem miljøcenter (grøn farve) og rådgiver (rød farve) er vist. Aktiviteterne er markeret med et A i kronologisk rækkefølge fra A1 til A10, mens milepælene er markeret med M i kronologisk rækkefølge fra M1 til M11.

4. Datahåndtering

4.1 Datagrundlag

Kemisk grundvandskortlægning er baseret på eksisterende data i Trin 1 og på summen af nye og eksisterende data i Trin 2. I begge tilfælde er der behov for sammentolkning af kemiske data med data fra andre fagområder, herunder geologi, hydrogeologi og arealanvendelse, se kapitel 9. I det nuværende kapitel er der alene fokus på kemiske og nærtbeslægtede data.

En oversigt over de vigtigste kemiske data, der er brug for i en kemisk grundvandskortlægning, vises i tabel 4.1. Tabellen viser samtidig, hvor disse data normalt findes. Med undtagelse af data i JUPITER, foreslås at disse data indhentes af miljøcentret, så de er klar til brug i forbindelse med udbud og gennemførelse af kortlægningen.

Type	Data	Kilde
Vandværker	Vandforsyningsplaner, indvindingstilladelser, tilstandsvurderinger på vandværker	Kommunen
Boringer	DGU nummer, koordinater (x, y og z), dybden til indtagenes top- og bund, magasinbjergart, boringens anvendelse ved etablering	JUPITER
Vandprøver	Prøvetagningsdato, måleparameter, prøveforberedelse (filtrering), analyseresultater, attribut ("<"-tegnet), enheder, detektionsgrænse, analysemetode	JUPITER Kommuner/vandværker (ikke indberettede data)
Sedimentprøver	Borejournaler med angivelse af sedimentfarve, sedimentkemiske analyseresultater (pyrit, organisk stof, Fe(III), o.l.)	JUPITER/rapporter

Tabel 4.1 Oversigt over de vigtigste data til en kemisk grundvandskortlægning og deres kilder.

Nogle data findes ikke direkte i JUPITER, men skal udledes af andre data. Dette drejer sig om magasintilhørsforhold for boringsindtag, redox vandtype, beregnede vandkemiske parametre og dybden til farveskift. Disse omtales i afsnit 4.4.

Det anbefales, at der kun anvendes kemiske analyser, der findes i JUPITER. Hvis væsentlige data mangler i JUPITER, bør disse indberettes inden kortlægningen begynder af de dataansvarlige ifølge Dataansvarsaftalen (2007). Formålet med denne anbefaling er:

- At sikre, at data bliver tilgængelige for det pågældende projekt og evt. fremtidige projekter
- at undgå, at den kemiske grundvandskortlægning går i stå, efter den er påbegyndt som følge af manglende data
- At undgå arbejdet med at flette analyseresultater fra flere kilder, da dette arbejde ofte ikke står mål med gevinsten
- At sikre, at alle data dermed bliver omfattet af en kvalitetssikring

Denne anbefaling medfører, at miljøcentret bør tage kontakt til den (de) relevante kommune(r) og evt. til relevante vandværker i forbindelse med projektforbereðelsen under trin 1a inden opgaven udbydes (se aktivitet A1 i tabel 3.2).

Nyere data som endnu ikke er indberettet til JUPITER

I nogle tilfælde vil kontakt til kommunen/vandværker afsløre, at der findes nyere data, der endnu ikke er indberettet og/eller godkendt i JUPITER. I denne situation skal miljøcentret beslutte, om de manglende data er så væsentlige, at opstart af kortlægningen skal afvente, at situationen udbedres.

Udbedring kræver ikke nødvendigvis en stor arbejdsindsats, men kan tage lang tid, da processen involverer flere instanser. Normalt vil det være bedst, at dataene indberettes og godkendes via de sædvanlige kanaler (Dataansvarsaftalen, 2007).

Ældre data som kun findes som papiranalyser

Der har været udført kemiske analyser på vandprøver fra grundvand og drikkevand i Danmark i mere end 100 år. En del af de ældste analyser findes kun i sagsmapper eller rapporter, og er aldrig blevet overført i elektronisk form til JUPITER. Disse "papiranalyser" vil typisk kunne findes i amternes og kommunernes gamle sagsmapper, og vil ofte stamme fra lukkede vandværker, men kan også stamme fra eksisterende vandværker, nyere markvandsboringer og enkeltindvindere. Hvis ældre data findes, skal miljøcentret beslutte, om de manglende data er så væsentlige, at opstart af kortlægningen skal afvente, at situationen udbedres.

Den vurdering kan baseres på følgende spørgsmål:

- a) Bidrager de fundne data væsentligt til kortlægningen?
- b) Står arbejdsindsatsen mål med de ekstra informationer, der opnås?
- c) Er kvaliteten i orden (f. eks. er resultaterne identificeret med DGU nr., kendes boringernes filtersætninger og er der anvendt relevante detektionsgrænser)?

Såfremt det besluttet, at disse ældre data skal indgå i kortlægningen, skal miljøcentret sikre sig, at dataene indberettes til JUPITER. Ved ældre data vil laboratorierne ikke nødvendigvis være i stand til at indlæse de gamle data elektronisk til JUPITER. Hvis data ikke kan indlæses elektronisk kan miljøcentret bidrage med digitalisering og inddatering. Inddateringen kan enten foregå ved hjælp af fagsystemmet (f.eks. GeoGIS 2005) eller ved upload af en standatfil. Ved inddatering via fagsystemmet skal udvises særlig omhu ved indtastning af data og angivelse af enheder m.v., da der foretages færre kontroller af data end ved indlæsning fra standat (GEUS, 2009).

Anvendelse af ældre data

Ældre data kan normalt direkte anvendes til udarbejdelse af tidsserier med henblik på at beskrive eventuelle udviklinger i vandkvaliteten. I visse tilfælde, kan ældre data også anvendes til udbedring af områder/dybder med ringe geografisk datadækning med henblik på at beskrive vandkvalitetens aktuelle status. Ved den sidstnævnte anvendelse skal man dog være særlig påpasselig, da de gamle data kan være misvisende for den aktuelle vandkvalitet. Da den overordnede grundvandskvalitet ofte ikke ændrer sig ret hurtigt i et magasin,

der ikke er påvirket af indvinding, kan ældre data dog ofte indgå uproblematisk i den geokemiske vurdering.

Man skal være særlig påpasselig ved anvendelse af ældre data til forbedring af den geografiske datadækning i følgende situationer:

1. Nitratholdigt grundvand - ældre data kan normalt anvendes til fastlæggelse af grundvandets redoxforhold, men ikke til den aktuelle nitratkoncentration.
2. Områder påvirket af en større indvinding - her kan vandkvaliteten ændre sig hurtigere end områder uden påvirkning fra indvinding.

Nye data fra undersøgelsesboringer

Det er vigtigt, at nye kemiske data fra undersøgelsesboringer udført i den aktuelle kortlægning (trin 2a) hurtigt indberettes af laboratoriet, så data kan godkendes af miljøcentrene inden udtræk under trin 2b.

4.2 Dataoverførsel og -udvælgelse

Ved starten af en trin 1b kortlægning og igen ved starten af en trin 2b kortlægning, skal der ske en overførsel af data fra JUPITER.

JUPITER

Hovedparten af data, som skal bruges til den kemiske grundvandskortlægning, ligger i den fællesoffentlige del af PCJUPITERXL. PCJUPITERXL er en udvidelse af PCJUPITER og indeholder oplysninger om såvel boringer (teknisk opbygning, geologisk beskrivelse, vandstandspeglinger og grundvandskemiske analyser) som vandindvindingsanlæg (drikkevandskemiske analyser, oppumpede vandmængder og tilladelser til vandindvinding).

Analysedata i PCJUPITERXL kan ses på internettet via internetadressen <http://www.geus.dk/JUPITER/index-dk.htm>. Her er der f. eks. mulighed for at udtrække alle analyseresultater fra en enkelt vandprøve. Desuden kan man få vist en tidsserie for en enkelt parameter i et enkelt indtag. Miljøcentrene har også mulighed for at vise temakort, der på forhånd er fastlagt (Mahrt, 2008). På nuværende tidspunkt er denne tjeneste dog ikke offentlig tilgængelig. Med tiden kan man forestille sig, at disse muligheder vil udbygges endnu mere og gøres tilgængelige for alle parter i kortlægningen.

Data overføres fra JUPITER til videre bearbejdelse.

Udvælgelse baseret på administrative grænser

For at begrænse mængden af overførte data anbefales, at der kun overføres data fra et bestemt geografisk område. PCJUPITERXL giver mulighed for at udvælge data på baggrund af følgende administrative grænser:

- Kommune
- Miljøcenter
- Hele Sjælland
- Hele Jylland

- Hele landet

Det anbefales, at man benytter sig af en udvælgelse baseret på et miljøcenter eller en eller flere kommuner. I forbindelse med udvælgelsen er det vigtigt at sikre, at hele kortlægningsområdet inklusiv en evt. bufferzone medtages.

Dataoverførsel fra PCJUPITERXL

Når den administrative udvælgelse er foretaget, overføres data fra PCJUPITERXL. Det bemærkes, at samtlige data inden for den administrative afgrænsning overføres, dvs. at der ikke foretages nogen udvælgelse af bestemte datatyper.

I praksis overføres data fra PCJUPITERXL til rådgiverens computere via GEUS hjemmeside (JUPITER.geus.dk/JUPITERWWW/DownloadPCJUPITER?xl=1). Dataene kan overføres i flere formater. På nuværende tidspunkt er formaterne angivet nedenfor til rådighed. Hvilket format, der er det rigtige, bør afhænge af rådgiverens præferencer.

- Access 97
- Access 2000
- Firebird/Interbase
- SQL server
- Oracle

Det anbefales, at navngive dataudtrækket med dato for overførsel og skrivebeskytter dataene. Hermed er der fastlagt et bestemt "snapshot" af data fra JUPITER på dette tidspunkt. Fordelen med at fastlægge et "snapshot" er bl.a., at evt. senere udtræk kan sammenlignes for at belyse hvilke ændringer (indberetning af flere analyser, rettelse af fejl), der har været tale om i den mellemliggende periode.

Udvælgelse baseret på undersøgelsesområdets grænser

Efter data er overført, er der behov for at begrænse data endnu en gang ved at udvælge de data, der stammer fra selve kortlægningsområdet evt. inklusiv en bufferzone. Denne geografiske udvælgelse bør udføres, inden den videre databehandling påbegyndes.

Typisk består kortlægningsområdet af en polygon i et GIS program som MapInfo eller ArcGIS. GIS programmet anvendes til at udvælge de relevante borer og indvindingsanlæg ved hjælp af x/y-koordinater.

Inden data fra undersøgelsesområdet udvælges, skal man overveje, om der er behov for at inkludere data fra en bufferzone. Behovet for en bufferzone vurderes på baggrund af datatætheden i området. Hvis der er relativ få data eller hvis der f. eks. eksisterer en større kildeplads umiddelbart uden for kortlægningsområdet, bør der inkluderes data fra en bufferzone. Typisk vil en bufferzones bredde være i størrelsesordenen ½ km. Summen af kortlægningsområdet og bufferzonen benævnes *undersøgelsesområdet*. Det er således kun inden for undersøgelsesområdet, at kemiske analyser behandles.

Disse data benævnes "*det foreløbige datagrundlag fra JUPITER*".

4.3 Dokumentation og accept af datagrundlag

Dokumentation af datagrundlaget

Som et led i kvalitetssikringen under Trin 1b anbefales det, at det foreløbige datagrundlag fra JUPITER dokumenteres efter at *begge* udvælgelser har fundet sted. Dette gøres ved hjælp af metadata, dvs. en række nøgletal, der giver et overblik over, hvilke data, der findes i datagrundlaget.

I det foreløbige datagrundlag bør følgende oplysninger som minimum dokumenteres:

- antal boringer
- antal koordinatsatte boringer
- antal boringer med grundvandsprøver
- kort med undersøgelsesområdets afgrænsning og boringer med boringskontrolanalyser, tematiseret efter seneste udtagningstidspunkt (f. eks. 5-års perioder)
- antal prøver
- ældste råvandsprøve
- yngste råvandsprøve

På lignende vis bør der som minimum dokumenteres følgende oplysninger i forbindelse med drikkevandsanlæg i det foreløbige datagrundlaget under Trin 1b:

- antal drikkevandsanlæg
- antal koordinatsatte drikkevandsanlæg
- antal drikkevandsanlæg med drikkevandsprøver
- kort f. eks. i A3 med undersøgelsesområdets afgrænsning og drikkevandsanlæg med drikkevandsprøver, med en label, der angiver årstal for den seneste prøve
- antal drikkevandsprøver
- ældste drikkevandsprøve
- yngste drikkevandsprøve

Det anbefales, at rådgiveren udarbejder en skriftlig oversigt over disse oplysninger, og videresender denne til miljøcentret. Som et led i kvalitetssikringen kan miljøcentret vælge at inddrage kommunen for at få deres vurdering af det foreløbige datagrundlag.

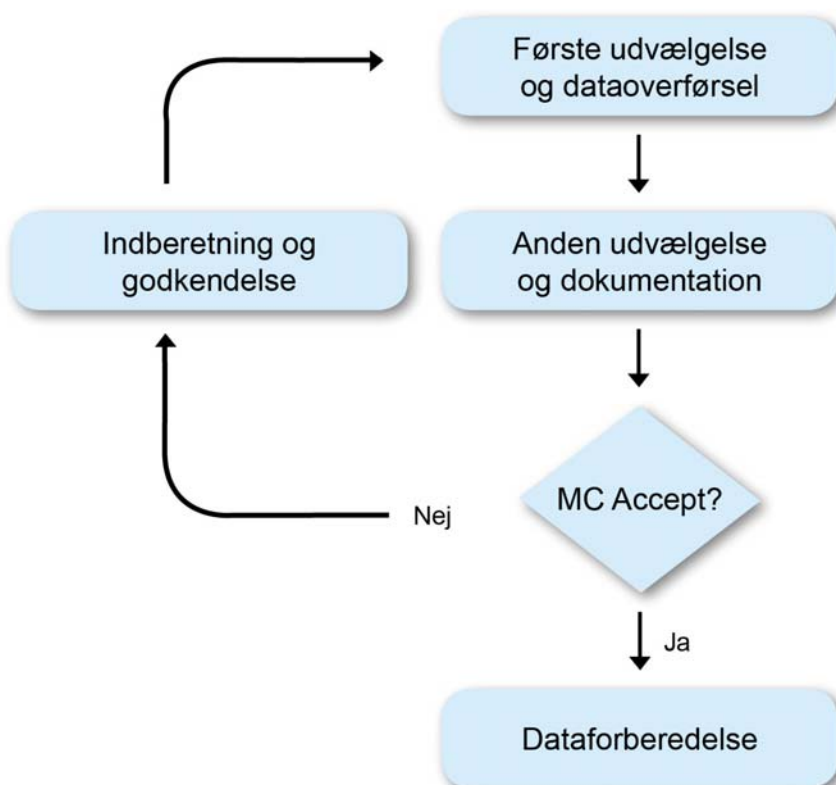
Accept

På basis af den skriftlige oversigt fra rådgiveren og evt. tilbagemeldinger fra kommunen bør miljøcentret vurdere, om datagrundlaget kan accepteres til det videre arbejde. I nogle tilfælde vil miljøcentret og kommunen kunne påpege problemer i datagrundlaget, herunder manglende boringer, manglende analyseresultater fra en bestemt prøvetagningsrunde, ønske om tilpasning af undersøgelsesområdets udformning, m.m.

Dataaccepten består dermed også i, at miljøcentret tager beslutning, om der skal indberettes flere data til JUPITER og om evt. fejl skal rettes. Hvis datagrundlaget skal udbedres, er der ofte behov for flere trin, herunder indberetning til JUPITER, godkendelse af data, og en ny dataoverførsel, se figur 4.1. Det bemærkes, at denne iterative proces kan være langstrakt, da der er flere instanser involveret. Derfor vil der altid være væsentlige usikkerheder i forbindelse med kortlægningens tidsplan, indtil datagrundlaget er accepteret af miljøcentret.

I mange tilfælde vil man vurdere, at udbedring af datagrundlaget kan vente, indtil der udføres et nyt dataudtræk under trin 2b (se aktivitet A9 i figur 3.2). Denne løsning gør det muligt at lade udbedringen tidsmæssigt gå sin gang parallelt med Trin 1-kortlægning. Hermed undgås forsinkelser i forbindelse med kortlægningen.

Det anbefales, at miljøcentret skriftligt formulerer en begrundet beslutning omkring accept af datagrundlaget. Først herefter begynder rådgiveren at forberede data til visualiseringer og tolkninger.



Figur 4.1 Flowdiagram af opgaver i forbindelse med håndtering af data i JUPITER under Trin 1b og Trin 2b. Indberetning og godkendelse kan evt. udskydes, så de nye data først er tilgængelige i trin 2b.

4.4 Dataforberedelse

Forberedelse af data til visualiseringer og fortolkninger omfatter en række aktiviteter, der blandt andet afhænger af de aktuelle geokemiske problemstillinger i området, datagrundlaget, ambitionsniveauet, hvilke præsentationer, der er relevante for området og hvilket software, der anvendes til visualiseringer. Det anbefales, at behovet for disse forberedelsesaktiviteter vurderes for hvert indsatsområde, da ikke alle er relevante for alle områder. En liste over udvalgte dataforberedelsesaktiviteter ses i tabel 4.2.

Type	Aktivitet	Formål
<i>Udledte data</i>		
	Tilknytning af indtag til et bestemt grundvandsmagasin	Relevant for de fleste visualiseringer
	Fastlæggelse af redox vandtype	Vurdering af redoxforhold
	Beregning af vandkemiske parametre	Tolkningsarbejdet
	Fastlæggelse af dybden til farveskift i sedimentet	Vurdering af redoxfronten
<i>Databaseforespørgsler</i>		
	Seneste analyseresultat for hvert indtag	Temakort
	Seneste sammenhørende resultat for hvert indtag	Scatterplot
	Indtag med flere end 3 vandprøver	Tidsserier

Tabel 4.2. Udvalgte dataforberedelsesaktiviteter.

Disse aktiviteter omtales nedenfor.

Tilknytning af indtag til et bestemt magasin

En stor beslutning i forbindelse med kemisk grundvandskortlægning er, om det enkelte indtag (og dermed den enkelte vandprøve) skal tilknyttes til et bestemt magasin. Denne tilknytning findes ikke direkte i JUPITER og kan være en tidskrævende proces at fastlægge. Beslutningen afhænger af, hvorvidt fordelene ved opdelingen står mål med tidsforbruget.

Oftest vil en tilknytning være fordelagtig. Det anbefales dog, at der normalt kun opereres med 2 magasiner, da der ellers genereres rigtig mange visualiseringer, der hver især har et for spinkelt antal analyser. Inddelingen kan f. eks. benævnes øvre og nedre, eller sand og kalk. I nogle tilfælde – f. eks. områder med mange data eller med en kompleks geologi, herunder områder med begravede dale - vil en videreinddeling være berettiget. I alle tilfælde bør der vælges en "intelligent inddeling", hvor der er formodning om, at inddelingen vil fremhæve forskelle i vandkvaliteten. Det foreslås, at beslutning om evt. inddeling i magasiner foretages af miljøcentret, evt. i samarbejde med rådgiveren og geologen, som udarbejder den geologiske model.

Der findes flere metoder til fastlæggelse af indtagets magasintilknytning:

- *Geologisk model:* En geologisk model opererer ofte med mange lag. Da antallet af vandsprøver udtaget fra de enkelte lag typisk er begrænset, anbefales det at slå lagene sammen, således at vandprøverne normalt kun opdeles i 2 magasiner. For at gennemføre magasintilknytningen kan man sammenligne den geologiske model med boringers filterintervaller og x/y-koordinater og fastlægge, hvilket magasin boringen er filtersat i. Det bemærkes, at hvis processen automatiseres, skal man være opmærksom på de filtre, der spænder over mere end et magasin. Derfor skal den automatiske proces suppleres med en subjektiv vurdering.
- *Lithologi på borejournal:* Ved denne metode kigges på borejournalen, og lithologien i filterintervallets dybde noteres. Lithologi-(erne) i filterintervallet kan udledes af JUPITER. Hvis processen automatiseres, kan der også her forekomme filtre, der

spænder over mere end én lithologi (f.eks. delvis filtersætning i ler). Derfor er en supplerings med en subjektiv vurdering ofte nødvendig.

Fastlæggelse af vandtype

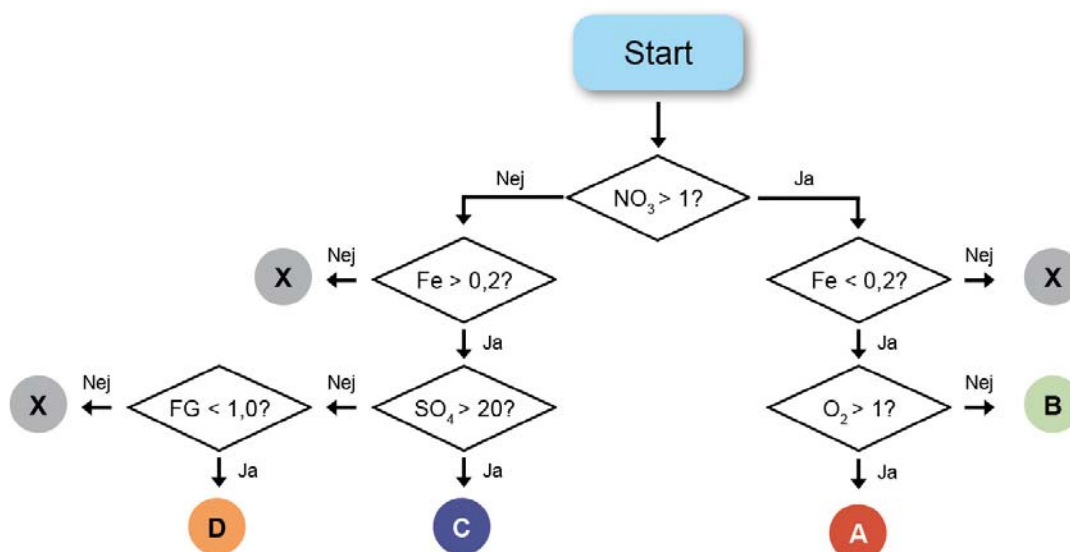
Fastlæggelse af vandtype er en god måde til at skabe overblik over kemiske analyseresultater. Derfor anbefales det, at vandtypen fastlægges for hver vandprøve. Der findes flere vandtypeinddelinger, der kan anvendes. Vandtypeinddelingen angivet i Appendiks E i Zoneringsvejledningen (efter rettelse af to fejl) har været meget udbredt (Miljøstyrelsen, 2000).

I denne vejledning anbefales at anvende redoxvandtyper, der i hovedtræk svarer til vandtyper i Zoneringsvejledningen. Der er tale om vandtyperne A: stærk oxideret (iltzonen), B: svagt oxideret (nitratzonen), C: svagt reduceret (jern- og sulfatzonen) og D: stærk reduceret (methan og svovlbrintezonen). Det er valgt at ændre prioriteringen af stofferne i fastlæggelse af vandtypen, sådan at nitrat har 1. prioritet, jern 2. prioritet og ilt har 3. prioritet. Det er dermed valgt, at give iltanalyserne en lavere prioritet end i Zoneringsvejledningen (MST, 2000), da disse målinger kan være fejlbehæftede. Samtidig er det valgt ikke at anvende sulfat (og forvittringsgraden) i fastlæggelsen af om vandtypen er A eller B, da der forekommer ilt og nitratholdig grundvand i Danmark med et lavt sulfatindhold (< 20 mg/l) i områder med en lav svovl deposition og stor grundvandsdannelse (Mossin & Jakobsen, 2006).

Fastlæggelse af vandtypen foregår på en brugervenlig måde ved hjælp af en algoritme, se nedenfor. Denne algoritme tager højde for en særlig vurdering, hvis vandprøven udviser en såkaldt "redoxmodsætning".

Algoritmen kan let automatiseres, da man forholder sig til én parameter ad gangen, og da der tydeligt angives, hvad udfaldet er i hvert enkelt tilfælde. Algoritmen starter med nitrat, da denne analyse vurderes at være ret sikker. Ilt-analysen har ellers førsteprioritet i Zoneringsvejledningen, men da det vides, at der kan forekomme falske-positive resultater for ilt (som følge af kontaminering af vandprøven med atmosfærisk ilt) er dette mindre hensigtsmæssigt.

For visse prøver er algoritmens udfald vandtype "X". Dette betyder, at en såkaldt "*redoxmodsætning*" i prøven er blevet identificeret, samt at prøvens vandtype kun kan fastlægges ved nærmere subjektiv vurdering. Denne metode rummer mulighed for at kunne adskille subjektiv-bestemte vandtyper og objektiv-bestemte vandtyper. Dette gøres ved at subjektiv-bestemte vandtyper bibeholder "X" angivelsen, f. eks. ved vandtype "BX". Hermed er det både muligt at sortere vandprøver alfabetisk efter vandtype samtidig med at oplysninger om redoxmodsætninger bibeholdes.



Figur 4.2 Algoritme til fastlæggelse af vandtype (FG=forvittringsgrad).

For sammenlignelighedens skyld er de anvendte grænser i algoritmen (nitrat=1 mg/l, ilt=1 mg/l, sulfat=20 mg/l, forvittringsgrad=1) de samme, der findes i zoneringsvejledningen. Man skal være opmærksom på, at anvendelsen af algoritmen kan medføre fastlæggelse af fejlagtige vandtyper under flere forhold. Eksempler inkluderer 1) iltindhold på > 1 mg/l, hvor prøvetageren ikke udviser forsigtighed ved målingen og 2) sulfatindhold < 20 mg/l, der skyldes en særlig lav atmosfærisk baggrundsværdi frem for sulfatreduktion i grundvandsmagasinet.

Såfremt algoritmen returnerer en vandtype "X", bør man kigge på analyser fra samme borer med andre prøvetagningsdatoer, vandprøver fra naboboringer, længden af boringens indtag, prøvernes forbehandling (filtrering), geologiske forhold, m.m. Normalt vil det efter denne gennemgang være muligt manuelt at fastlægge en vandtype. Hvis det vurderes, at der er tale om en blandingsvandtype, angives vandtypen med sammensatte bogstaver, som f. eks. "BCX" med den mest oxiderede vandtype først.

Da vandtype C er en meget vigtig vandtype og udbredt i forsyningsboringer (typen tilstræbes ofte, da den kvalitetsmæssig og behandlingsmæssig er fordelagtig) kan der være tilfælde, hvor en videreinddeling af denne vandtype kan være en fordel. Inddelingen kan f.eks. ske efter sulfatindhold, hvor C1 angiver vand med sulfatindhold i intervallet 20-70 mg/l og C2 angiver vand med sulfatindhold > 70 mg/l. Her følges samme tradition som ved filternummerering, ved at den dybeste vandtype angives det laveste tal.

Beregnete vandkemiske parametre

En række væsentlige kemiske parametre bliver ikke målt direkte på analyselaboratoriet, men er beregnede størrelser. Dataforberedelse omfatter derfor beregning af disse størrelser. I fremtiden vil disse parametre muligvis være at finde i JUPITER.

Det anbefales, at disse vandkemiske parametre beregnes ved brug af ligningerne angivet i Tabel 4.3. Vejledning om fortolkning af de beregnede parametre findes i kapitel 8.

Symbol	Navn	Ligning	Enheder
FG	Forvitningsgrad	$FG = 2 \cdot \frac{(Ca^{2+} / 40,1) + (Mg^{2+} / 24,3)}{(HCO_3^- / 61,0)}$	Dimen- sionsløs
IG	Ionbytnings- grad	$IG = \frac{(Na^+ / 23,0)}{(Cl^- / 35,5)}$	Dimen- sionsløs
log SI_{calcit}	Kalkmætnings- grad	$SI \cong \log\left(\frac{Ca^{2+}}{40,1 \cdot 10^{-3}} \cdot \frac{HCO_3^-}{61,0 \cdot 10^{-3}}\right) + pH - 1,8$	Dimen- sionsløs
Σ_{anioner}	Sum af anioner	$\Sigma = (Cl^- / 35,5) + (HCO_3^- / 61,0) +$ $+ 2 \cdot (SO_4^{2-} / 96,1) + (NO_3^- / 62,0)$	Milliækvi- valenter
Σ_{kationer}	Sum af kationer	$\Sigma = 2 \cdot (Ca^{2+} / 40,1) + 2 \cdot (Mg^{2+} / 24,3) +$ $+ (Na^+ / 23,0) + (K^+ / 39,1)$	Milliækvi- valenter
Bal	Ionbalance	$Bal = \frac{\Sigma_{\text{kationer}} - \Sigma_{\text{anioner}}}{\Sigma_{\text{kationer}} + \Sigma_{\text{anioner}}} \cdot 100\%$	Procent
°dH	Hårdhed	$^{\circ}dH = 5,6 \cdot \left(\frac{Ca^{2+}}{40,1} + \frac{Mg^{2+}}{24,3}\right)$	Tyske hårdheds- grader

Tabel 4.3. Beregnede parametre (alle koncentrationer i mg/l).

Nedenfor angives en række kommentarer i forbindelse med ligningerne i tabellen:

- Betydningen af ionbytningsgrad afhænger bl.a. af størrelsesordenen af de målte koncentrationer. Hvis der f. eks. kun findes 10-15 mg/l natrium og klorid, vil ionbytningsgraden lettere kunne udvise ekstreme værdier, end hvis der findes 10 gange så meget.
- Ligningen for kalkmætningsgrad tager ikke hensyn til aktiviteter, kompleksdannelse eller temperatur og er dermed en grov overslagsberegning. Kalkmætningsgraden kan beregnes mere nøjagtig f.eks. ved brug af programmet PHREEQC. Der kan også være stor usikkerhed forbundet med pH-målinger, specielt i prøver målt på laboratoriet, da der kan ske afgasning af CO₂.
- Ligningen for Ionbalance inkluderer ikke alle ioner. Andre ioner (f. eks. jern, ammonium, fluorid, carbonat) bør medtages, såfremt de er til stede i væsentlige koncentrationer. Ionbalancen bør kun opgives til nærmeste hel procent. Årsagen til evt. afvigelse bør undersøges nærmere, hvis ionbalancen er > 5 %.

Database forespørgsler

Sedimentfarven kan give oplysninger om dybden til redoxfronten og kan dermed give indikationer på nitratudbredelsen i magasinet. Ofte er der flere boringer som indeholder farvebeskrivelser end vandkemiske data, og der kan derved som regel opnås en bedre fladedækning på temakort over dybden til redoxfronten end for de vandkemiske temakort. Det

betyder, at bestemmelse af redoxgrænse på baggrund af farvebeskrivelser af jordlagene er en vigtig opgave i forbindelse med den kemiske kortlægning og den efterfølgende vurdering af grundvandsmagasiners nitratsårbarhed.

Sedimentfarver angives på de enkelte borejournaler, såfremt dette blev noteret af brøndboringen og evt. også tilsynet under borearbejdet eller af GEUS ved geologisk beskrivelse af indsendte sedimentprøver. Farverne findes normalt i JUPITER og bør indgå i arbejdet.

Det er desværre ikke alle borer, der er forsynet med angivelse af jordlagenes farve. Samtidig kan kvaliteten af farvebestemmelserne være svingende, hvilket dels skyldes, at formålet med borerne og farvebeskrivelserne har været forskellige fra boring til boring, dels at farvebeskrivelsen er subjektiv og er afhængig af iagttageren. Flere nye borer er beskrevet med den mere objektive Munsell farvekode, som anbefales anvendt ved beskrivelse af jordprøver fra nye undersøgelsesboringer.

Det kan forekomme at oprindeligt reducerede prøver er iltede, inden prøverne er beskrevet af GEUS. Derfor skal brøndborers (og boringstilsynet ved undersøgelsesboringer) tillægges større vægt end GEUS' farvebestemmelse, som kan være udført flere år efter, at prøven er udtaget i felten.

I områder med heterogen geologi kan der ofte observeres flere farveskift i den samme boring, som indikerer meget varierende redoxforhold. Dette kan forklares ved ikke-vertikal infiltration i et område med heterogen geologi og forekomst af geologiske vinduer. I disse områder angives dybden til den **dybeste** redoxgrænse. Derudover noteres om der er veksellende iltede og reducerede lag i samme boring, da dette er vigtig information til beskrivelse af de hydro-geologiske forhold.

Da fastlæggelsen er en subjektiv proces, anbefales det, at de retningslinier, som medarbejderen har anvendt, noteres. Det foreslås, at man benytter sig af følgende regelsæt:

- Rød, brun, gul og blandingsnuancer heraf antages at repræsentere oxiderede lag
- Grå, grønlig, sort og blandingsnuancer heraf antages at repræsentere reducerede lag
- Hvis farven veksler flere gange, antages konservativt den dybeste overgang fra oxiderede til reducerede farve at udgøre "dybden til farveskift".
- Det noteres, om der er flere farveskift i boringen, da dette vidner om geologiske heterogenitet og geologiske vinduer.

Det skal bemærkes, at røde farver kan optræde i reduceret tertiært ler. Desuden kan det være svært at vurdere redoxmiljøet for brungrå og gråbrune farver, og her er det vigtigt at inddrage resultater fra vandkemien. Når dybden til farveskift er fastlagt, skal dette visualiseres på et kort. Det kan ikke anbefales at konturere disse data, da geologiske variationer kan betyde, at dybden til farveskift i et område ikke er relateret til dybden i et nærliggende område. I Ernsten et al., (2006) beskrives hvorledes supplerende oplysninger om landskabstype, topografi, jordartskort samt oplysninger om den prækvartære overflade kan inddrages i forbindelse med udarbejdelsen af kort over dybden til redoxgrænsen.

Udvælgelse af delmængder

I forbindelse med udarbejdelse af grafer og kort, er der ofte behov for at udvælge visse delmængder af data. Som det ses i tabel 4.4, varierer udvælgelsen afhængig af hvilken visualisering, der er tale om. Man bør altid sørge for, at de aktuelle udvælgelser fremgår tydeligt i teksten, der ledsager grafen eller kortet.

Visualisering	Udvælgelse	Bemærkning
Temakort	Seneste resultat for hver parameter for hvert indtag	Vær opmærksom på, at forskellige temakort kan vise resultater fra forskellige tidspunkter for samme indtag.
Scatterplot	Seneste sammenhørende værdier	Hvis der f. eks. plottes nitrat mod sulfat, bør begge disse resultater stamme fra den samme vandprøve. Da dette oftest er tilfældet i forvejen, kan man for at spare tid vælge blot at vise de seneste værdier, uanset om de er sammenhørende eller ej.
Tidsserie	Indtag med 3 eller flere analyser	Der er normalt behov for at udvælge typiske borer, hvor der skal laves tidsserier, da der ellers vil være et uoverskueligt antal tidsserier i et kortlægningsområde, se afsnit 7.5.

Tabel 4.4. Udvælgelse af data i forbindelse med udarbejdelse af visualiseringer.

4.5 Kvalitets- og usikkerhedsvurdering

Dette afsnit omhandler kvalitet i bred forstand. Der skelnes skarpt mellem begreberne kvalitetssikring, kvalitetskontrol og usikkerhed. Hvert begreb defineres, og der gives konkrete anbefalinger for hvilke vurderinger der bør udføres.

Kvalitetssikring

Kvalitetssikring i grundvandskemisk kortlægningsarbejde defineres som en planlagt og systematisk arbejdsproces, der øger sandsynligheden for, at der opnås den bedst mulige kemiske kortlægning. Denne arbejdsproces er dynamisk og bør løbende justeres. Ved anvendelse af automatiserede rutiner frem for manuelt arbejde, opnås bedre muligheder for at sikre en løbende forbedring af processen og minimering af antallet af fejl.

Kvalitetssikring i forbindelse med grundvandskemisk kortlægning inkluderer mange emner, herunder GEUS's kontrol af analysedata ved indberetning, kommunernes, regionernes og miljøcentrenes godkendelsesproces af indberettede data, vejledninger som denne, tekniske anvisninger, interkalibreringer, autorisationer, efteruddannelse, m.m. Mange af disse emner (herunder GEUS's kontrol) omtales ikke i denne vejledning, da det antages, at arbejdet allerede er blevet udført ved kortlægningens start. Dette gælder dog ikke data som er direkte indlæst via Miljøcenterets fagsystem, jf. afsnit 4.1. Denne vejledning fokuserer på kvalitetssikringstiltag i forbindelse med det enkelte kortlægningsområde.

Det anbefales, at følgende kvalitetssikringsaktiviteter foretages i forbindelse med den grundvandskemiske kortlægning:

1. *Datagrundlag*: Rådgiveren dokumenterer det foreløbige datagrundlag skriftligt og Miljøcentret begrundet skriftligt en beslutning vedrørende accept af datagrundlaget.

2. *Kontrol af kemiske data:* Der udføres kontrol af de enkelte analyseresultater, ligesom sammenhænge mellem de kemiske data vurderes, se nedenstående afsnit.
3. *Usikkerhed:* Usikkerheden vurderes efter retningslinier angivet i nedenstående afsnit.
4. *Kontrol af konklusioner:* Forfatteren til den grundvandskemiske kortlægning deltager i udarbejdelse af konklusionerne til den kortlægningsrapport, der indeholder gennemgangen af andre fagområder.
5. *Dialog:* Kortlægningsrapporten fremlægges og drøftes ved et møde med deltagelse af rådgiver og miljøcenter.

I januar 2007 trådte dataansvarsaftalen i kraft (Dataansvarsaftalen, 2007). Denne er en udmøntning af et samarbejde mellem Miljøministeriet, KL, Danske Regioner og Den Digitale Taskforce om Danmarks Miljøportal. I denne aftale står bl.a., at data skal kvalitetsmærkes efter et aftalt system. Ansvar for diverse datatyper angives i bilag til aftalen, se eksempler nedenfor:

- Tilladt indvindingsvandmængde: Kommune
- Indvunden vandmængde: Vandforsyningen
- Drikkevandskontrol: Kommune
- Boringskontrol: Kommune
- NOVANA: Miljøcenter
- Kortlægning: Miljøcenter

Kontrol af kemiske data

Kontrol af kemiske data defineres som en identifikation af fejl, mangler og afvigende kemiske data samt en kommentering af fundene. I forlængelse af kontrollen *kan* der ske en afklaring af årsagen til problemet samt *udbedring* eller *forkastning* af data.

Helt konkret anbefales, at følgende kontrol foretages i forbindelse med den grundvandskemiske kortlægning:

1. Rådgiveren bør identificere afvigende værdier på alle udarbejdede fraktildiagrammer og tidsserier og kommentere disse ved de enkelte grafer. For at begrænse tidsforbruget ved denne kontrol foreslås, at afvigende værdier identificeres subjektivt og, at man undgår at beskrivelsen fylder for meget, således at rapporten ikke drukner i detaljer.
2. Rådgiveren bør identificere redoxmodsætninger på alle komplette resultater og kommentere disse i rapporten.
3. Rådgiveren bør udføre en ionbalance på alle komplette resultater og dokumentere resultatet i rapporten.

Både miljøcenter og rådgiver bør være opmærksomme på en lang række risici, der kan medføre forringelse af analysekvaliteten, herunder:

1. Fejl i forbindelse med boringsidentifikation
2. Angivelse af grundvand frem for drikkevand for prøver udtaget ved en enkeltindvinder, hvor der sker vandbehandling
3. Forhøjet detektionsgrænse

4. Ældre analyser – for især miljøfremmede stoffer og uorganiske sporstoffer er analysekvaliteten steget gennem årene i takt med indførelse af bedre analysemetoder, bedre kvalitetssikringsprocedurer, m.m.
5. Falske positive resultater, især ved iltmålinger
6. Enhedsfejl
7. Fund tæt på detektionsgrænsen – usikkerheder er større på resultater tæt på detektionsgrænsen, f. eks. pesticidfund på 0,01 µg/l kan være en falsk positiv
8. At værdier med attribut "<" ikke er højere end detektionsgrænsen.
9. Manglende feltfiltrering for specielt kationer i uklar vand eller uønsket laboratoriefiltrering for stoffer, der kan være udfældet i intervallet mellem prøvetagning og filtrering.

Når der opdages fejl, mangler eller afvigende analyseresultater, kan årsagen forsøges afklaret. Enten bør problemet blive udbedret eller også bør data forkastes. Det bør overvejes, hvorvidt der er grundlag for at meddele problemet til GEUS, således at der kan tilføjes et flag i JUPITER, der angiver, at resultatet er af tvivlsom kvalitet. Ved mindre væsentlige fejl kan fejlen dog blot noteres. Man bør sikre, at der ikke bruges uforholdsmæssigt meget tid på identifikation og rettelse af fejl, således at der er for lidt tid til selve fortolkningsarbejdet.

Usikkerhed

Usikkerhed defineres her som risikoen for, at kortlægningens konklusioner ikke er tilstrækkelige til at danne grundlaget for den optimale indsats.

Usikkerhed kan forekomme på flere niveauer i forbindelse med grundvandskemisk kortlægning. Ofte tænker man på usikkerheden som nøjagtigheden af den enkelte laboratoriemåling. Denne nøjagtighed kan ofte kvantificeres ved at beregne den sandsynlige afvigelse fra den sande værdi. Normalt vil den analysemæssige usikkerhed være så lille, at den er uvæsentlig og kan ses bort fra i kortlægningens sammenhæng.

Mere relevant for kemisk kortlægning er den usikkerhed, der findes i forbindelse med kortlægningens endelige konklusioner (Jørgensen m. fl., 2008). Denne usikkerhed opstår, da kortlægningen indebærer en sammenstilling af en lang række forskelligartede objektive og subjektive data, som hver har deres egen usikkerhed. Ved sammenstilling og sammentolkning af disse data, tilføres der, udover datausikkerhederne også en tolkningsusikkerhed. Tolkningsusikkerheden er vanskelig at kvantificere og kan være større end summen af usikkerheden af de enkelte datasæt. Omvendt kan datasæt, der understøtter hinanden, medføre at tolkningsusikkerheden er mindre end usikkerheden på de enkelte datasæt. På denne måde påvirker de øvrige fagområder usikkerheden i forbindelse med den grundvandskemiske kortlægning og omvendt.

Usikkerheder ved kemisk grundvandskortlægning har indflydelse på det videre arbejde med sårbarhedskortlægning og indsatsplaner. Derfor er det vigtigt, at usikkerheden videreføres.

Det anbefales derfor, at der udarbejdes en konklusion vedrørende usikkerheden på den grundvandskemiske kortlægning. Denne konklusion har karakter af en vurdering, da det ikke giver mening at lave en kvantitativ konklusion. Konklusionen bør skrives som et selv-

stændigt afsnit i kortlægningsrapporten i forbindelse med modelopsætningerne under trin 1b og trin 2b og bør som minimum inkludere omtale af:

1. Områdets generelle grundvandskemiske datatæthed (både horisontalt og vertikalt)
2. Vurdering af områdets inhomogenitet/geokemiske kompleksitet
3. Usikkerhed i forbindelse med identifikation af problemstoffer
4. Usikkerhed i forbindelse med identifikation af geokemiske processer
5. Usikkerhed i forbindelse med den geografiske afgrænsning af områder med problematisk indhold af kritiske parametre
6. Overensstemmelse mellem kemiske tolkninger og tolkninger fra andre fagdiscipliner.

Herudover anbefales, at usikkerhederne prioriteres, således at der foretages en vurdering af hvilken af de omtalte usikkerheder, der er mest væsentlig for kortlægningen og den efterfølgende indsatsplanlægning.

5. Vandindvinding

I den kemiske grundvandskortlægning er det vigtigt at kende den eksisterende vandindvinding og vandkvaliteten ved de enkelte vandværker. Beskrivelsen af den nuværende vandindvinding indgår som en del af Trin 1b, og beskrivelsen af de enkelte vandværker afreporteres som bilag til Trin 1b rapporten.

For at få et overblik over indvindingen i et kortlægningsområde kræves en beskrivelse af følgende forhold:

- Områdets vandforsyningsstruktur
- Vandkvaliteten ved nuværende vandværker og i deres oplande
- Tidslig udvikling i vandkvalitet
- Arealanvendelsen i oplandene
- Hydrogeologiske forhold på kildeplads og i opland
- Indvindingens størrelse og fordeling
- Potentielle fremtidige indvindingsområder

Selve vandværksbeskrivelsen har ofte et bredere formål end udelukkende at bidrage med viden om de vandkemiske forhold på vandværkerne. Vandværksbeskrivelserne kan anvendes direkte af kommunerne i den efterfølgende indsatsplanlægning og skal kunne læses af de enkelte vandværker. Derudover har vandværksbeskrivelserne sammen med vandforsyningsplanen en væsentlig betydning for den hydrologiske modellering, idet den giver en forbedret viden om indvindingsstrategien og fremtidige ændringer i forsyningsstrukturen i området, hvilket er en forudsætning for fastlæggelse af de hydrologiske oplande.

5.1 Samarbejde med kommuner og vandværker

Før beskrivelsen af vandindvindingsforholdene igangsættes, er det vigtigt med kontakt til og samarbejde med de implicerede kommuner og vandværker. Vandforsyning er en kommunalopgave hvad angår både tilsyn, tilladelser og vandforsyningsplan. Det anbefales, at det i samråd med de involverede kommuner beslutes, hvorvidt der er behov for en detaljeret gennemgang af vandværkernes indvindingsstrategi og vandkvalitet, eller om der allerede er udarbejdet en tilstrækkelig detaljeret vandværksbeskrivelse, som direkte kan indgå i den kemiske grundvandskortlægning.

5.2 Overordnet beskrivelse af vandindvindingen

Vandforsyningsstrukturen

Vandforsyningsstrukturen inden for kortlægningsområdet beskrives med udgangspunkt i de kommunale vandforsyningsplaner, såfremt disse er udarbejdet. Det er vigtigt at beskrive, hvilken tidsperiode den eksisterende vandforsyningsplan dækker, og tidspunktet for det seneste kommunale vandværkstilsyn, for at kunne vurdere, hvor opdaterede informationer-

ne er. Dette gælder ikke mindst for vandforsyningsstrukturen, vandværkers indbyrdes placering, rolle/prioritering i vandforsyningsplanen, herunder planer for nedlæggelse/udbygning af vandværker m.v., som er relevante for den videre prioritering i den efterfølgende kortlægning og hydrologisk modellering.

Andre indvindinger

Inden for hele kortlægningsområdet er det vigtigt at have fokus på den samlede indvinding i vandværkets indvindingsopland. Det vil sige information om indvindingen fra andre vandværker, enkeltindvindere, markvandingsanlæg, industri, afværgeboringer m.v. Dette er nødvendigt for at få overblik over den samlede indvindings effekt på grundvandets kvalitet, så der evt. kan prioriteres i forbindelse med indsatsplanlægningen.

Der skal så vidt muligt redegøres for andre indvindingers:

- placering,
- indvindingstilladelse,
- udløb af tilladelse,
- indvindingens formål og
- grundvands- og drikkevandskvalitet.

Disse andre indvindinger kan afbildes på et kort med f.eks. en cirkel, hvis størrelse angiver indvindingens størrelse, en farve som angiver anvendelsen og evt. en label med indtagsdybde.

Påvirkning af grundvandspotentiale

Indvinding af vand påvirker i mange tilfælde grundvandets potentiale betragteligt. Sænkningen af potentialet kan, udover at have en negativ effekt på afstrømningen i vandløb m.v., også påvirke vandets kvalitet f.eks. mht. sulfat og nikkel. Større afsænkninger bør derfor kommenteres, og tolkninger af vandets kvalitet bør foretages i lyset af, hvordan indvindingen af vand har påvirket potentialet.

Et andet problem kan være for kraftig afsækning lokalt forårsaget af en uhensigtsmæssig pumpestrategi. Dette kan f. eks. give saltvandspåvirkning eller trække nitrat og pesticider ned i grundvandsmagasinet. Denne påvirkning kan reduceres, forsinkes eller undgås ved at pumpe med lavere ydelse i længere tid og/eller sprede indvindingen.

Nedlagte vandværker

Der skal indhentes information om nedlagte vandværkers placering og om årsagen til, at de er lukkede. Derved opnås en vigtig viden om problemstoffer i området som f.eks. nitrat og pesticider, der ellers ikke er umiddelbart tilgængelig. Mange vandværker blev lukket på grund af for højt nitratinhold i 1970'erne og 1980'erne. Data herfra mangler ofte i JUPITER, hvorfor viden om grundvandets nitratinhold i området ofte vil være usynlig ved en hurtig gennemgang af et dataudtræk indenfor kortlægningsområdet.

Problematiske stoffer

Hvis der i et kortlægningsområde findes grundvand med en kvalitet, der er uegnet til drikkevandsproduktion, bør det vurderes om de problematiske kemiske stoffer fjernes ved almindelig vandbehandling. På dette grundlag vurderes områdets indvindingsmuligheder.

Såfremt der er tilstrækkeligt med data, bør den tidslige udvikling for disse stoffer derfor vurderes, jfr. 5.4. Det gælder, f. eks. hvis der er underliggende saltvand, eller nitrat/pesticidholdigt grundvand i de øvre magasiner.

5.3 Vandværksbeskrivelse

I forbindelse med den kemiske grundvandskortlægning skal der foreligge en detaljeret beskrivelse af indvindingsstrategi og vandkvalitet for hvert vandværk. Bilag B indeholder et paradigma for en sådan vandværksbeskrivelse.

Hydro-geologiske forhold på kildepladsen

Forud for beskrivelse af de vandkemiske forhold på kildepladsen er det vigtigt at indplacere vandværket og dets borer i en hydrogeologisk sammenhæng.

De hydrogeologiske forhold på kildepladsen kan beskrives ved følgende:

- Boringernes indbyrdes placering på et kort.
- En tabel med boringernes DGU nr., alder, filterinterval, historik og status.
- Beskrivelse af magasinbjergart og dæklag på kildepladsen og i oplandet.
- Et profiltværsnit på kildepladsen.
- Størrelse og udløbsdato for indvindingstilladelsen.
- En tidsserie for oppumpede vandmængder.
- Indvindingsstrategien fordelt på borer og over tid hvis relevant.
- Plot af pejledata fra indvindingsboringer for at afdække grundvandsænkning og pumpestrategi.
- Data fra eventuelle prøvepumpningsforsøg.
- Nitratfrontens beliggenhed baseret på farvebeskrivelser fra borerne.
- Oplande, grundvandsdannende områder, alder (Iversen m. fl., 2008).

Visualiseringen af ovenstående bør suppleres med en kort prosatekst, der beskriver de geologiske forhold på kildepladsen samt karakteristika ved grundvandsmagasinet, f.eks. hvorvidt magasinet er frit eller spændt, hvorvidt der findes et sekundært magasin eller ej, og om der forventes at være hydraulisk kontakt mellem de forskellige magasiner.

Hydrogeologiske forhold og arealanvendelse i oplandet

Råvandskvaliteten er meget afhængig af den geologiske opbygning af området og arealanvendelsen. Derfor bør en vandværksbeskrivelse indeholde en kort gennemgang af disse forhold i oplandet. Det kan være kendte punktkilder, eller andre kendte forureningskilder eller måske værdifulde natur, vådområder og vandløb, der kan lægge begrænsninger for oppumpningen.

På et GIS-kort præsenteres

- Kortlagte grunde m.v. – forureningstrusselsbilledet. Brug gerne orthofotos som baggrund, så arealanvendelsen er kendt.

- Lertykkelseskort for oplandet og den forventede afgrænsning af det grundvandsdannende opland, hvis det er fremstillet på tidspunktet for vandværksbeskrivelsen
- Boringer med vandkemiske analyser i oplandet, angives med DGU-nr., filterdybde og evt. anvendelse.
- Samtlige boringer i oplandet og deres anvendelse. Nogle af disse kan evt. prøvetages i Trin 2a.
- Målsatte naturtyper.
- Evt. potentialekort fra vandværkets opland, hvis et sådant findes.
- Indvindingsmængde og evt. oplande, hvis sådanne forefindes

Særlige forhold

Hvis der på vandværket foregår eller har foregået særlige projekter f.eks. vedr. arsenfjernelse, kan det nævnes i vandværksbeskrivelsen, men som udgangspunkt hører forhold inde på selve vandværket til under det kommunale tilsyn, hvorfor vandværksbeskrivelsen bør fokusere på forholdene i magasinet og andre forhold, som påvirker råvandskvaliteten.

Kvaliteten af råvandet

Råvandskvaliteten på det enkelte vandværk skal vurderes ud fra dets anvendelse til drikkevand. Det vil sige, om der ved en simpel vandbehandling af råvandet kan opnås en vandkvalitet, der kan opfylde bekendtgørelsens krav til drikkevand. Såfremt råvandet ikke umiddelbart er anvendeligt som drikkevand på grund af f.eks. nitrat, pesticider, aggressivt kuldi-oxid eller meget højt arsenindhold, bør det bemærkes.

For at kunne vurdere vandkvalitetens stabilitet, optegnes der tidsserier for relevante parametre. Se afsnit 5.4 for en gennemgang af hvordan og for hvilke stoffer tidsserieanalyser bør foretages.

Ud over at vurdere hvorvidt råvandet er egnet til drikkevand efter en passende vandbehandling, skal det kommenteres, hvorvidt der findes andre specifikke stoffer, som vurderes at kunne udgøre et fremtidigt problem for drikkevandskvaliteten. Der redegøres for kilden til problemstoffet, og evt. handlemuligheder. Forekomst af stoffer, som kræver vandbehandling, bør kommenteres separat.

Følgende parametre bør kommenteres, og derudover kan der være lokale forhold som betinger at andre stoffer skal inddrages f.eks. fosfor og NVOC.

- Nitrat
- Sulfat
- Klorid
- Vandtype – er der blandingsvand

- Forvittringsindeks
- Redoxforhold
- Ionbytning
- Uorganiske sporstoffer
- Miljøfremmede stoffer – både fund, tidligere fund og analyseomfang. Manglende fund af miljøfremmede stoffer kan skyldes utilstrækkeligt analyseomfang. Ikke undersøgte vandværksboringer.
- Behandlingskrævende stoffer som f.eks. methan, ammonium og jern m.v.

De beregnede vandkemiske parametre bør udføres efter formlerne vist i tabel 4.3.

I forbindelse med tolkning af grundvandskemien skal der være fokus på den tekniske tilstand af indvindingsboringerne, således at fejltolkninger på grund af utætte boringer undgås. Boringernes tekniske tilstand fremgår ofte af kommunernes tilstandsrapporter.

Drikkevandskvalitet

Hvor meget der skal gøres ud af drikkevandskvaliteten afhænger af den specifikke aftale med kommunen, antallet af kildepladser/boringer og det generelle datagrundlag på det enkelte vandværk. Drikkevandskvaliteten bør kun kommenteres i det omfang, at den kan bidrage med yderligere information om vandkvaliteten i magasinet, f.eks. hvis der er få råvandsanalyser, eller vandværket kun råder over en eller to boringer.

Den tidlige udvikling i drikkevandet bør dog vurderes for f.eks. nitrat, sulfat og klorid. Det kan være relevant at inddrage andre parametre såfremt råvandskvaliteten indikerer, at der er behov for særlig fokus på vandbehandlingen eller, at der f.eks. kun findes få råvandsanalyser. Tidsserier for drikkevand skal dog anvendes med forsigtighed, jfr. afsnit 5.4 om tidsserier.

5.4 Tidslig udvikling

Vandindvinding påvirker og forcerer ofte den naturlige udvikling i grundvandets kemi. Derfor er det særlig relevant at have fokus på den tidlige udvikling i vandkvaliteten i indvindingsboringerne. Tidsserieanalyser af vandkvaliteten er et centralt element i vandværksbeskrivelserne.

Formål

Formålet med at analysere den tidlige udvikling af forskellige kemiske komponenter er at kunne vurdere, hvorledes vandkvaliteten i grundvandsmagasinet påvirkes af indvinding, arealanvendelse og andre oplandsaktiviteter over tid og identificere eventuelle stigende eller faldende tendenser.

Formålet med tidsserierne er ikke alene at vurdere, hvorvidt enkeltstoffer nærmer sig grænseværdien. Sammenstilling af den tidlige udvikling i vandkvalitet med indvindingsstrategi og –mængde vil kunne afsløre geokemiske processer i både magasin og dæklag.

Yderligere kan tidsserierne anvendes til kvalitetssikring af kemiske data. Forekomsten af koncentrationer, der afviger væsentligt fra almindeligt forekommende analyseresultater eller tidligere analyseresultater fra samme filter af det pågældende stof, skal altid kontrolleres for, hvorvidt de er et udtryk for en ændring i vandkvaliteten eller f.eks. skyldes fejlanalyser, indberetning for forkert boring, enhedsfejl eller lignende.

Datagrundlag

Råvand fra indvindingsboringer analyseres typisk med intervaller på 3 til 5 år afhængig af indvindingens størrelse. Analysehyppigheden for drikkevand er langt større. For mange vandværker skal drikkevandet "ved afgang vandværk" analyseres minimum 2 gange/år. Drikkevandets kvalitet er afhængig af vandkvaliteten i de enkelte boringer på kildepladsen/kildepladserne, vandbehandlingen samt indvindingsstrategien på prøvetagningstidspunktet, herunder blanding af vand fra forskellige boringer.

Det kan ofte betale sig at lede efter især ældre råvandsanalyser i samarbejde med kommunen og vandværket, idet især analyser før 1986 ofte vil mangle i JUPITER. Jo længere tidsserier, jo bedre grundlag for fortolkningen.

Kvaliteten af råvandet

Tidsserier for råvand vil bidrage med vigtig information omkring de geokemiske forhold i selve magasinet. Vandkvaliteten kan dog også være påvirket af vand, der er trængt ned langs boringen, såfremt denne ikke er udført korrekt (skortenseffekt).

Det er for hvert vandværk hensigtsmæssigt at lave tidsserier for såvel aktive som nedlagte/sløjfede boringer, idet sidst nævnte kan afsløre potentielle problemer for kildepladsen og for området.

Naturlige stoffer

Der bør som minimum optegnes tidsserier for følgende stoffer:

- Klorid, fordi stoffet er konservativt og forventes stabilt
- Nitrat, dog kun hvis der er nitrat > 1 mg/l i boringerne.
- Sulfat, fordi det vil indikere om nitrat er på vej mod magasinet, og/eller grundvands-sænkninger øger sårbarheden.
- Ionbytning, fordi det viser om der trækkes salt grundvand/vejvand til boringen.

Områdespecifikke problemstoffer

Der optegnes tidsserier for stoffer, som er regionalt eller lokalt problematiske. De problematiske områdespecifikke stoffer kan være både naturlige og menneskeskabte. De områdespecifikke stoffer kan f.eks. være ammonium, mangan, fluorid, NVOC (brunt vand) eller et eller flere miljøfremmede stoffer, herunder ikke mindst pesticider.

Stoffer følsomme for vandbehandling

Hvis der sker en udvikling i koncentrationen af stoffer, der er følsomme over for vandbehandling, bør det kommenteres. Især hvis ændringer i niveauet kan give anledning til problemer i forhold til at drikkevandskvaliteten kan overholdes. Dette kan f. eks. være stigende sulfid, faldende pH mv.

Overvejelser forud for anvendelse af drikkevand i tidsserier

Førend drikkevandsanalyser anvendes til tidsserieanalyser skal følgende ting overvejes:

- antallet af kildepladser
- antal borer, deres indbyrdes placering samt dybde og placering af indtag
- indvindingsstrategi
- antal vandbehandlingsanlæg

De nævnte parametre indikerer, hvilken kompleksitet drikkevandets kemiske sammensætning afspejler, og dette er afgørende for tolkningen og anvendeligheden af data. Jo større variation i råvandets sammensætning der er i de enkelte borer, jo mindre nytte har man af tidsserier på drikkevand.

Flere kemiske stoffer påvirkes ved simpel vandbehandling i form af iltning og filtrering som f.eks. jern, mangan, aggressiv CO_2 , svovlbrinte, ammonium, nitrit, hydrogenkarbonat og dermed også forvittringsindexet, pH, arsen. Man skal ikke mindst være opmærksom på, at ammonium ved almindelig vandbehandling kan oxideres til nitrat, så lave koncentrationer af nitrat ikke nødvendigvis hænger sammen med, at der er nitratproblemer på kildepladsen ($0,5 \text{ mg/l NH}_4$ bliver til $1,7 \text{ mg/l NO}_3$).

På mindre vandværker med blot en eller to indvindingsboringer betyder den forholdsvis store analysehyppighed af drikkevand i forhold til råvand, at drikkevandet ofte med fordel kan anvendes i den tidlige analyse på mange vandværker. Det er vigtigt forud for tidsserieanalysen at gøre sig klart, i hvilket omfang de forskellige borerers råvandskvalitet er sammenlignelige. Fluktuationer i drikkevandskvaliteten kan altså skyldes driften med variationer i bidraget fra enkelte borer, og er dermed ikke udtryk for en reel ændring af råvandskvaliteten. Hvis drikkevandsanalyserne repræsenterer vand fra flere borer, kan ændringer i de enkelte borerers vandkvalitet sløres i analysen af drikkevand.

Tidsserier for drikkevandsanalyser skal derfor alene ses som et supplement til tidsserierne på de enkelte indvindingsboringer. Men med fokus på de vandbehandlingsfølsomme stoffer og variationer i råvandets sammensætning i de enkelte borer er drikkevandsanalyser særdeles nyttige, når der er et begrænset antal råvandsanalyser til rådighed.

5.5 Sammenfatning

For hvert vandværk laves på baggrund af arealanvendelsen i oplandet, udviklingen i vandkvaliteten og vandværkets tilstand en konklusion på status og risici for nuværende og fremtidig vandkvalitet. Der skal være fokus på at kommentere de problematiske stoffer, herunder især forekomst af miljøfremmede stoffer eller mangelfuld analysefrekvens af disse.

Såfremt der er oplagte tiltag/handlinger, som kan forbedre eller sikre kvaliteten af det vand, der indvindes, bør det nævnes. Det kan f.eks. være spredning af borer, etablering af nye borer og kildepladser eller udjævning af oppumpningen.

6. Indsamling af nye data

6.1 Databehov og prøvetagningsstrategi

Efter en nærmere gennemgang af eksisterende data under trin 1b skal det afklares, hvilke behov der er for at indhente supplerende data vedrørende:

- Grundvandets kemiske sammensætning
- Dæklagenes geokemiske egenskaber
- Grundvandsmagasinerne geokemiske egenskaber

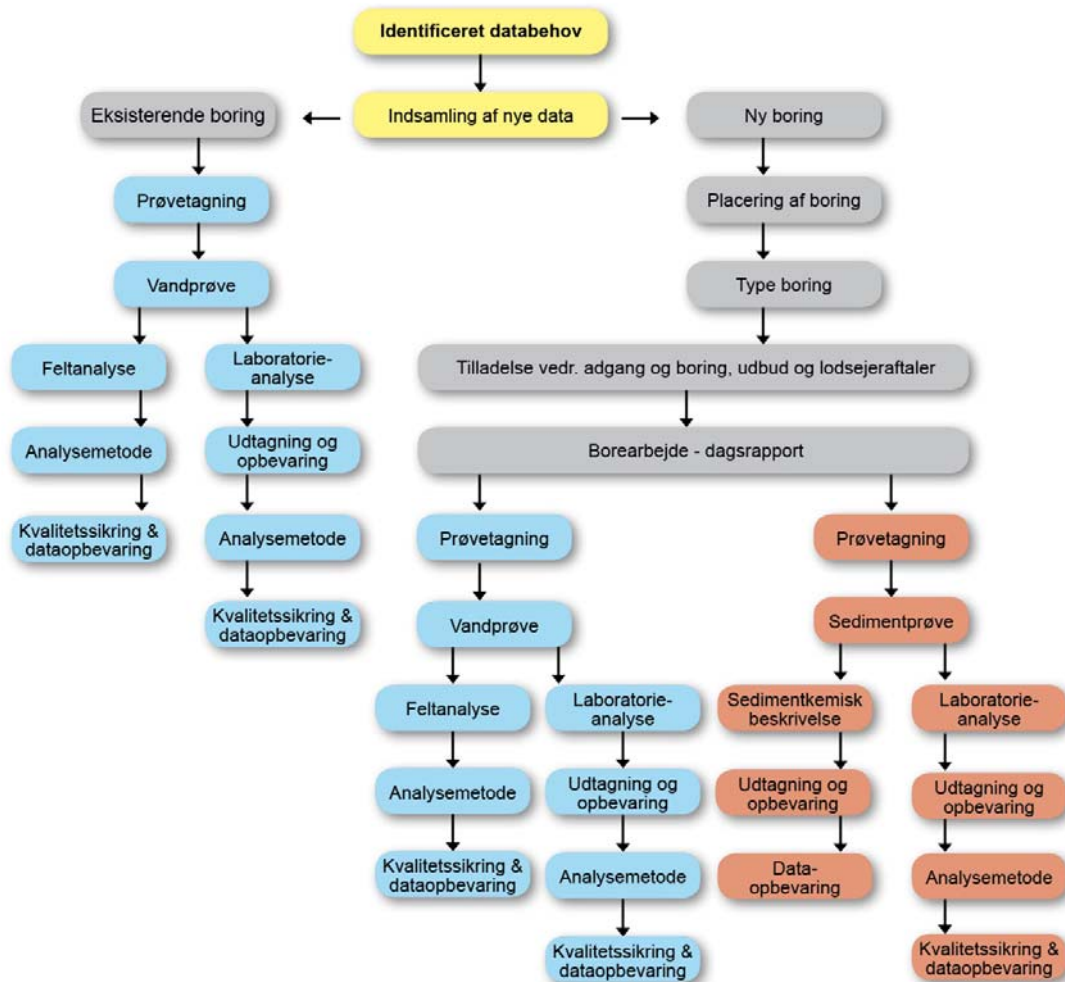
Når behovet for nye data er afklaret, skal der ske en afvejning af, hvorledes disse behov bedst dækkes i forhold til den økonomiske ramme for kortlægningen. Indsamling af vandanalyser fra eksisterende borer er billig i forhold til at etablere nye borer med nye filtre. Til gengæld er der en binding til de eksisterende borerers geografiske placering og faste filterplaceringer.

I det omfang eksisterende borer anvendes, bør man være meget kritisk over for forhold som:

- Filterlængder og placering (er filterintervallet kendt, er det for langt og i hvilken dybde?)
- Boringens tekniske kvalitet (er der en tæt boringsafslutning?)
- Adgangsforhold
- Markvandingsboringer (er ofte lukkede i vinterhalvåret)
- Prøvetagningssted (er der mulighed for at udtage en vandprøve)

Der vil ofte være behov for at etablere et antal nye borer, hvor filterplaceringen kan fastlægges optimalt i forhold til manglende viden. Da borer også bidrager med vigtige informationer til afklaring af den geologiske opbygning for området, anbefales det at borearbejdet koordineres med de øvrige hydrogeologiske undersøgelser for undersøgelsesområdet.

Indsamling af nye data vil ofte strække sig over en længere periode. På figur 6.1 er vist et diagram over de trin, der kan indgå i processen. Det er vigtigt at være opmærksom på, at nogle trin indebærer en risiko for forsinkelse af arbejdsprocessen. Dette gælder især hele forberedelsesfasen, hvor der skal etableres kontakt til ejerne af eksisterende borer og udarbejdes tilladelser til borearbejdet hos lodsejer og kommune.



Figur 6.1. Diagram over det tidsmæssige forløb i forbindelse med indsamling af nye data fra eksisterende borer eller nye borer.

6.2 Valg af borer

Boringstyper

Der findes en lang række boremetoder, der kan anvendes i forbindelse med indsamling af jord og vandprøver, og som på forskellig vis kan honorere de kvalitetskrav, der bør stilles i forbindelse med løsning af en boreopgave. Ofte kan der med fordel anvendes flere forskellige boremetoder i et kortlægningsområde, for at dække de forskellige behov bedst muligt.

Ingen borer kan dække alle ønsker til geologisk information, sedimentprøver og vand-analyser på en gang. Da borearbejdet ofte planlægges i samspil med den hydrogeologiske kortlægning, skal der udarbejdes en samlet strategi for at dække behovet for de forskellige datatyper.

Det vil derfor ofte indebære, at der anvendes flere forskellige boremetoder, eksempelvis en kombination af dybe skylleboringer, korte snegleboringer og ellog-boringer. Tabel 6.1 giver

en oversigt over fordele og ulemper ved forskellige boringsmetoder i forhold til indsamling af forskellige datatyper til kemisk kortlægning, herunder mulighed for filtersætning.

Der udarbejdes et kort med tilhørende tabel, der beskriver placeringen og begrundelsen for borerne under henvisning til konklusionerne af trin 1-undersøgelsen. På dette trin i kortlægningen kan det være fordelagtigt med et beslutningsmøde mellem rådgiver og Miljøcenter, inden selve borearbejdet iværksættes.

Når antallet, typen og placeringen af borerne er aftalt, skal der indhentes tilladelse til at udføre borerne hos lodsejer og kommune. Det skal fremgå klart af udbudsmaterialet til rådgiveren, hvorledes ansvaret herfor er fordelt mellem Miljøcentret og rådgiveren.

I forbindelse med borearbejdet skrives dagsrapport, hvor boreforløbet beskrives, så de problemer, der måtte opstå undervejs, dokumenteres, gerne med supplerende billeder. Forslag til dagsrapport findes i Geo-vejledning 1 (Ditlefsen m.fl., 2008).

Boremetode		Prøve	Anvendelse*	Boredybde	Bore-diameter
Tørboring	Slagboring	Sandspand	SA, FVP	30-50 m	8"-16"
	Rotationsboring	Snegl	SA, GP, FVP	0-30 m	3"-12"
Skylleboring	Direkte skylning	Cuttings/ Løst materiale	FVP	0-200 m	6"-12"
	Omvendt skylning		FVP	0-200 m	6"-12"
	Lufthæve-boring		(SA), GP, FVP	20-200 m	10"-20"
Kerneboring	Slagboring	Kerner	SA, GP	0-50 m	2"-4"
El-logboring	Rotations-boring	Sammenblandede prøver	V, SA, GP, FVP	0-80 m	4"-8"

* FVP: Filtersætning til vandprøvetagning og pejling; GP: geologisk prøvebeskrivelse; SA: sedimentprøver til kemisk analyse og V: niveaubestemte vandprøveudtagning.

Tabel 6.1 Oversigt over forskellige boremetoder samt deres anvendelighed i forbindelse med indsamling af vand- og sedimentprøver samt filtersætning (delvis efter Ditlefsen m. fl., 2008).

Praktiske forhold

Der tages udgangspunkt i oversigten over eksisterende borer i området fra trin 1. Disse gennemgås for at vurdere, hvilke der er egnede til prøvetagning. Der udarbejdes en samlet oversigt, med oplysninger om

- Filterinterval
- Geologisk information (findes der borejournal, boring i brønd etc.?)
- Hidtidig(e) prøvetagning(er), evt med resultater
- Boringens anvendelse
- Ejersforhold, kontaktperson og telefonnummer.

Når ejeren kontaktes, skal der ud over tilladelse til prøvetagning, også afdækkes mulighederne for adgang til boringen, prøvetagningssted etc. Markvandingsboringer kan være lukket ned for vinteren. Husholdningsboringer kan mangle tappesed for råvand, og etablering af en sådan kræver medvirken fra en smed eller anden fagperson.

Først når alle de praktiske forhold er afklaret, vil der være et overblik over, hvor mange prøver, der kan indhentes fra eksisterende borer.

Analyseprogram

Analyseprogrammet sammensættes med fordel af faste pakker af stoffer, f.eks. med udgangspunkt i grundvandsovervågningens eller boringskontrollens pakker med hovedbestanddele, miljøfremmede stoffer, pesticider mv. Der skal ved sammensætning af analyseprogrammet tages særligt hensyn til identificerede problemstoffer og tidligere fund i området samt stoffer, som er anvendt i området.

Feltanalyser

I alle vandprøver måles ilt, ledningsevne, pH, temperatur og redoxpotentiale i felten som beskrevet i teknisk anvisning fra grundvandsovervågningen (GEUS, 2004).

Det er vigtig jævnligt at give feltinstrumenterne et teknisk eftersyn og udføre en nøjagtig kalibrering og specielt for ledningsevнемålinger at undgå enhedsfejl (Hansen & Thorling, 2007). Ilt og pH-målinger foretages med elektroder, der skal kalibreres mod de rette standarder under temperaturer svarende til temperaturen i vandprøverne. Nogle parametre, herunder alkalinitet vil ligeledes kunne analyseres i felten, hvis det er nødvendigt for den problemstilling, der ønskes belyst. Alle feltanalyser påføres analyserekvisitionen til laboratoriet, hvorved det sikres, at de overføres sammen med resultaterne af laboratorieanalyserne til JUPITER.

Moderne feltfotometre giver mulighed for retningsgivende analyseresultater for en lang række parametre, hvor prisen og ofte også kvaliteten er konkurrencedygtig. Af praktiske grunde er det dog ikke formålstjenligt at anvende feltanalyser, undtagen i situationer, hvor der ønskes et meget hurtigt analyseresultat, sammenlignet med en typisk analysetid på 2-5 uger for laboratorieanalyser.

Måling af sulfid kan ofte være særlig vanskelig, idet stoffet nemt tabes under prøvetagningen. Selv lave koncentrationer af sulfid i vandprøven kan tydelig lugtes. Hvis der er særlig fokus på denne parameter, anbefales det at lave kontrolanalyser i felten med simple colorimetriske analysekits.

Strips kan anvendes til at undersøge tilstedeværelse af nitrat i grundvandet, men kan ikke anvendes til at kvantificere indholdet. Nitratstrips kan med fordel anvendes sammen med farvebeskrivelser af sedimentet til beslutning om filterplacering.

Laboratorieanalyser

Før udtagning af prøverne skal analyseprogram og flaskehåndteringen aftales med laboratoriet. Som regel skal prøverne analyseres på det laboratorium, som Miljøcentret har kontrakt med til deres analyseopgaver. Prøveudtagningen skal ske i overensstemmelse med teknisk anvisning (GEUS, 2004).

I felten opbevares vandprøverne på køl og bringes hurtigst muligt til analyselaboratoriet. Det skal fremgå af kontrakten med Miljøcentret, hvorledes kvalitetssikringen af analyser skal ske, når analyseresultaterne ligger i JUPITER i ikke godkendt form.

6.3 Vandkemiske data fra nye boringer

Vandkemiske analyser fra nyetablerede boringer kan udføres såvel under borearbejdet som i færdigt udbyggede boringer. I begge tilfælde er det vigtigt at tage højde for, at prøverne kan være påvirkede af borearbejdet. Ved ellogboringer er det specielt suspenderet stof, der udgør et problem for vandanalyserne, og det er ikke altid muligt at filtrere prøverne uden at disse iltes, medmindre der anvendes specialudstyr.

Praktiske forhold

Når boringen har nået den ønskede dybde, filtersættes den. Der sættes så vidt muligt flere filtre i samme boring, så grundvandets sammensætning i forskellige dybder kan vurderes. Til støtte for valg af filtersætningsdybden anvendes den foreløbige beskrivelse af de genborede lag samt evt. analyseresultater fra vandprøver, udtaget under borearbejdet. Om muligt filtersættes over og under nitratfronten eller forsuringsfronten samt i de lag, der er relevante for en overordnet forståelse af ressourcens kvalitet. Filtersætningen bør ske i samarbejde med den øvrige hydrogeologiske kortlægning, idet f.eks. potentialer i de filtersatte lag er vigtige oplysninger.

Af hensyn til at få vandprøver og potentialer fra veldefinerede lag, anbefales det at anvende filterlængder på mindre end 2 meter. Antallet af filtre, der er plads til i en boring, vil afhænge af dimensionerne af selve boringen, og det anbefales at vælge dimensioneringen, så der er plads til 3-4 filtre med et forerør med en indre diameter på 63 mm. Denne dimensionering sikrer, at en passende dykpumpe senere vil kunne nedsænkes.

Ren- og forpumpning af boringen før prøvetagning er helt afgørende for prøvens kvalitet og repræsentativitet. I boringer, hvor der er anvendt boremudder, kan boremudderet give anledning til en mere reduceret vandprøvekvalitet, og boremudderets ofte store ionbytningskapacitet kan også give betydelige fejl på analyseresultatet. Nye boringer bør prøvetages med mindst 6 måneders mellemrum for at dokumentere, om den første prøve var påvirket af borearbejdet. Indsvingningstiden for vandkvaliteten i nye boringer, der ikke anvendes til vandindvinding, kan være flere år, hvis ikke der er foretaget en tilstrækkelig renpumpning efter borearbejdet for derigennem at reducere boremudderets påvirkning på vandkvaliteten.

For yderligere detaljer henvises til Teknisk Anvisning for Grundvandsovervågningen (GEUS, 2004).

Analyseprogram

Analyseprogrammet sammensættes med fordel af faste pakker af stoffer, f.eks. med udgangspunkt i grundvandsovervågningsens eller boringskontrollens pakker med hovedbestanddele, miljøfremmede stoffer, pesticider mv. Der kan nogle gange være behov for at udtage prøver under selve borearbejdet, hvis det er en fordel med et hurtigt analyseresultat, idet der skal træffes beslutning om filtersætning eller om at bore videre. Dette gælder

f.eks. i forbindelse med ellogboringer. Moderne feltfotometre giver under rette brug hurtige og nyttige resultater, f.eks. i løbet af borearbejdet, for mange hovedbestanddele, som eksempelvis for nitrat og klorid.

Feltanalyser

Feltanalyserne foretages som beskrevet i afsnit 6.2 "Valg af boringer"

Laboratorieanalyser

Når der udtages prøver i nye boringer, er det vigtigt, at laboratoriet hurtigst muligt modtager oplysninger om boringens DGU nr. og anden ID, der er nødvendig for prøvens håndtering i laboratoriet og senere i JUPITER. Det er derfor vigtigt, at der indhentes et DGU nr. hos GEUS, i samme øjeblik borearbejdet går i gang. I øvrigt henvises til afsnit om laboratorieanalyser i eksisterende boringer.

6.4 Sedimentkemiske data fra nye boringer

I forbindelse med den grundvandskemiske kortlægning kan der udtages prøver til forskellige sedimentkemisk analyser, herunder bl.a. til bestemmelse af jordlagenes nitratreduktionskapacitet.

Sedimentkemiske data fra nye boringer omfatter

- Sedimentkemisk beskrivelse af prøverne i felten eller hurtigst muligt efter prøvetagning
- Sedimentkemiske analyser i laboratoriet

Udtagning af sedimentprøver i felten

De sedimentkemiske prøver bør udtages efter en nøje gennemtænkt prøvetagningsstrategi, hvor krav til prøvetagningsdybder, homogenisering, sammenblanding af prøver, neddeling etc. beskrives. Prøvetagningsstrategien skal sikre, at prøverne er repræsentative for de geologiske enheder, hvorfra der ønskes geokemiske informationer.

Vedrørende prøvetagningsstrategier og tolkningsmuligheder kan der for nærværende hentes inspiration fra Århus Amt (2006a), hvor der er givet forslag til metode til optimering af den sedimentkemiske prøvetagning, som tager udgangspunkt i den statistiske teori TOS (Theory of Sampling).

Hvis der ikke foreligger en strategi for udtagningen af sedimentprøver til kemisk analyse anbefales det, at der udtages sedimentprøver fra hver meter i boringen samt ved lagskifte.

Emballering af sedimentprøver

Før sedimentprøverne emballeres, renses de grundigt for materiale, der stammer andre steder fra i boringen. Luftens indhold af ilt påvirker kun i ubetydelig grad den kemiske og mineralogiske sammensætning af sedimentprøver fra den oxiderede zone, mens prøver fra den nitratholdige og den reducerede zone påvirkes ved kontakt med atmosfæren.

Når prøver udtages med snegl renses de for fremmed materiale før emballering. Udtagning af prøver fra andre boretyper kan bevirke, at sedimentet først placeres på en fiberdug eller udtages fra eksempelvis en murerbalje. Her er det nødvendigt at være meget varsom ved prøvetagningen for ikke at få evt. iltet materiale med.

Til brug for de efterfølgende analyseprogrammer skal der normalt kun bruges lidt materiale men det anbefales, at der udtages 100-200 g prøve, som hurtigst muligt emballeres for at undgå udtørring og eventuel iltning af prøven. Det anbefales, at anvende en lufttæt emballage, eksempelvis metaldåser, hvor sedimentprøven indledningsvis er anbragt i en plasticpose (eksempelvis polyethylen-poser eller rilsanposer) for at sikre, at der ikke sker en afsmittning fra dåsen. Hvis sedimentprøverne skal fryses, kan det ikke anbefales at anvende rilsanposer, idet disse poser let går i stykker, når de fryses, hvilket vanskeliggør den senere håndtering i laboratoriet. Hvis sedimentprøverne imidlertid ønskes anvendt til analyse af tungmetaller (og hvor frysning ikke er nødvendig), bør der anvendes rilsanposer.

Sedimentanalyse	Opbevaring af sedimentprøve					
	I felten			Indtil analyse		
	Frys	Køl	Lufttemp.	Frys	Køl	Stuetemp.
Ammonium	•	•		•		
Ferrojern	•	•		•		
Fosfor			•	•	•	
Glødetab			•			•
Jernoxider			•			•
Kalkindhold			•			•
Kationombytningskapacitet (CEC)			•			•
Kornstørrelsesfordeling			•			•
Lermineralogi	•	•		•		
Ombyttelig mangan	•	•		•	•	
Manganoxider			•			•
Nitrat						
Ombyttelige baser			•			•
Organisk stof (TOC)	•	•		•		
pH			•			•
Pyrit	•	•		•		
Nitratreduktionskapacitet	•	•		•		
Tungmetaller			•			•
Vandindhold	•	•		•	•	

Tabel 6.2. Oversigt over hvorledes sedimentprøver anbefales opbevaret i felten efter udtagning samt i perioden fra udtagning og indtil analyse. Hvis der skal foretages flere analyser på den samme jordprøve opbevares prøven ved den laveste temperatur analysepakken foreskriver.

Sedimentprøverne opbevares ved stuetemperatur, på køl eller i frossen tilstand afhængig af det ønskede analyseprogram, jfr. tabel 6.2. Sedimentprøver, der skal opbevares koldt, anbringes på køl straks efter udtagning i felten. Sedimentprøver, der skal opbevares frosne, overføres hurtigst muligt, normalt ved ophør af dagens arbejde, til en fryser, hvor de opbevares indtil analyse.

Sedimentkemisk beskrivelse i felten

Det anbefales, at sedimentprøverne beskrives i felten umiddelbart efter de er udtaget. Prøvebeskrivelserne omfatter:

- En geologisk beskrivelse
- Påvisning af kalk, med saltsyre (10 % HCl), Hvis det bruser, er det en positiv indikator for kalk. Oplysninger om kalkindholdet bidrager til en kortlægning af kalkfrie zoner, herunder udbredelsen af den sure front, der sammen med andre data om redoxforhold bidrager til kortlægningen og beskrivelse af forskellige geokemiske miljøer. Dybereliggende kalkfrie zoner kan ligeledes indgå kortlægningen af hydraulisk aktive lag.
- Påvisning af organisk stof med natriumhydroxid (3 % NaOH). Mørkfarvning af prøven er en positiv indikator for organisk stof.
- Påvisning af manganoxider med brintoverilte (10 % H₂O₂). Mørkfarvning af prøven er en positiv indikator for manganoxider.
- Beskrivelse af sedimentets farve. Sedimentprøvens basisfarve og farvemønstre beskrives ved brug af et farvekort. Det anbefales, at anvende Munsell soil color charts. Iltede jordlag er typisk gule, gulbrune, brune og gråbrune farver, mens reducerede jordlag er grå, brungrå, grågrønne eller sorte (Ernstsen m.fl., 2001). Afhængig af boremetode kan det være ønskeligt at beskrive såvel sediments egenfarve som skyllevandets farve, idet nogle prøver har en stærk egenfarve, som dækker over bl.a. jernoxider, der kan iagttages i skyllevand.

Sedimentkemisk beskrivelse i laboratoriet

Sker den sedimentkemiske prøvebeskrivelse ikke i felten, stilles der ikke yderligere krav til opbevaring, idet det dog anbefales, at beskrivelsen finder sted hurtigst mulig efter at sedimentprøverne er udtaget. Prøvebeskrivelsen i laboratoriet sker efter samme fremgangsmåde som ovenfor beskrevet i afsnittet "sedimentkemisk beskrivelse i felten".

Sedimentanalyser i laboratoriet

Valget af analyseprogram afhænger af formålet med undersøgelsen. Nogle analyser gennemføres på ubehandlet, naturfugtig jord, mens andre analyser gennemføres på luft- eller ovntørret sediment, hvorfra de største partikler først fjernes ved sigtning (typisk gennem en 2 mm sigte), hvorefter analysen gennemføres på finjordsfraktionen (< 2mm).

I sedimenter, hvor finjordsfraktionen udgør en ringe del (10-20 %) af den totale sedimentprøve, anbefales at supplere med kornstørrelsesanalyser for de tilsvarende geologiske lag, hvis redoxkapaciteten ønskes beregnet. For langt de fleste typiske sedimenter vil det ikke være nødvendigt at bestemme kornstørrelsessammensætningen forud for beregningen, idet andre usikkerheder såsom volumenvægte, naturlig variation mm., ligeledes indvirker på beregningen.

Nitratreduktionskapacitet – potentiel og aktuel

I den hidtidige kortlægning af jordlagenes nitratreducerende evne har den normale procedure omfattet analyser af pyrit, organisk stof og ferrojern (Ernstsen m.fl., 2001).

I en beskrivelse af sedimenternes potentielle nitratreduktionskapacitet summeres bidraget fra pyrit, organisk stof og ferrojern (strukturelt og ombytteligt) i reducerede sedimenter. For

at begrænse udgifterne til kortlægningen, eller fordi prøverne er blevet kontamineret med organisk stof og ferrojern under borearbejdet (e.g. lufthæveboringer), kan man vælge at reducere analyseprogrammet til udelukkende at omfatte pyrit, der antages at repræsentere den mest aktive pulje af nitratreduktionskapacitet. Ved at sammenligne puljen af pyrit, organisk stof og ferrojern i reducerede sedimenter med den tilsvarende pulje i oxiderede sedimenter, kan den aktuelle, tilgængelige, pulje af nitratreduktionskapacitet beregnes (Ernstsen m.fl., 2001).

Valg af analysemetode

Bestemmelse af pyrit med røntgendiffraktion - Indholdet af pyrit i sedimentet kan måles ved røntgendiffraktion (XRD). Detektionsgrænsen for pyrit ved denne metode er forholdsvis høj, ca. 1 w/w %, hvorfor metoden normalt ikke anvendelig for de mest typiske danske sedimenter.

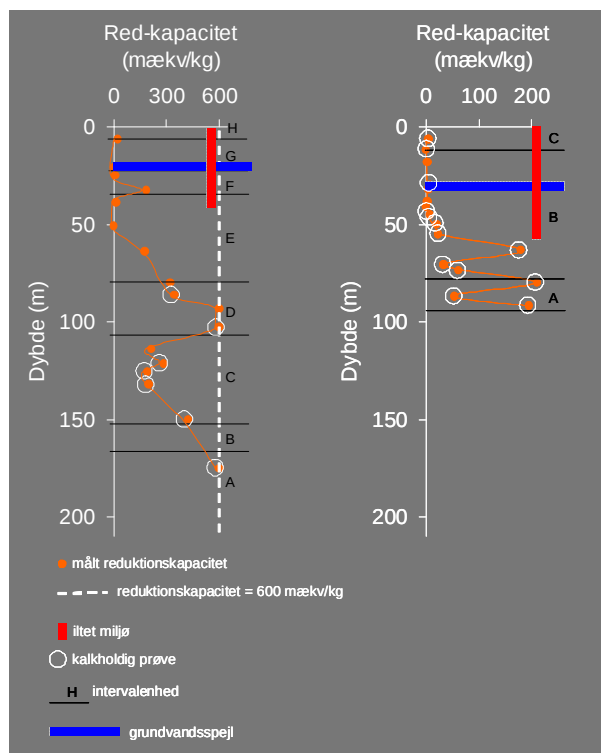
Bestemmelse af pyrit med to-trins-kogning med salt- og saltpetersyre - Her bestemmes pyrit efter et to trins kogeprogram, hvor prøven først koges med saltsyre for at fjerne al jern på nær det, som indgår i pyrit. Jern i pyrit opløses ved den efterfølgende kogning med salpetersyre. Herefter måles prøvens indhold af jern, der omregnes til pyrit (FeS_2). Hvis kogetiden med saltsyre er for kort, kan der være jernoxid tilbage efter den første kogning, som efter kogning med salpeter indgår i slutmålingen af jern og dermed bidrager til falske positive værdier for geokemiske miljøer, hvor pyrit ikke forventes at være tilstede. De såkaldte falske positive værdier er normalt kun knyttet til prøver fra den oxiderede zone, hvor kogningen i forbindelse med 1. trin af analysen ikke indebære den nødvendige fjernelse af jernoxider. En rest pyrit kan undtagelsesvis forekomme under oxiderede forhold, hvis pyritkrystaller er blevet kapslet ind i en kappe af jernoxider i forbindelse med iltningen. Der er således god grund til at være opmærksom på, at tilsyneladende indhold af pyrit under fuldt ud oxiderede forhold, kan skyldes en for utilstrækkelig prøveforbehandling.

Bestemmelse af ferrojern - Ferrojern bestemmes spektrofotometrisk efter kogning med en blanding af svovlsyre (H_2SO_4), flussyre (HF) og phenantrolin ($\text{C}_{12}\text{H}_9\text{ClIN}_2$, H_2O) eller ved titrering af Fe(II) .

Bestemmelse af organisk stof - Indholdet af organisk stof (eller TOC: total organic carbon) bestemmes ved udviklingen af kuldioxid (CO_2) når det forbehandlede og nedknuste sediment opvarmes under tilførsel af ilt. Målingen foretages på finjordsfraktionen ($< 2 \text{ mm}$) efter forbehandling med saltsyre (HCl) for at fjerne eventuelt kalk. Den overskydende saltsyre fjernes ved at vaske prøven gentagne gange med vand. Fjernes saltsyren ikke fuldstændig, vil det tilbageblevne klorid måles sammen med kuldioxid, og mængden af organisk stof vil fremstå større end den egentlig er.

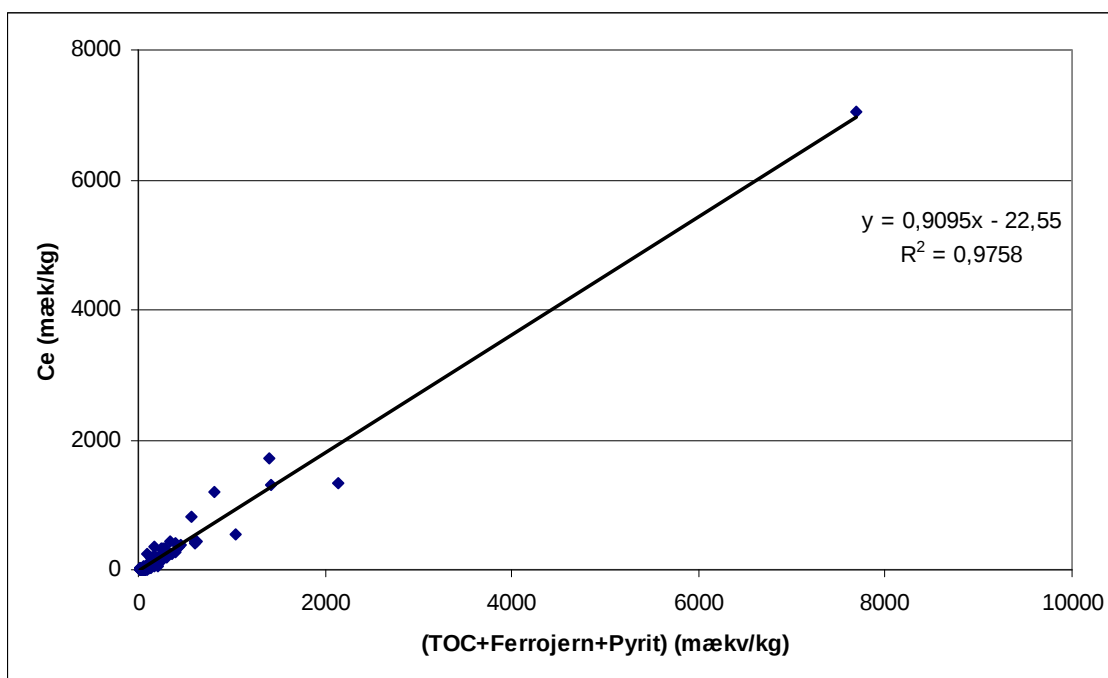
Total bestemmelse af nitratreduktionskapacitet. Det er også muligt at bestemme den totale tilgængelige pulje af nitrat-reduktionskapacitet. Her kan bl.a. anvendes en metode, hvor forbruget af en cerium(IV)-opløsning i kontakt med jordprøven bestemmes ved titrering med ferrosulfat (Ernstsen m.fl., 2005). Prisen for denne analyse af den samlede reduktionskapacitet er langt billigere end den samlede pris for analyser af parametrene pyrit, organisk stof og ferrojern. Den forholdsvis billige analysemetode kan med fordel anvendes til at forøge antallet af analyser per boring for derigennem at opnå et bedre kendskab til variationen i reduktionskapaciteten i finjordsfraktionen med dybden samt i et større antal borin-

ger til en beskrivelse af den geografiske fordeling af reduktionskapacitet. I figur 6.2 vises resultaterne fra et par dybe borer, hvor sedimentprøverne er udtaget med lufthævemetoden.



Figur 6.2. Nitratreduktionskapacitet i finjordsfraktionen bestemt ved ceriummetoden i to borer.

Udvalgte prøver vil efterfølgende kunne analyseres på "enkeltparameter" niveau for derigennem at få et øget indblik i fordelingen af forskellige puljer af reducerende forbindelser som f.eks. pyrit, organisk stof og ferrojern. I figur 6.3 ses sammenhængen mellem reduktionskapaciteter bestemt ved brug af ceriummetoden og reduktionskapaciteten beregnet på basis af analyser af pyrit, organisk stof og ferrojern.



Figur 6.3. Nitratreduktionskapacitet i finjordsfraktionen (<2mm) bestemt ved ceriummetoden (y-aksen) og ved puljer af organisk stof (TOC), ferrojern og pyrit (x-aksen) i sedimenter.

6.5 Kvalitetskontrol

De nye vand- og sedimentkemiske dataresultater skal dels kvalitetskontrolleres af analyselaboratoriet efter gældende kvalitetskrav (Analyse kvalitetsbekendtgørelsen, 2006) og af fagpersonen, som står for den kemiske grundvandskortlægning, hvilket er beskrevet i kapitel 4.

Med hensyn til de vandkemiske analyseresultater bør der udføres mindst 2 prøvetagninger. Den første prøvetagning udføres ca. 1-3 måneder efter etablering af boringen afhængig af renpumpningen. Anden prøvetagning udføres ca. 1 år efter etablering af boringen. Vandkvaliteten under den første prøvetagning vil ofte være præget af etableringen, som f.eks. ofte påvirker NVOC og natriumindholdet. Den anden prøvetagning skal verificere resultaterne fra første prøvetagning og klarlægge, om etableringseffekten er ophørt.

6.6 Dataopbevaring

Det anbefales at både vand- og sedimentkemiske data lagres i JUPITER.

7. Præsentationer

Præsentation af kemiske data i form af grafer og kort er af afgørende betydning for en vellykket kemisk grundvandskortlægning. Årsagen er, at der skal håndteres så store data-mængder, at disse ikke kan overskues i tabelform. Formålet med visuelle præsentationer er dermed at lette tolkningsarbejdet ved at skabe det nødvendige overblik og fremhæve vigtige sammenhænge og tendenser samt at videreformidle den opnåede forståelse til andre. Præsentationer anvendes i både Trin 1b og Trin 2b.

Inden arbejdet med præsentationer påbegyndes, anbefales det, at der foreligger en accept af datagrundlaget fra miljøcenteret, se afsnit 4.3. Desuden bør de ønskede udledte data såsom magasintilhørsforhold, sedimentfarveskift, redoxvandtype og beregningsparametre være frembragt, se afsnit 4.4.

Der findes utallige grafer og kort, der potentielt kan udarbejdes i forbindelse med den kemiske grundvandskortlægning. Kunsten består i at udvælge de vigtigste og mest informative præsentationer, sådan at der opnås en tilstrækkelig geokemisk forståelse af grundvandsmagasinerne i kortlægningsområdet. Dette kapitel vil præsentere et udvalg af kemiske præsentationer, som det anbefales at udarbejde under en kemisk grundvandskortlægning.

Ud over præsentation af kemiske data, kræver en grundvandskortlægning inddragelse af data fra andre fagområder. Her tænkes på lertykkelseskort, potentialekort, placering af vandværker, indvindingsboringer opland, det grundvandsdannende opland, områder med opadrettet gradient, m.fl. Disse præsentationer omtales ikke i denne rapport. Denne vejledning omtaler heller ikke præsentationer i forbindelse med sårbarhed, da dette er baseret på flere fagområder og ikke geokemi alene.

Når geokemiske data præsenteres, skal der altid angives oplysninger om de anvendte data. Dette gøres bedst i forbindelse med visualiseringen, f. eks. i figurteksten til en graf eller i nøglen til et kort. Følgende forhold kan være vigtigt at notere:

- Angivelse af hvilke data, der er vist
- Dato for udtræk fra JUPITER
- Total antal boringer
- Total antal analyser
- Periode analyser stammer fra

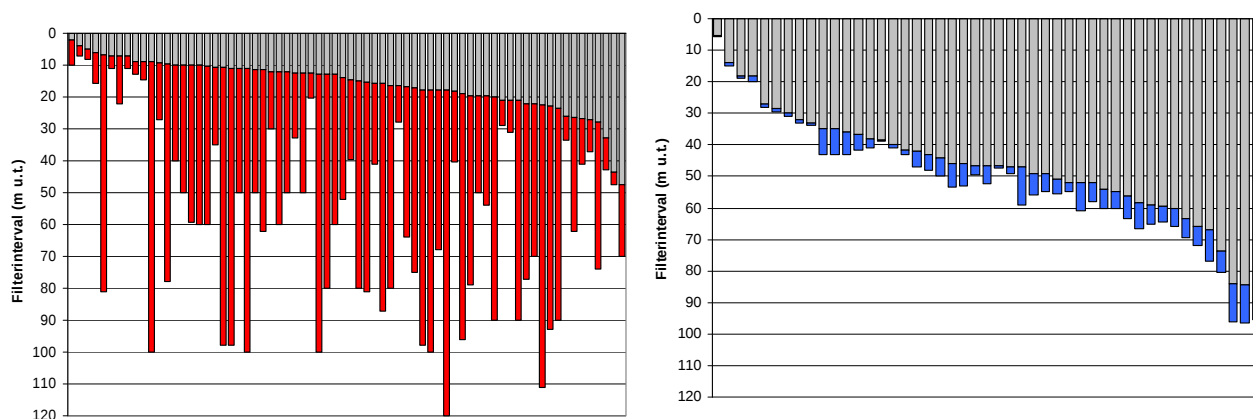
Hvad der menes med "Angivelse af hvilke data, der er vist" belyses ved hjælp af nogle eksempler.

- På et fraktilplot over kloridmålinger skal det angives om samtlige analyseresultater er medtaget, eller om kun den seneste måling i hvert indtag er med.
- På et scatterplot af nitrat mod sulfat, hvor det skal præciseres om der er tale om anvendelse af de seneste sammenhørende data (nitrat og sulfat i hvert indtag stammer fra samme prøvetagningsdato), eller om der er anvendt den seneste måling for hvert parameter uanset prøvetagningsdato.

- Ved sammenligning af ionbytningsgrad for forskellige kildepladser skal det angives, om der er anvendt en middelværdi eller en medianværdi.

I de følgende afsnit findes eksempler på de mest grundlæggende præsentationsmetoder til kemisk grundvandskortlægning. Det er tanken, at disse eksempler skal tjene som inspiration frem for at sætte en begrænsning for hvilke visualiseringer, der må anvendes. De viste præsentationsmetoder kan tilpasses/forbedres efter behov, ligesom specielle forhold kan kræve helt andre præsentationer.

7.1 Filterintervalsplot



Figur 7.1 Eksempel på filterintervalsplot. Et filterintervalsplot defineres om et søjlediagram, der viser længden af forerøret (gråt) og filterintervallet eller det åbne interval (rødt og blå) i forhold til terræn for borerer indenfor et bestemt område.

Definition: Et filterintervalsplot er et søjlediagram, der viser længden af forerøret (gråt) og filterintervallet eller det åbne interval (rødt og blå) i forhold til terræn for borerer indenfor et bestemt område.

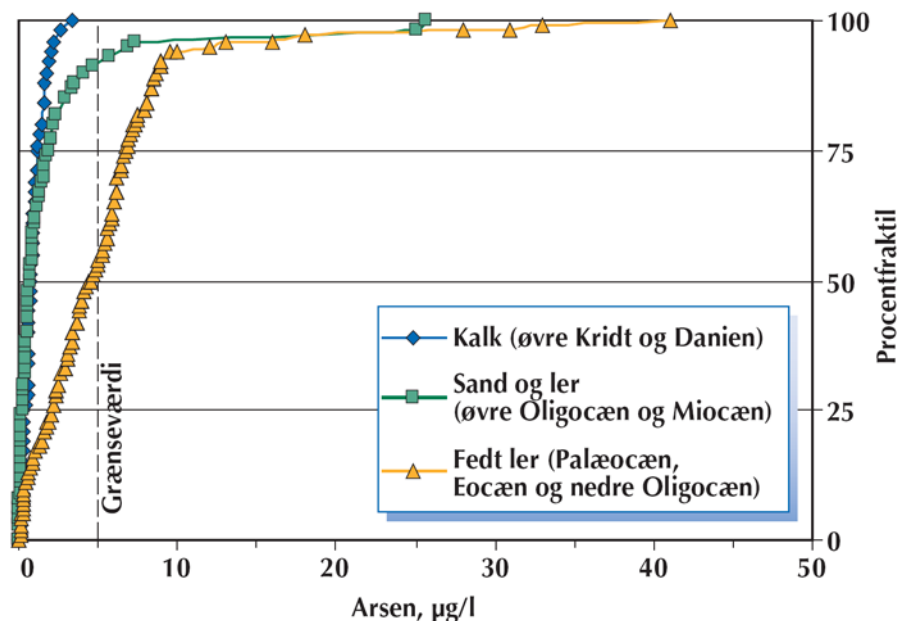
Figur 7.1 viser med rødt ekstremt lange filtre/åbne intervaller, der giver risiko for blandingsvand. Samtidig ses at filtertop ofte er terrænnært placeret, hvorfor der kan være tale om et sårbart magasin. Dette er ikke usædvanligt i et kalkmagasin. Eksemplet i blå viser korte filterintervaller som kan være typisk for et sandmagasin med begrænset mægtighed.

Fordele: Dette plot giver overblik over såvel filterdybde som filterlængde.

Ulemper: Data om filtertop og filterbund i JUPITER kan være mangelfuld. I åbentstående kalkboringer kan man i stedet anvende bunden af forerør som filtertop og bunden af boring som filterbund som erstatning for filtertop og –bund. Der skal udvises forsigtighed ved tolkning af grafen. Hvor der er tale om skrånende terræn eller skråstillede geologiske lag, kan der let fejltolkes. I begge tilfælde er dybden ikke nødvendigvis ensbetydende med ældre eller bedre beskyttet vand.

Opstillingstips: Dybdeaksen bør vendes, så stigende dybder er nedad. Dette plot udarbejdes ved at bruge et stablet søjlediagram, hvor afstanden fra terræn til filtertop fremhæves med svag farve og filterlængde (forskul mellem filterbund og filtertop) stables ovenpå og fremhæves med stærk farve. Kategoriaksen kan rangordnes efter dybden til filtertop (som eksemplet) eller efter DGU nr. Der kan laves et separat plot for hvert magasin.

7.2 Fraktildiagram



Figur 7.2 Fraktildiagram, som viser fordelingen af arsen i råvand i forhold til karakteren af den prækvartære overflade i Århus Amt. Middelværdier fra samtlige borer fra 1987 til 1. maj 2002. I alt 266 borer anvendt (Hansen m.fl., 2002).

Definition: Et fraktildiagram er en visualisering af statistiske fraktiler og viser den kumulative distribution af alle fundne koncentrationer for en enkelt parameter indenfor et geografisk eller geologisk ensartet område.

Figur 7.2 viser et eksempel på et fraktildiagram, som viser fordeling af arsen i grundvandet som funktion af karakteren af den prækvartære overflade med tydelig forskel mellem de 3 grupper af data. Denne forskel vil være svær at opdage uden hjælp af denne visualisering.

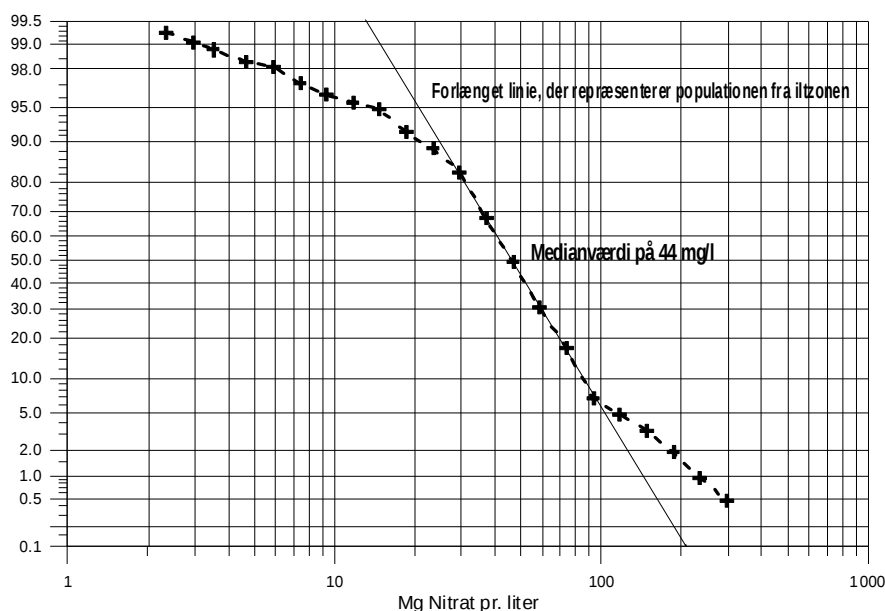
Fordele: Kan anvendes til at afgøre om en koncentration er typisk eller usædvanlig. Gør det let at få øje på eventuelle resultater under detektionsgrænsen samt ekstremt høje værdier. Vilkaarlige fraktiler (herunder median) kan aflæses. Indeholder derved flere oplysninger end box/whisker, hvor der typisk kun vises 3 fraktiler (box) og maks/min-værdier (whiskers).

Ulemper: Kræver mange plots, hvis mange parametre skal visualiseres. Diagrammet kræver lidt øvelse at forstå. Som alternativ, kan man lave en såkaldt "box-whisker" plot, der indeholder færre oplysninger, men er lettere at læse.

Opstillingstips: Der anbefales kun at sætte en eller få parametre på det enkelte plot. Til parametre, hvor koncentrationer kan svinge over store koncentrationsintervaller (f. eks. pesticider), kan x-aksen evt. være logaritmisk. Det foreslås, at der som minimum udarbejdes plot for nitrat, klorid, sulfat, calcium, ionbytning, forvitring, pH og problemstoffer samt dybde til farveskift (hvis dette fastlægges).

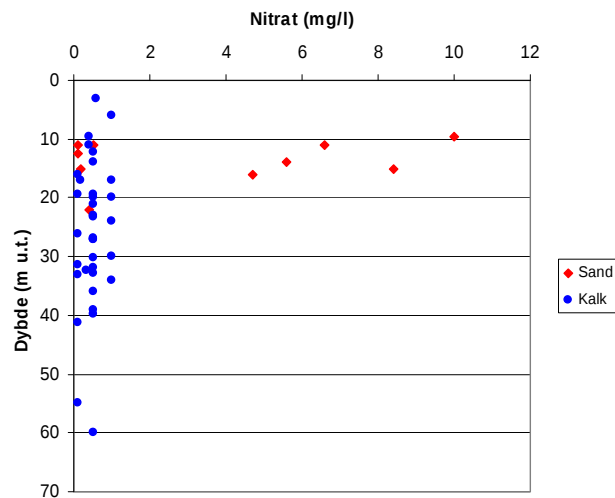
Som supplement, kan man optegne et fraktildiagram på sandsynlighedspapir, se eksemplet i figur 7.3. Ud over de fordele, som et almindeligt fraktildiagram giver, kan man vise, om der er tale om flere populationer i datamængden, da disse optræder som rette liniestykker. Hvis der er to eller flere geokemiske populationer i datamængden, vil kurven knække et eller flere steder. Det er derfor muligt at erkende de geokemiske populationer. Ulempen med metoden er, at diagrammet er besværligt at lave med de tilgængelige softwareprogrammer. Excel har ikke en færdig makro, der kan lave diagrammet.

I eksemplet i figur 7.3 knækker kurven omkring 83 % niveauet og ved 7 % niveauet. Det viser tre næsten rette liniestykker, hvormed der er formentlig tale om tre populationer. Liniestykket med de laveste nitratkoncentrationer (til venstre i grafen) kan repræsentere vand fra naturområder (samt blandingsvand, der kommer fra boringer med lange filtre, hvori vand fra iltzonen blandes med reduceret vand). Det midterste liniestykke kan repræsentere nitratværdierne fra iltzone i landbrugsområder. Liniestykket med de højeste nitratkoncentrationer (til højre i grafen) kan vise vandprøver med et gårdbidrag, dvs. nedsivning fra ajlebeholdere, m.m..



Figur 7.3 Eksempel på fraktildiagram på sandsynlighedspapir.

7.3 Dybdeplot



Figur 7.4 Eksempel på dybdeplot

Definition: Et dybdeplot er et plot, der typisk viser den seneste målte koncentration af en parameter i hvert indtag afbildet mod filterdybde, dybde under grundvandspejlet eller kote.

Figur 7.4 viser et eksempel på et dybdeplot. Figuren viser et område, hvor der kun findes nitratværdier over 2 mg/l terrænnært i et sandmagasin. Her afbildes dybde til filtertop.

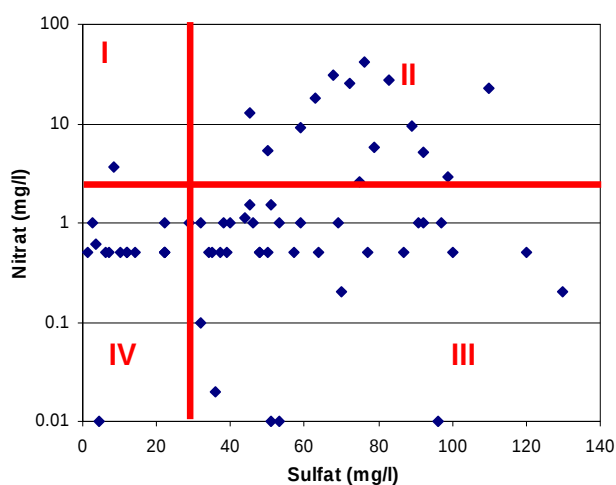
Fordele: Plottet giver et hurtigt overblik over fordelingen af et stof med dybden.

Ulemper: Den mest egnede y-akse kan afhænge både af geologi og parameter. Hvis det aktuelle område har en skrånende topografi og/eller skråstillede geologiske lag, kan man anvende et geologisk snit til at vurdere hvilken y-akse, der giver mest mening. Hvis den aktuelle parameter stammer fra terræn (f. eks. nitrat), kan det give mening at anvende dybde som y-aksen, mens hvis den aktuelle parameter stammer fra dybden (f. eks. fluorid) kan det give mening at anvende kote.

Hvis resultatet vises som et punkt, tager plottet ikke højde for filtre med indstrømning andre steder i filtret. Alternativ kan man erstatte hvert punkt med en streg, der repræsenterer hele filterintervallet. Her skal man dog vurdere, om de enkelte streger dækker over hinanden således, at grafen bliver svært at læse. Hvis der anvendes punkter, anvendes normalt filterets top, når der er tale om forurening fra overfladen og filterbund, hvis der er tale om f. eks. klorid fra dybtliggende residual saltvand.

Opstillingstips: Koncentrationen sættes på x-aksen og dybden/koten sættes på y-aksen således at stigende dybde afbildes nedefter. Plot med koncentration mod dybden til grundvandspejlet kan være relevant i område med stor og varierende tykkelse af den umættede zone.

7.4 Scatterplot



Figur 7.5 Eksempel på scatterplot, hvor nitrat er afbilledet møde sulfatindholdet.

Definition: En graf med ikke-forbundne punkter, hvor hver akse repræsenterer en kemisk parameter. De afbildte parametre kan godt være afledte, f. eks. forvitningsgrad mod hårdhed.

Eksemplet viser et klassisk nitrat/sulfat scatterplot, hvor grafen er opdelt i fire og y-aksen er logaritmisk. Grundvandets udvikling langs en strømningsbane er ofte fra II til III til IV, mens område I ikke bør forekomme.

Fordele: Grafen er meget fleksibel og kan give indsigt i mange forskellige processer, der er væsentlige for grundvandets sammensætning. Grafen gør det let at få øje på usædvanlige resultater og tendenser i data. Der kan afbildes mange resultater på én graf.

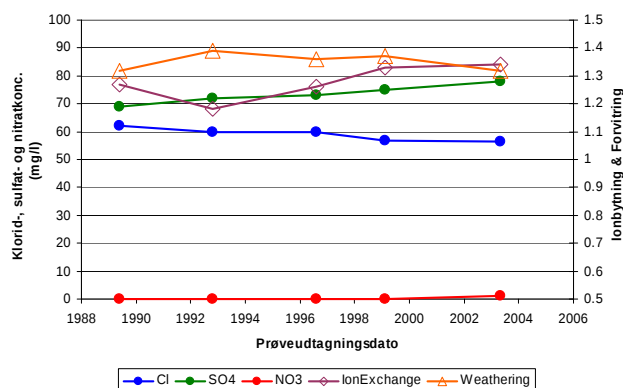
Ulemper: Det er nødvendigt med et vist forhåndskendskab til geokemiske processer i området for at kunne vælge, hvilke scatterplots der er mest egnede.

Opstillingstips: Ved at bruge forskellige signaturer (symbol, farve) kan evt. forskelle mellem forskellige talserier (f. eks. øvre/nedre magasin, eller redoxvandtype A, B, C & D) fremhæves. Der er valgt at fremhæve nogle af scatterplottene i tabellen nedenfor, som med fordel kan udføres under den kemiske grundvandskortlægning.

x-akse	y-akse	Belyser
Sulfat	Nitrat	Indikation af vandets alder og redoxforhold
Calcium	Sulfat	Pyritoxidation
Natrium	Klorid	Ionbytning og saltvandspåvirkning
Hydrogencarbonat	Sulfat	Sulfatreduktion
Ionbytningsgrad	Forvittringsgrad	Indikation af vandets alder, årsag til lav forvittringsgrad, m.m.
Na/(Na+Ca)	Forvittringsgrad	Vandtype /Pratt, 2003/
Calcium	Fluorid	Mætning med fluorit
Ca/Mg	Fluorid	Indikation af alder i kalkmagasiner
Jern	Arsen	Potentielle kvalitetsproblemer efter vandbehandling
Carbonat (beregnes)	Jern	Mætning med siderit
Teoretisk iltforbrug	H_2S+CH_4	Mulighed for acceptabel vandkvalitet efter almindelig vandbehandling

Tabel 7.1. Eksempler på scatterplots som med fordel kan udføres under den kemiske grundvandskortlægning.

7.5 Tidsserie



Figur 7.6 Eksempel på tidsserie

Definition: En tidsserie er en graf, der viser koncentrationsudviklingen af en parameter (i råvand eller rentvand) med tiden. En kurve kan f.eks. kategoriseres som stigende, faldende, stabil eller varierende. Eksemplet viser 5 parametre fra samme indtag på én graf.

Fordele: Tidsserier gør det muligt at:

- afgøre om vandkvaliteten er stabil
- få en visuel fornemmelse af størrelsen af variationen
- forudse risikoen for fremtidige vandkvalitetsproblemer
- vurdere om indvindingen på en kildeplads er bæredygtig
- underbygge viden om dæklagstykkelser og forekomsten af geologiske vinduer
- underbygge viden om vandspejlsfluktuationer
- afsløre vigtige geokemiske processer
- kvalitetssikre kemiske data ved at synliggøre ekstreme værdier

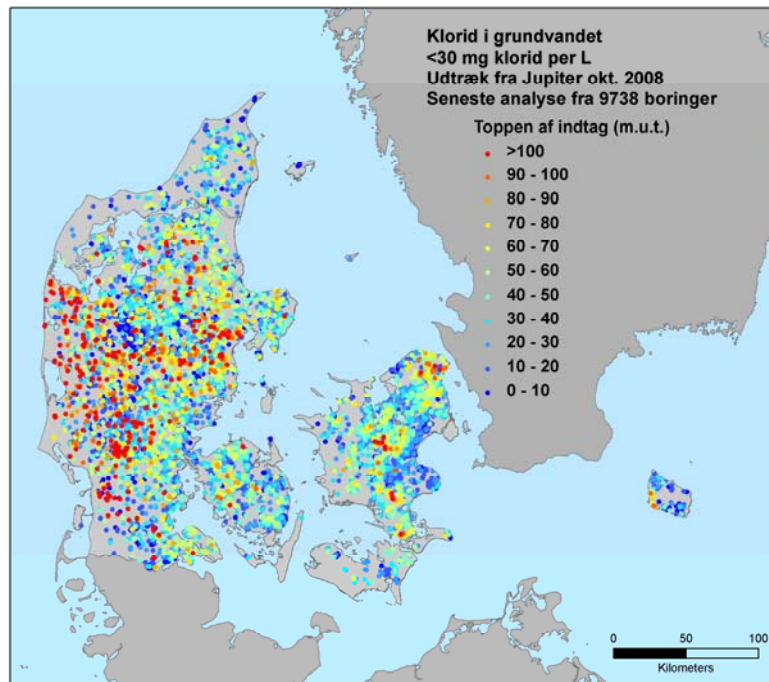
Ulemper: Det kræver mange grafer at dække mange indtag og mange parametre.

Opstillingstips: Det foreslås, at tidsserier kun opstilles, hvis der forekommer minimum 3 målinger fra en tidsperiode på mindst 5 år. Endvidere skal der udvælges hvilke borer, det giver mest mening at lave graferne for. Ofte vælges borer med stor indvinding.

I forbindelse med grundvandskortlægningen er det relevant at identificere tidslige udviklingstendenser (trendanalyse) for specielt indvindingsboringer med lange tidsserier (>20 år) med henblik på vurdering af vandværkets eller grundvandsressourcens kemiske tilstand. Det anbefales, at der foretages en subjektiv vurdering af om et problematisk stof (f.eks. nitratkoncentrationen eller sulfatkoncentrationen) udviser en stigning eller et fald. Det er også muligt at anvende statistiske værktøjer til trendanalyse (se f.eks. European Commission (2001) og European Commission (2009)).

Flere oplysninger om tidsserier findes i kapitel 5.

7.6 Temakort



Figur 7.7 Eksempel på temakort som både viser geografisk og dybdemæssig fordeling af kloridkoncentrationer < 30 mg/l (Kristiansen m.fl., in press).

Definition: Et fladekort der viser punktoplysninger af en eller flere kemiske parametres koncentration

Eksemplet i figur 7.7 viser en sammenstilling af kloridkoncentrationer (< 30 mg/l) i grundvandet med den geografiske og dybdemæssige placering af toppen af filteret (m.u.t.). Det fremgår af figuren at dybdeboringer med et lavt kloridindhold hovedsagelig findes vest for hovedopholdslinien for sidste istid og muligvis også i forbindelse med begravede dalsystemer andre steder i landet.

Fordele: Et temakort kan give et hurtigt overblik både over de kemiske parametres udbredelse i et område og datatætheden. Der kan udarbejdes temakort over andre data end kemiske parametre. Her tænkes specielt på temakort over f. eks. datatæthed (boringer tematiseret over magasin, og om der er udført boringskontrol eller ej) og dybden til skift i sedimentfarve. Man kan også kombinere et temakort med diverse fladekort udarbejdet i andre fagområder, herunder potentialekort, lertykkelseskort og arealanvendelse.

Ulemper: Kemiske analyser af vandprøver giver punktoplysninger. Det frarådes, at konturere resultaterne. Præsentationer på kort er 2-dimensionelle, hvilket medfører risiko for at tolke forskelle i koncentrationer som relateres til et areal, frem for at være udtryk for en dybdeforskel. Hvor det er muligt, bør der angives forskellige signaturer for prøver fra forskellige magasiner (eller udarbejdes helt separate kort), angive filterdybden på kortet eller supplere med dybdeprofiler på grafer.

Opstillingstips: Det anbefales at udarbejde temakort over nitrat, klorid, sulfat, ionbytning, forvitring, hårdhed, pH, vandtype, samt evt. kritiske stoffer, der er specielle for det aktuelle område. Det anbefales endvidere at magasininddele, enten ved separate kort eller ved tematisering.

Der er mange beslutninger, der skal tages ved udarbejdelse af et temakort. I det følgende omtales nogle af disse.

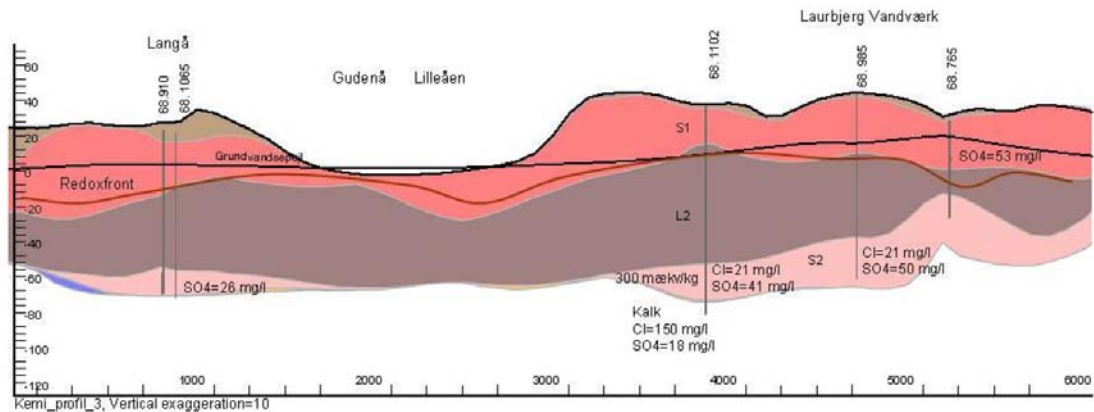
1. Korttype: To metoder til tematisering: koncentration eller "fund"-kort. Fund bruges typisk til miljøfremmede stofgrupper, f. eks. pesticider og chlorerede opløsningsmidler.
2. Ældre data: Man kan evt. vælge at udelade ældre data, hvis der er tale om ungt vand i det aktuelle magasin med stor datatæthed.
3. Baggrundskort: For at lette læsbarheden af temakortet kan baggrundskortet fremstå i sort/hvid.
4. Farveinddeling: I forbindelse med kortlægning er der tidligere anvendt mellem 3 og 9 farveinddelinger med mange forskellige koncentrationsintervaller. For at ensrette temakort anbefales her, at der som udgangspunkt anvendes inddelingerne angivet i tabel 7.2. Såfremt lokale forhold taler for det, bør disse anbefalinger fraviges.

Parameter	Enhed	Blå	Grøn	Gul	Orange	Rød
Nitrat	mg/l	<1	2-<10	10-<25	25-<50	>=50
Sulfat	mg/l	0-<20	20-<50	50-<100	100-<250	>=250
Klorid	mg/l	0-<30	30-<75	75-<125	125-<250	>=250
Ionbytning	ingen	<0,6	0,6-<0,9	0,9-<1,3	1,3-<2,0	>=2,0
Forvitring	ingen	<1,0	1,0-<1,3	1,3-<1,6	1,6-<2,0	>=2,0
Hårdhed	grader	<8	8-<12	12-<18	18-<30	>=30
pH	pH	>8,5	7,5-<8,5	7,0-<7,5	6,0-<7,0	<=6,0
Vandtype	ingen	D	C1	C2	B	A

Tabel 7.2 Anbefalinger til intervalinddeling og farvevalg i temakort

5. Boringer med flere filtre: Hvis der er analyseret for flere filtre i samme boring, kan disse dække hinanden i temakort. Dette er u hensigtsmæssigt. Her kan der vælges at vise den mest relevante måling (f. eks. indvindingsmagasinet), brug en blanding af symboler, der ikke dækker over hinanden eller forskyde filtrene således at alle resultater er synlige. Da disse fremgangsmåder er tidskrævende, bør det vurderes i hvert enkelt område, hvilken metode der skal bruges.
6. Dybdeangivelse: I områder, hvor dybden til filtret er væsentlig for fortolkningen bør det overvejes at udbygge temakortet med en dybdeangivelse. Dette kan f.eks. gøres ved at erstatte prikkerne med en stang, hvis længde repræsenterer dybden til filtertop.
7. Hvis datagrundlaget er tilstrækkeligt kan der laves separate magasinsspecifikke temakort. Dette kan gøres ved at bruge forskellige geometriske former (f. eks. cirkler og trekanter) for de forskellige magasiner.
8. Ved miljøfremmede stoffer er det relevant at tematisere på 1) ikke påvist, 2) fund og 3) fund over grænseværdien.

7.7 Principskitser



Figur 7.8 Eksempel på principskitse fra grundvandskortlægning ved Hadsten (Alectia, 2009).

Definition: En principskitse er en profilsnit, som vist i figur 7.8, der viser boringer og filterplaceringer i forhold til geologiske lag, grundvandsmagasiner, grundvandsspejl og geokemiske fronter (f.eks. nitratfront). Det er ikke tanken, at skitsen skal repræsentere en bestemt boring eller specifikt profilinje, og figuren er derfor ikke målsat.

Fordele: En principskitse er en god måde at skabe overblik over de forskellige geokemiske situationer i et kortlægningsområde. Skitsen kan med fordel anvendes som kommunikationsmiddel til at formidle og drøfte dette overblik. Skitsen er relativ let at udarbejde.

Ulemper: En principskitse kan ikke anvendes til at angive konkrete koncentrationer, afstande eller dybder ved en specifik profilinie. Valg af hvilke principskitser, der er væsentlige at udarbejde er en subjektiv proces, der kræver en del omtanke.

Opstillingstips: Det foreslås, at der udarbejdes ca. fem principskitser i et kortlægningsområde, afhængig af graden af inhomogenitet. Hvis der udarbejdes flere skitser, er der risiko for, at noget af det ønskede overblik mistes.

8. Tolkning af kemiske resultater

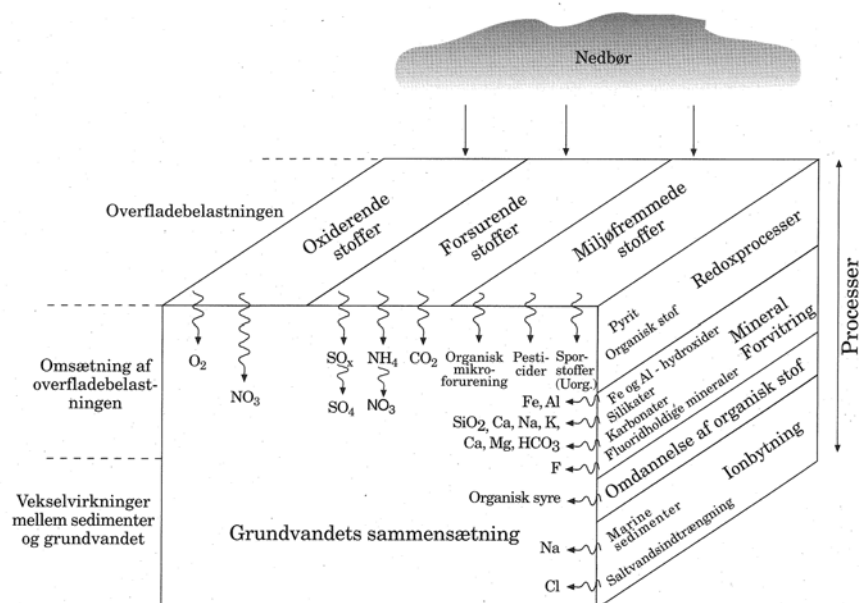
8.1 Formål

Formålet med tolkningen af kemiske resultater er først og fremmest at identificere vigtige kemiske parametre og problemstoffer, der kan medføre forringelse af kvaliteten af den nuværende og fremtidige grundvandsressource, der anvendes til drikkevandsformål. Disse stoffers forekomst i grundvandet kan skyldes menneskeskabt forurening og naturlige processer. Figur 8.1 viser, at grundvandets sammensætning skyldes en blanding af nedsivende stoffer og stoffer, der frigives i forbindelse med geokemiske processer i jorden. Med det formål at identificere mulige problemstoffer og deres udvikling over tid, er der behov for først at identificere de geokemiske processer, der er årsag til grundvandets sammensætning. Endelig skal grundvandets kvalitet holdes op mod en normal vandbehandling, der fjerner/omdanner nogle af parametrene, før vandet sendes ud til forbrugerne.

Tolkning af kemiske resultater er en iterativ proces (se figur 3.2), hvor oplysninger, der fremkommer fra forskellige dele af arbejdet, influerer på hinanden. Derfor opstilles der ikke en liste af tolkningsaktiviteter, der skal udføres i en bestemt rækkefølge. Dog anbefales det, at der startes med datahåndtering (beskrevet i kapitel 4) efterfulgt af udarbejdelse af præsentationer (beskrevet i kapitel 7), således at disse er tilgængelige for fortolkningen.

Det understreges, at denne vejledning er af praktisk karakter og forudsætter et vist kendskab til geokemi. Derfor er forklaringer af geokemiske begreber og andet lærebogsstof i vidt omfang udeladt. Udvalgte lærebøger inkluderer: Karlby & Sørensen (2002); Apello & Postma (2005); Deutsch (1997) Freeze & Cherry (1979) og Ramsay (2006), som også ses i appendix D. Desuden forudsættes et vist kendskab til hydrogeologi, f. eks. en forståelse for strømningsbaner og, hvordan vandprøver opdeles i punkt- linie og volumenprøver.

Tolkningen af de kemiske resultater kræver indsigt i kortlægningsområdets geologiske, hydrogeologiske og arealanvendelsesforhold samt indvindingsforhold. Dette kræver, at miljøcentret sørger for formidling af resultaterne enten ved mødeaftoldelse eller ved at stille alle relevante rapporter til rådgiverens rådighed. I mange tilfælde kortlægges de forskellige fagområder sideløbende. I det tilfælde er det hensigtsmæssigt med en tæt kommunikation mellem de personer, der udfører de forskellige dele. Det første trin i tolkningsprocessen er dermed, at kortlæggeren bl.a. skaffer sig viden om de andre fagområder.



Figur 8.1. Påvirkninger af grundvandets sammensætning GEUS (1995).

8.2 Den indledende tolkning

Det anbefales, at tolkning af de kemiske resultater indledes ved at udføre en aldersvurdering samt en vurdering af syre/base-forhold og redoxforhold. Tabellen nedenunder viser en oversigt over de præsentationer, der kan anvendes i forbindelse med den indledende tolkning.

Tolkning	Typisk præsentation	Ved særlige forhold
Aldersvurdering	Temakort - sulfat, ionbytningsgrad Temakort - pesticider Potentialekort Graf af filterdybder	Tabel af CFC-resultater Alderskort fra strømningsmodel
Syre-/baseforhold	pH, hårdhed og aggr. CO ₂ fraktildiagram	Tabel over aluminiumresultater NVOC temakort
Redoxforhold	Vandtype Scatterplot af nitrat og sulfat	

Tabel 8.1 Oversigt over præsentationer, der kan anvendes ved den indledende tolkning.

Aldersvurdering

Vurdering af grundvandets alder kan udføres på basis af grundvandskemi eller hydrogeologi. Grundvandets alder kan især anvendes til at vurdere et magasins sårbarhed overfor nitrat og miljøfremmede stoffer som f.eks. pesticider.

Blandt mulighederne for vurdering af grundvandets alder er:

1. Egntlige dateringsmetoder
2. Indikatorparametre
3. Pesticider og andre miljøfremmede stoffer
4. Potentialekort & filterdybde

5. Strømningsmodel

ad 1) I Danmark har analyse af CFC-gasser fundet en del anvendelse (Hinsby, 1999). Da der oftest er tale om et begrænset antal målinger, kan disse resultater ofte præsenteres i tabelform. Andre metoder til datering af yngre grundvand omfatter tritium, forholdet tritium/helium, krypton-85, SF₆ og forholdet klorid-36/klorid. Flere oplysninger findes f. eks. i Kazemi m. fl. (2006).

ad 2) Flere af de almindelige parametre, der måles i en boringskontrol kan anvendes som aldersindikator. Blandt indikatorer er 1) Redoxforhold – jo mere reduceret, jo ældre, 2) Sulfatindhold – jo mindre, jo ældre (Thorling, 1994), 3) Ionbytningsgrad – jo højere, jo ældre. I kalkmagasiner, kan der yderligere anvendes 4) Fluoridindhold – jo mere, jo ældre og 5) Magnesium/calcium-forhold – jo større, jo ældre (Aktor, 1993). Ved anvendelse af disse metoder bør det huskes, at metoderne er unøjagtige, og at der forekommer faldgruber. Det er altid godt at anvende flere parametre, så det kan vurderes, hvorvidt de understøtter hinanden.

ad 3) Tilstedeværelse af pesticider i et magasin indikerer yngre vand, da anvendelse af pesticider ikke har været udbredt før efter anden verdenskrig. Indførelses- og evt. udfasningstidspunktet kendes for mange af stofferne.

ad 4) Kendskab til den overordnede geologiske opbygning kan kombineres med vurdering af vandskel og gradienter på et potentialekort for det aktuelle område med et formål at få et indtryk af grundvandets alder. Et fornemmelse af grundvandets alder fås ved at se et plot over dybden af filterintervallerne i et område.

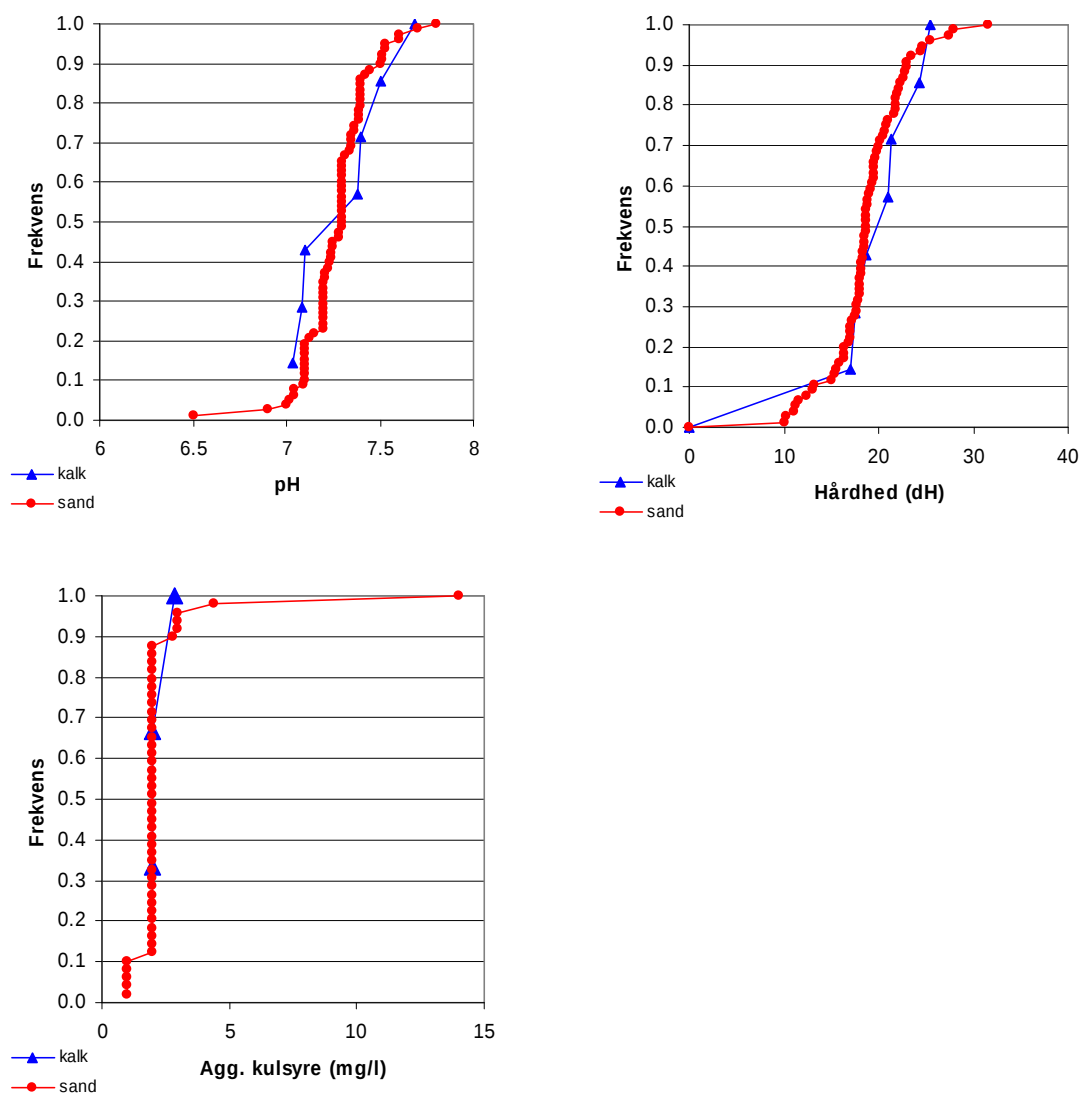
ad 5) Ud fra en strømningsmodel kan der udarbejdes et fladekort, der viser grundvandets alder i en bestemt dybde (Engesgaard, 2007).

Metode 1) og 5) er forbundet med ekstra omkostninger og kan derfor indgå i kortlægningen, hvis der er behov for afklaring af grundvandets alder eller hvor der af andre grunde ønskes en strømningsmodel. Data for vurdering efter metode 2) - 4) forefindes normalt i forvejen for de fleste områder. Derfor anbefales, at disse altid indgår i tolkningsarbejdet.

Syre/baseforhold

Syre/base forhold i et grundvandsmagasin er afgørende for opløsning af mange mineraler. Det er et vigtigt element i tolkningen at karakterisere syre-/baseforholdet i de enkelte vandprøver.

I forbindelse med kemisk kortlægning er det specielt parametrene pH, aggressiv kulsyre og hårdhed, der er i fokus. For at skabe et overblik over et magasins syre/base forhold, anbefales der indledningsvist udarbejdet et fraktildiagram for pH, aggressiv kuldioxid og hårdhed samt, at disse vurderes i forhold til de vandtyper, der er nævnt i nedenstående tabel.



Figur 8.2 Eksempel af fraktildiagram for pH, hårdhed og aggressiv kulsyre for samme indsatsområde.

Det videre arbejde vil afhænge af grundvandskvaliteten i det aktuelle område. Nedenfor angives fem letgenkendelige vandtyper i forbindelse med syre/base-forhold, der er baseret på parametrene pH, aggressiv kulsyre og hårdhed. Det bemærkes, at der findes mange andre mulige kombinationer af de tre parametre end dem, der er vist i tabellen, men at de angivne kombinationer kan anses som basistyper.

	Vandtype	pH	Aggressiv kulsyre mg/l	Hårdhed °dH
1	Blødt, forsuret vand	<6	>5	<8
2	Blødt, aggressivt vand	6-7	>5	<8
3	Uproblematisk vand	7-8,5	<2	8-30
4	Meget hårdt vand	>7	<2	>30
5	Blødt, ionbyttet vand med høj pH	>8,5	<2	<8

Tabel 8.2 Oversigt over vandtyper i forbindelse med syre-/baseforhold

Hvis der er tale om tilstedeværelse af en ekstrem vandtype (andet end en type 3), bør fortolkningen fortsætte med udvalgte fortolkninger, se nedenfor:

ad 1) Her bør man undersøge datagrundlaget for især aluminium samt hvilke niveauer, der er tale om. Her bør man også kigge på om vandets hårdhed er for lav.

ad 2) Et højt indhold af aggressiv kulsyre bør kortlægges, da denne vandtype er vanskelig at behandle. Her bør man også kigge på, om vandets hårdhed er for lav.

ad 3) Denne vandtype er uproblematisk, hvilket bør noteres. Yderligere vurderinger i forbindelse med syre-/baseforhold er ikke påkrævet.

ad 4) Særligt hårdt vand kan medføre problemer med kalkudfældninger på vandværker, specielt hvis der er behov for afblæsning af de reducerede gasser methan og svovlbrinte. Derfor bør hårdt vand og reducerede gasser tolkes samlet. Særligt hårdt vand er også uønsket på grund af et stort behov for sæbe ved f. eks. tøjvask og tilkalkning af rør mv.

ad 5) Høj pH koblet med ionbyttet vand og lavt sulfatindhold kan indikere brunt vand. Der bør derfor kigges på magasinets indhold af NVOC (nonvolatile organic carbon) samt farvetal.

Redoxforhold

Redoxforhold er måske det vigtigste forhold i et grundvandsmagasin, når der tales om vandkvalitet. Forholdet kan give en indikation af grundvandets alder, om en evt. forurening kan nedbrydes aerobt, om magasinet er sårbart overfor nitrat, om vandværket skal behandle råvandet for parametre som jern, mangan, ammonium, svovlbrinte og methan, om der er risiko for forsuring og/eller frigivelse af nikkel som resultat af pyritoxidation, om sedimentets jernoxider frigiver en del af det bundne arsen, og meget mere. Det er derfor et vigtigt element i tolkningen at karakterisere redoxforhold i de enkelte vandprøver og vurdere fordelingen af de forskellige redoxforhold i 3-dimensioner og evt. også i 4-dimensioner, hvis der er en tidlig udvikling.

Det anbefales, at vandtypen for den seneste vandprøve fra hvert indtag fastlægges ved hjælp af algoritmen i kapitel 4. Det anbefales, at udarbejde et temakort over vandtype variationen magasinsspecifikt.

8.3 Identifikation af vigtige processer

Overblik over mulige processer

En central del af tolkningsarbejdet går ud på at identificere de processer, der præger grundvandskvaliteten. Ved at forstå disse processer kan man på en mere kvalificeret måde identificere potentielle kritiske stoffer, vurdere den fremtidige koncentrationsudvikling, samt

vurdere sårbarheden og de mest egnede afhjælpende og forebyggende indsatser. En kemisk grundvandskortlægning bør derfor i høj grad også koncentrere sig om processer frem for alene at fokusere på enkeltstofferne koncentration og rumlige fordeling.

Der findes mange geokemiske processer, der kan vurderes i forbindelse med en kemisk grundvandskortlægning. Hvilke processer, der er mest relevante vil afhænge af det aktuelle område. Tabel 8.3 indeholder en oversigt over udvalgte processer.

Proces	Vigtige parametre	Præsentationseksempler
Kalkopløsning	pH, aggressiv kulsyre, hårdhed, kalkmætning	Fraktildiagram af de vigtigste parametre
Ionbytning	Na, Cl, Forvittringsgrad	Scatterplot med Na vs Cl, fraktildiagram af ionbytningsgrad
Pyritoxidation	SO ₄ , Fe, Ni, forvittringsgrad, hårdhed	Scatterplot med SO ₄ vs forvittringsgrad, fraktildiagram af sulfat og forvittringsgrad
Sulfatreduktion	SO ₄ , HCO ₃ , forvittringsgrad	Scatterplot med SO ₄ vs HCO ₃
Omkrystallisering af carbonater i kalkmagasiner	Mg, Ca, Si	Scatterplot med Mg vs Ca
Methandannelse	CH ₄ , H ₂ S, SO ₄	Fraktildiagram med methan
Denitrifikation	NO ₃ , NO ₂ , hårdhed, pH	Fraktildiagram med nitrit, scatterplot med Ca vs NO ₃
Nitratreduktion med organisk stof	NO ₃ , NO ₂ , HCO ₃	
Bruntvands dannelse	NVOC, pH, ionbytningsgrad, HCO ₃ , SO ₄	Scatterplot med NVOC vs pH
Saltvandsindtrængning	Cl, Mg, SO ₄ , Na	Scatterplot med Cl vs Mg/Ca Scatterplot med Ca vs SO ₄
Påvirkning fra vejsalt	Cl/Br, omvendt ionbytning	Scatterplot af Cl/Br vs Cl Temakort
Opløsning af fluoridholdige mineraler	F, Ca	Scatterplot med Ca vs F
Forsuring	pH, Al, K, hårdhed, forvittringsgrad	Scatterplot med pH vs Al
Vandspejlsændringer	SO ₄ , Ni, NO ₃	Tidsserie med vandspejlskote mod NO ₃ for udvalgte borer

Tabel 8.3 Oversigt over udvalgte geokemiske processer.

Indledningsvis bør listen af processerne løbes igennem for at identificere, hvilke processer er mest væsentlige for grundvandets kvalitet i det aktuelle område. Herefter vurderes udvalgte processer i større detalje, blandt andet ved hjælp af diverse præsentationer.

Det anbefales, at der som minimum vurderes på processerne pyritoxidation, ionbytning og sulfatreduktion med mindre det kan godtgøres, at én eller flere af disse processer ikke er relevante for det aktuelle område. Nedenfor angives flere oplysninger om disse tre processer, og hvordan de kan vurderes. Hvis andre processer i tabel 8.3 skal vurderes, kan der anvendes en lignende fremgangsmåde. Fremgangsmåden (med udvalgte præsentationer, der kan hjælpe med vurderingen) omfatter:

- processens omfang (fraktildiagram, scatterplot)
- geografisk fordeling (temakort, dybdeplot)
- udvikling (tidsserie)
- årsag (scatterplot, principskitse)

Pyritoxidation:

Definition: Pyritoxidation er en proces, hvor pyrit i sedimentet oxideres af ilt eller nitrat i grundvandet. Ved grundvandssænkning kan processen også foregå i den umættede zone. Nitrat reduceres til nitrit, hvis processen er ufuldstændig, og til gasarten kvælstof (N_2), hvis processen er løbet fuldstændig til ende.

Pyritoxidation kan i mange tilfælde sætte et kraftigt præg på grundvandets sammensætning. I første omgang fjernes ilt og nitrat fra vandet, og der dannes sulfat og syre. Tilstedeværelse af nitrit er en indikation på pyritoxidation og omsætning af nitrat. Syren vil enten sænke pH eller, hvis der er kalk tilstede, forårsage en stigning i hårdhed og forvitningsgrad. Jernindholdet i grundvandet kan stige, men kan også udfælde som jernoxider eller karbonater. Såfremt der er et væsentligt nikkelindhold i pyriten, kan indholdet af nikkel opløst i grundvandet stige til problematiske niveauer. Pyrit indeholder desuden arsen, som kan være en kilde til arsen i grundvandet, da arsen ligesom nikkel findes som en urenhed i pyrit. Pyritoxidation i den umættede zone kan medføre meget høje sulfatkoncentrationer og eventuel udfældning af calciumsulfat (gips).

Pyritoxidation er en proces, der foregår ved redoxfronten. Grundvand, der er præget af pyritoxidation, er oftest forholdsvis ungt. Derfor er dette vand ofte også sårbart overfor ned-sivende miljøfremmede stoffer.

I områder med et særligt behov for afklaring af potentialet for nitratreduktion, kan der udføres nye borer med udtagning af sedimentprøver til kemiske analyser. Der analyseres f.eks. for indhold af pyrit, organisk stof og reduceret jern samt total nitratreduktionskapacitet, se afsnit 6.5.

Omfang:

Sulfat er nok den mest sikre indikator på pyritoxidation. Forvitningsgraden stiger også ved pyritoxidation, hvorfor et scatterplot af sulfat vs forvitningsgrad (som angivet i Tabel 8.3) ofte viser en god sammenhæng og er en god måde, hvorpå man kan fastlægge omfanget af processen. Ved pyritoxidation danner nitrat 1,0 mg sulfat pr. mg nitrat, mens ilt danner 1,6 mg sulfat pr. mg ilt. Til belysning af omfanget af nitratreduktion kan man udarbejde et scatterplot af sulfat mod nitrat.

Herudover kan tilstedeværelse af nitrit i en vandprøve være en indikator for, at boringens indtag ligger tæt på nitratfronten, og et nitrit fraktildiagram kan være med til at belyse dette.

Fordeling:

Den geografiske fordeling kan belyses ved at udarbejde et temakort for sulfat og nitrat for hvert magasin. For at fortolke temakortet for sulfat skal baggrundsniveauet for sulfat vurderes. Baggrundsniveauet for sulfat varierer fra sted til sted (oftest fra < 10 til 30 mg/l) da det afhænger af atmosfærisk nedfald af svovl (dette er faldet drastisk de senere årtier), svovltilførsel via gødning, nettonedbør og fjernelse af svovl via høst.

Såfremt der er nitratproblemer i området, kan man vælge at fastlægge dybden til farveskift som angivet i kapitel 4. På basis af disse data udarbejdes et temakort, hvor dybden til farveskift er tematiseret. Desuden kan der udarbejdes profilsnit, hvor nitratfronten tegnes ind.

Udvikling:

Tidsserier af sulfat (se afsnit 5.4 og 7.5) kan indikere, om situationen er statisk eller om der er tale om stigende pyritoxidation med risiko for gennemslag af nitrat.

Årsag

Den kemiske grundvandskortlægning bør forsøge at fastlægge årsagen til udpræget pyritoxidation. Dette kræver, at de enkelte potentielle årsager nedenfor gennemgås én for én:

1. *Barometereffekt:* Skyldes indtrængning af ilt i den umættede zone via filtre, der sidder delvis over driftsvandspejlet. Da transporten af ilt til den umættede zone kan være stor, kan det medføre store sulfatstigninger, lokalt langt over 1.000 mg/l. Det bør kontrolleres, om der er et lerlag i den umættede zone, der kan give barometereffekten, samt om toppen af filteret er højere end driftsvandspejl.
2. *Vandspejlssænkning og -fluktuationer:* Kan skyldes dræning, indvinding af grundvand, eller årstidsbetingede forskelle i nedbør. Disse årsager medfører et midlertidig eller permanent fald i vandspejlet. Hermed kan ilt trænge ind i den nye umættede zone, der kan indeholde pyrit. Transporten af ilt til den umættede zone kan i denne situation være stor og kan medføre stor sulfatdannelse, lokalt med koncentrationer langt over 1.000 mg/l. Historiske pejledata og ændringer i arealanvendelsen bør undersøges.
3. *Nedsivende opløst ilt:* Opløseligheden af ilt i grundvand er ved 10 °C ca. 11 mg/l, hvilket kan medføre en sulfatstigning på i alt ca. 18 mg/l ved pyritoxidation.
4. *Nedsivning af nitrat:* Udvaskning af nitrat under rodzonen på opdyrkede marker er i dag typisk ca. 71 og 58 mg/l nitrat for henholdsvis sand- og lerjord (Grant m.fl., 2007). Dette vil medføre en sulfatstigning på henholdsvis ca. 71 og 58 mg/l ved pyritoxidation. Det bemærkes, at nitratudvaskningen var ca. 1½ gange større for ca. 15 år siden og at der er stor spredning på de aktuelle målinger i Landovervågningssoplandene (Grant m.fl., 2007). Hvis vandet er blandet med vand dannet under by eller naturarealer, vil nitratindholdet være mindre.

Ionbytning

Definition: Ionbytning er en proces, hvor der sker udveksling af ioner (Na, Ca og Mg) mellem grundvandet og sedimentet, idet ionerne adsorberes eller desorberes fra overfladekomplekser på lerminerale. Ionbytning foregår for at skabe ligevægt mellem de kationer, der er opløst i jordvæsken og de kationer, som er adsorberet til lerminerale.

Ionbytningsgraden beregnes som forholdet mellem Na og Cl i milliekvivalenter.

Følgende definitioner anvendes:

Omvendt ionbyttet grundvand: $\frac{[Na]}{[Cl]} < 0.75$ $Na^+ + 1/2Ca-X_2 \rightarrow Na-X + 1/2Ca^{2+}$

Ionbyttet grundvand: $\frac{[Na]}{[Cl]} > 1.25$ $1/2Ca^{2+} + Na-X_2 \rightarrow 1/2Ca-X + Na^+$

Hvor $-X_2$ er symbolet på en udbytningsplads på sedimentet i grundvandsmagasinet.

Omvendt ionbyttet grundvand vil opstå når saltvand infiltrer i et mere fersk grundvandssediment. Omvendt ionbyttet grundvand opnås ved saltvandsindtrænging eller diffusion fra det underliggende salte grundvand forceret af en kraftig indvinding. Omvendt ionbyttet grundvand kan også opstå ved infiltration af salt vand fra jordoverfladen, som f.eks. kan skyldes vejsaltning eller andre saltkilder.

Ionbyttet grundvand vil opstå når fersk vand infiltrer et mere salt grundvandssediment af ofte marin oprindelse, eller som tidligere har været i kontakt med mere saltholdigt grundvand.

Det antages, at et forhold mellem Na og Cl på 0,75 - 1,25 repræsenterer *ikke ionbyttet grundvand* med ligevægt i saltindholdet mellem grundvand og sedimentet, idet der medtages et usikkerhedsinterval på $\pm 0,25$ omkring 1.

Det bemærkes, at ikke-ionbyttet vand normalt er udtryk for et magasin med en god gennemstrømning og dermed ungt vand. Men det kan også være udtryk for et magasin, hvor sedimentet har en ringe ionbytningskapacitet (Krog m.fl., 2000), eller hvor sedimentet blev aflejret i f. eks. et ferskvandsmiljø med et natrium/calcium-forhold, der ligner det nuværende grundvand. Derfor kan man ikke konkludere, at grundvand er ungt (og dermed sårbart) alene på basis af manglende ionbytning.

Omfang:

Som det fremgår af Tabel 8.3 kan omfanget af ionbytning i det aktuelle område vurderes ved udarbejdelse af et scatterplot af Na vs Cl og et fraktildiagram med ionbytningsgrad.

Fordeling:

Den geografiske fordeling kan belyses ved et temakort over ionbytningsgraden.

Udvikling:

Tidsserier af ionbytningsgrad (se afsnit 5.4 og 7.5) kan indikere, om situationen er statisk eller under forandring.

Årsag:

Den kemiske grundvandskortlægning bør forsøge at fastlægge årsagen til ionbytning eller omvendt ionbytning.

Blandt de potentielle årsager til ionbytning kan nævnes:

1. *Høj ionbytningskapacitet:* Visse lerminerale (f. eks. glaukonit i Lellinge grønsand) har en meget stor ionbytningskapacitet og medfører ofte en høj ionbytningsgrad i grundvandet.
2. *Dårlig gennemstrømning:* Ofte vil høj ionbytning være tegn på dårlig gennemstrømning, enten i dæklaget og/eller i selve magasinet.

Blandt de potentielle årsager til omvendt ionbytning kan nævnes:

1. *Saltvandsindtrængning eller diffusion:* Enhver ændring i grundvandets saltindhold over tid rykker på balancen mellem sediment og grundvand. Det typiske eksempel er indtrængning af saltvand, hvor der tidligere var ferskvand. Dette kan medføre et fald i ionbytningsgrad, hvor natrium i vandet byttes med calcium på sedimentet (omvendt ionbyttet). Dette er et faresignal for vandindvindingen i området, og et tegn på at det kan være nødvendigt at sænke indvindingen.
2. *Vejsaltning og andre saltforureningskilder ved jordoverfladen:* I denne situation vil saltvand nedsive til et mere fersk grundvandssediment.

Sulfatreduktion

Definition: Sulfatreduktion er en proces, hvor sulfat reduceres til svovlbrinte samtidig med, at organisk stof oxideres til hydrogencarbonat ved hjælp af mikroorganismer.

Sulfatreduktion danner svovlbrinte i første omgang, men svovlbrinte kan fælde ud med jern og kommer dermed til at mangle helt i grundvandsanalysen. Hvor der sker sulfatreduktion, stiger risikoen for, at redoxmiljøet er så reducerede, at der også dannes methan via omdannelse af reaktivt naturligt organisk stof i aflejringerne. Hvis datadækningen for disse parametre er ringe i et område med udpræget sulfatreduktion, bør udtagning af prøver til disse analyser anbefales i det analyseprogram, der udarbejdes i Trin 1b-rapporten.

For at identificere, om sulfatreduktion finder sted, skal man fastlægge baggrunds niveauet for sulfat og se om sulfatindholdet er lavere end dette. Det gøres opmærksom på at baggrunds niveauet for sulfat varierer fra sted til sted (ofte fra < 10 til 30 mg/l) da det afhænger af atmosfærisk nedfald af svovl (er faldet drastisk de senere årtier), svovltilførsel via gødning, nettonedbør og fjernelse af svovl via høst.

Omfang:

Omfanget af sulfatreduktion kan belyses med f. eks. et scatterplot af sulfat vs hydrogencarbonat som angivet i Tabel 8.3.

Fordeling:

Den geografiske fordeling kan ses på et temakort over sulfat. Et temakort over vandtyper giver også et godt overblik fordelt på magasiner.

Udvikling:

Udvikling kan ses ved udarbejdelse af sulfat tidsserier for udvalgte borer, se afsnit 5.4 og 7.5.

Årsag:

Årsagen til sulfatreduktion eller mangel deraf kan belyses ved vurdering af organiske stof i de geologiske lag. Der er her specielt vigtigt, om der er meget eller lidt organisk stof og det organiske stofs reaktivitet. Såfremt der i forvejen er udarbejdet en geologisk beskrivelse af det aktuelle område kan oplysninger om organisk stof søges her. Ellers kan en hurtig gennemgang af udvalgte borejournaler også give en indikation.

8.4 Identifikation af problemstoffer

Identifikation af problemstoffer i et kortlægningsområde er en forudsætning for at kunne fastlægge hvilken indsats, der kan være relevant for området. Det er vigtigt både at identificere de stoffer, der medfører kvalitetsproblemer i dag samt de stoffer, der kan medføre problemer i fremtiden.

Det foreslås, at problemstoffer opdeles i følgende to kategorier:

1. miljøfremmede stoffer (f. eks. nitrat, pesticider, chlorerede opløsningsmidler, klorid)
2. naturligt forekommende stoffer (f. eks. arsen, nikkel, NVOC, klorid)

Herudover er det vigtigt at skelne mellem stoffer, der kan fjernes ved en traditionel vandbehandling og de stoffer, hvor problemet kun kan håndteres ved at finde en anden indvindingslokalitet eller ved videregående vandbehandling.

Som minimum anbefales det, at vurdere om stofferne og stofgrupperne i tabellen er relevante for det aktuelle område. Herudover medtages andre stoffer, som er relevante for det aktuelle område.

Det bemærkes, at lister over relevante enkeltstoffer i stofgruppen pesticider og chlorerede opløsningsmidler kan findes i (Miljøstyrelsen, 1997). I gruppen olie-/tjærestoffer tænkes specielt på aromater som benzen, toluen, ethylbenzen og xylener (BTX) samt diverse fenoler.

Identifikation af potentielle problemstoffer kan foregå ved at udføre parameter og niveau sammenligninger, vurdere udviklingstendenser og ved at vurdere betydningen af vigtige processer. Disse tre metoder omtales nedenfor.

Parameter	Kilde		Behandling på værker
	Menneskeskabte	Naturlige	
Aggressiv CO ₂	Gødning, atmosfærisk deposition af forurende stoffer	Naturlig forurening i rodzonen med dannelse af bikarbonat og organiske syrer.	Udvidet
Ammonium	Lossepladsperskolat Gylle	NEDBRYDNING AF AFLEJRINGER MED ORGANISK STOF	Traditionel
Arsen	Træimprægneringsgrunde lossepladsperskolat	Pyrit REDUKTION AF JERNOXIDER MED ADSORBERET ARSEN (Larsen m. fl., in press)	Traditionel/udvidet
Chlorerede opløsningsmidler	INDUSTRI	chloroform under granskov (Jacobsen m.fl., 2007)	Udvidet
Klorid	VEJSALT (Kristiansen m.fl., in press), Depoter af vejsalt, snedepoter Lossepladsperskolat Gødning Utætte kloaker og septiktanke	RESIDUALVAND, SALTVANDS-INDTRÆNGNING Diffusion fra det underliggende salte grundvand	Ingen i DK
Fluorid	Ikke væsentlig	OPLØSNING AF MINERALER (Aktor, 1993)	Ingen i DK
Jern	Grundvandssænkning	OPLØSNING AF MINERALER	Traditionel
Mangan	Ikke væsentlig	OPLØSNING AF MINERALER	Traditionel
Methan	Ikke væsentlig	AFLEJRINGER MED REAKTIVT ORGANISK STOF (Hansen m.fl., 2001)	Traditionel
Nikkel	BAROMETEREFFEKT, NITRATGØDNING	Ikke væsentlig	Udvidet
Nitrat	KVÆLSTOFGØDNING	Kvælstof fiksering	Ingen i DK
NVOC	Lossepladsperskolat	AFLEJRINGER MED NATURLIGT ORGANISK STOF	Udvidet
Olie-/tjærestoffer	FORURENEDE GRUNDE	Evt. på meget lavt niveau enkelte steder (Nyvang, 2008)	Ingen i DK
Pesticider	SPILD, LOSSEPLADSPERSKOLAT; REGELRET ANVENDELSE	ikke væsentlig	Udvidet
Svovlbrinte	Lossepladsperskolat	SULFATREDUKTION	Traditionel

Tabel 8.4 Oversigt over typiske problemstoffer med udvalgte referencer. Hovedkilder angives med store bogstaver.

Parameter og niveau sammenligninger: Problemstoffer kan identificeres ved at screene for overskridelser, dvs. ved at sammenligne koncentrationer fra det aktuelle område med drikkevandskriterier, der er angivet i tilsynsbekendtgørelsen (Miljøministeriet, 2007). Her skal man dog huske, at visse stoffer - f. eks. jern - fjernes ved traditionel vandbehandling, hvor-

for overskridelser af drikkevandskriterier ikke nødvendigvis er problematiske. For disse stoffer, er stoffet først problematisk, hvis indholdet overskrider den koncentration, der let kan fjernes ved vandbehandling. En tommelfingerregel for nogle af disse stoffer ved dobbeltfiltrering er jern: 2 mg/l, mangan: 0,3 mg/l og ammonium: 1,5 mg/l (Karlby & Sørensen, 2002). Specielt for stoffer, der er uønsket i alle koncentrationer - f. eks. nikkel - kan det give mening at sammenligne koncentrationer fra det aktuelle område med baggrundsværdier.

Udviklingstendenser: Selv om et stof ikke i dag overskrider en relevant grænse, kan det alligevel være problematisk i fremtiden. Tidsserier er det vigtigste redskab til at vurdere om et stof er acceptabelt nu, men samtidig udviser en bekymrende stigende tendens.

Vigtige processer: Endelig bør det overvejes, om de identificerede vigtige processer kan give anledning til, at andre stoffer er eller bliver problemstoffer.

Både et for lavt og et for højt indhold af visse kemiske stoffer i drikkevandet kan være helbredsmæssig problematisk. I modsætning til problemstofferne kan der argumenteres for, at et vist indhold af visse kemiske stoffer virker sundhedsfremmende og er dermed ønskelige i grundvand og drikkevand (Meyer, 2004; Mølsted, 2009). Disse kunne døbes "funktionelle stoffer" for at være på linje med "functional foods" som den kolesterol-sænkende margarine og andre madprodukter. Blandt kandidater til funktionelle stoffer findes calcium, magnesium, strontium, kalium, fluorid, iodid og selen. Med undtagelse af calcium og magnesium (vandets hårdhed) har vurderingen af værdien af funktionelle stoffer hidtil ikke spillet nogen rolle i kemisk grundvandskortlægning.

9. Sammentolkning

Tolkningen og forståelsen af grundvandskemiske forhold kræver at der inddrages oplysninger om en lang række emneområder. Der skal i forbindelse med den kemiske grundvandskortlægning ske en sammentolkning af følgende 3 datatyper:

- 1) Arealmæssige data om påvirkninger: som f.eks. kvælstoftilførslen, pesticidanvendelsen, forureningskilder (eksisterende virksomheder, kortlagte lokaliteter og andre punktkilder).
- 2) Geologiske data vedrørende eksempelvis udbredelsen og tykkelse af dæklag, grundvandsmagasinet geologiske opbygning, mineralogiske undersøgelser.
- 3) Hydrologiske data vedr. eksempelvis grundvandsdannelse, hydrauliske egenskaber, vandindvinding.

Sammentolkning af data fra grundvandskortlægningen kan opfattes som en selvstændig fagdisiplin, som hidtil ofte har været foretaget usystematisk og uensartet. Der eksisterer mange muligheder for at integrere grundvands- og sedimentkemiske data med geologiske, hydrologiske og geofysiske datatyper. Der er brug for at udvikle en systematisk tilgang og udvikling af metoder til sammentolkningen af data fra grundvandskortlægningen. Denne Geo-vejledning skal opfattes som et første skridt på vejen, idet en mere omfattende og systematisk metodeudvikling ligger uden for rammerne af dette projekt.

Der vil i dette kapitel blive givet eksempler på, hvordan kemiske data kan samtolkes med andre datatyper. Eksempler på sammentolkning af kemiske data til brug for den geologiske modellering findes i Geo-vejledning for Geologisk Modellering (Jørgensen m. fl., 2008)

Sammentolkning af de kemiske data med de hydro-geologiske data bør finde sted i alle trin af grundvandskortlægningen, således at der sker en gradvis øget forståelse af såvel vandkvalitet som hydrogeologiske forhold. Under trin 1 samtolkes med "den geologiske forståelsesmodel", mens der under trin 2b skal ske en sammentolkning med "den hydrostratigrafiske model".

9.1 Sammentolkning med arealmæssige påvirkninger (trin 1b)

Under trin 1b anbefales det, at de kemiske data samtolkes med følgende arealinformationer i undersøgelsesområdet:

- Kendte forureningskilder
- Kvælstofbelastningen fra jordbrugsproduktion
- Pesticidbelastningen fra jordbrugsproduktion

Sammentolkningen af de kemiske data til arealmæssige data sker også i forbindelse med den overordnede beskrivelse af vandindvindingen (afsnit 5.2), og i forbindelse med identifikation af problemstoffer (afsnit 8.3). Detaljeringsgraden i sammentolkningen bør afspejle de forskellige påvirkningers indflydelse på vandkvaliteten. Sammentolkningen af kvælstofbe-

lastningen kan f.eks. ske ud fra såvel simple arealanvendelseskort som ud fra avancerede udvaskningsmodeller, alt afhængig af det ønskede vidensbehov.

Tabel 9.1 opsummerer de vigtigste sammentolkninger af kemiske data med arealmæssige data, der kan ske i forbindelse med den kemiske grundvandskortlægning. Flere af datatyperne er landbrugsregisterdata, der anvendes i miljøcentrenes andre planlægningopgaver, herunder oversigter over påvirkninger i vandplanerne.

	Kemiske data	Areal-mæssige data	Præsentationstype
Sammentolkning nitrat	Nitrat i grundvandet	Kvælstofbelastning fra jordbrugsproduktion	Temakort
Sammentolkning pesticider	Fund af pesticider i grundvandet	Behandlingshyppighed Historisk forbrug af pesticider	Temakort
Sammentolkning andre miljøfremmede stoffer	Fund af andre miljøfremmede stoffer i grundvandet	Kendte forureningskilder	Temakort

Tabel 9.1 Eksempler på sammentolkning af kemiske data med arealmæssige data under trin 1b.

9.2 Geologisk forståelsesramme for tolkning af kemiske data

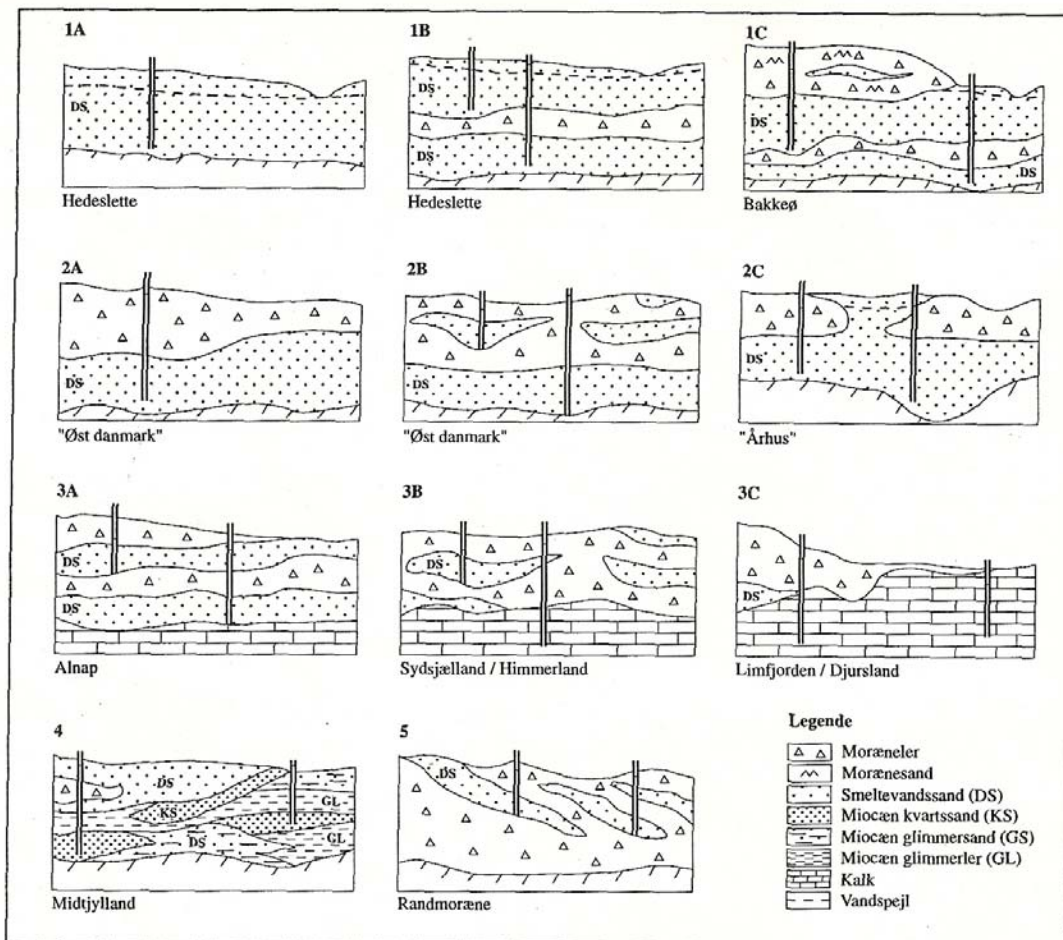
Igennem de sidste 20 år er der fremkommet flere forslag til klassificering af de hydrogeologiske magasintyper i Danmark, herunder konceptuelle modeller for sammentolkning af grundvandskemiske data.

Dyhr-Nielsen m.fl. (1991) foreslog en opdeling af Danmark i 10 grundvandsmagasintyper beskrevet i relation til nitratforurening. Dette koncept er blevet videreudviklet til at omfatte 12 geologiske hovedtyper (Rasmussen m.fl., 1995) som vist i figur 9.1, der dog ikke viser den 12. type med de specielle forhold med grundvandsmagasiner i klippesprækker, der optræder på Bornholm.

Anvendes dette koncept til tolkningen af kemi, bør der lægges speciel vægt på:

- lerdæklagenes lithologi, tykkelse og udbredelse for hovedtype 2 og 3
- geologiske inhomogeniteter ("geologiske vinduer") for hovedtype 2, 3 og 5
- geologiske vinduer mellem øvre og nedre reservoir for hovedtype 1 c, 3 a og 4
- dæklagenes sammensætning (morænesand/ler, brunkul) for hovedtype 1 c og 4.
- forkomst af helt ungt vand i de faste bjergarter på Bornholm, hvor det hydrauliske system er fuldstændigt styret af sprækkestrømning.
- forekomst af sekundære magasiner

For de hydrogeologiske hovedtyper 1a, 1 b og 2a er infiltrationen i de fleste tilfælde relativt jævnt fordelt, mens den i hovedtyperne 2c og 5 vil være koncentreret til de såkaldte geologiske vinduer og i områder, hvor sandlagene når op til overfladen. Hvor morænedækket er tyndt og evt. opsprækket, som det kan være i type 3a-c, vil der ligeledes være en større infiltration end i resten af området.



Figur 9.1. Geologiske hovedtyper i Danmark. Hovedtype 1 dækker det meste af Vestjylland, hovedtype 2 dækker store dele af det østlige Jylland, Fyn og en del af Sjælland, hovedtype 3 med undertyper dækker en stor del af Sjælland, Lolland-Falster, Djursland og en del af Limfjordsområdet, hovedtype 4 dækker Midtjylland med højtliggende miocæne kvartssandsmagasiner og hovedtype 5 dækker israndsområder med dislokerede sandmagasiner. Hovedtype 6, sprækkestrømning i faste bjergarter på Bornholm er ikke vist. (Rasmussen m.fl., 1995).

9.3 Sammentolkning af kemiske data med "den geologiske forståelsesmodel" (trin 1b)

I tabel 9.2 er vist de sammentolkninger, som det som minimum anbefales at lave i forbindelse med sammentolkning af kemiske data med "Den geologiske forståelsesmodel". Sammentolkninger angivet i tabel 9.2 vil udgøre en syntese af resultaterne og tolkningerne under trin 1b og kan samlet betegnes som "Den kemiske model på eksisterende data".

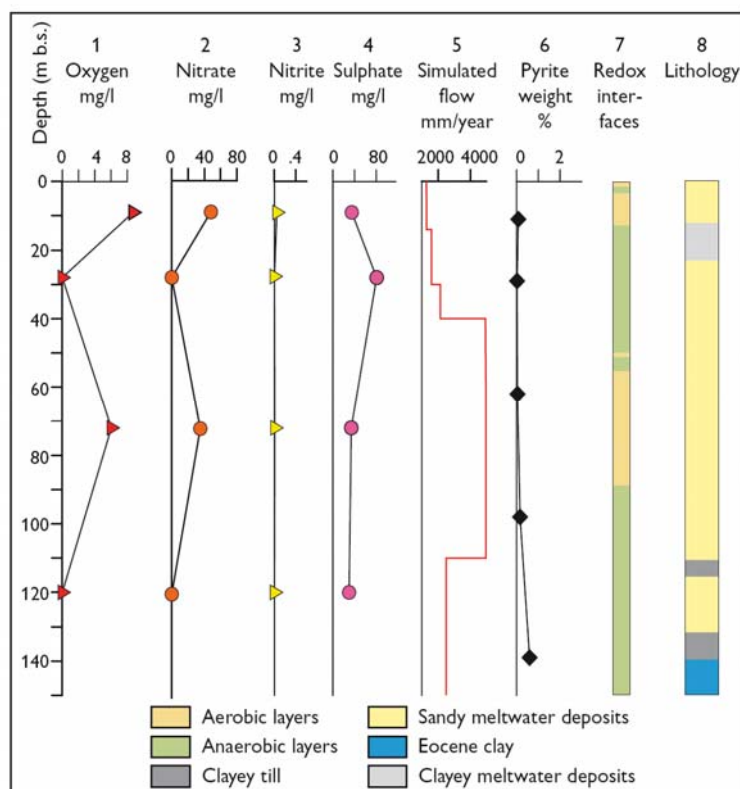
Sammentolkning	Kemiske data	Den geologiske forståelsesmodel	Præsentationstype
Status for vandværkets kemiske tilstand	Grundvands- og drikkevandskvalitet på vandværker ¹	Hydro-geologiske forhold i opland til indvindings/boringer ¹	Temakort Tidsserier
Identifikation af behov for nye kemiske data	Den kemiske datatæthed	Den overordnede hydrogeologiske opbygning	Temakort
Identifikation af problemstoffer	Præsentation af eksisterende data	Den overordnede hydrogeologiske opbygning	Temakort/Principskitser

Tabel 9.2 Den kemiske model på eksisterende data: sammentolkning til "Den geologiske forståelsesmodel"

1: Er mere indgående beskrevet i kapitel 4

9.4 Sammentolkning af kemiske data i nye undersøgelsesboringer (trin 2a)

I trin 2a "Nye kemiske kortlægningsresultater" skal de nye vand og sedimentkemiske data sammenstilles og –tolkes med lithologiske og eventuelt hydrologiske informationer fra de nye undersøgelsesboringer. I figur 9.2 er vist et eksempel på sammenstilling af udvalgte nye data i en undersøgelsesboring.



Figur 9.2 Eksempel på sammenstilling af udvalgte data fra en ny undersøgelsesboring placeret i Brabranddalen ved Århus (Hansen & Thorling, 2008).

Sammentolkningen af dataene fra den nye undersøgelsesboring vist i figur 9.2 foregår ved en beskrivelse af kemiske, geologiske og hydrologiske sammenhænge. Figur 9.2 viser data

fra en 150 m dyb undersøgelsesboring med 4 filtre. I figur 9.2 er vist vandkemiske data (kolonne 1-4), grundvandsstrømningen baseret på MIKE SHE modelleringer (hovedsagelig horisontal fra 40 m.u.t., kolonne 5), sedimentkemi (kolonne 6), redoxgrænser (kolonne 8). De kvartære aflejringer i boringen er domineret af sandede sedimenter med en tykkelse på op til 100 m med smeltevandsler i den øverste del og moræneler i den nederste del. I den nederste del af boringen er der fundet impermeabelt ler fra Eocæn.

Der er fundet 7 redoxgrænser i boringen, hvor den dybeste ligger ca. 90 m.u.t. Tilstedeværelsen af nitrat i grundvandsmagasinet og en lav reduktionskapacitet (0,02-0,16 vægt % pyrit) understøtter de hydrologiske resultater, som viser en høj simuleret strømning på op til 4 m per år og fundet af redoxzonerne i boringen (Hansen og Thorling, 2008).

9.5 Sammentolkning af kemiske data med "den hydrostratigrafiske model" (trin 2b)

I tabel 9.3 er vist de sammentolkninger, som det som minimum anbefales at lave i forbindelse med sammentolkning af kemiske data med "Den hydrostratigrafiske model". Sammentolkninger som angivet i tabel 9.3 vil udgøre en syntese af resultaterne og tolkningerne under trin 2b og kan samlet betegnes som "Den hydro-geokemiske model".

Selve sammentolkningen sker ved at der udarbejdes såvel temakort som en række plots, hvor der søges efter sammenhænge der kan karakterisere områdets specifikke vandkvalitet i sammenhæng med hydrogeologien. Eksempler på plots er vist i kap. 7, men tolkningen bør ikke begrænses af de viste eksempler, men skal tage udgangspunkt i en faglig vurdering af relevante sammenhænge. F.eks. kan der i nogle områder være interesse i at vurdere saltdepositionen ved f.eks. skovbryn, nitratfrontens dybde og grundvandsspejlets beliggenhed, eller sammenhæng mellem fluktuationer i grundvandsspejl og variationer i grundvandskemien. Ved rapportering skal kun de vigtigste temakort og plots vises.

Sammentolkning	Kemiske data	Den hydro-stratigrafiske model	Præsentationstype
Sammenhæng mellem nitrat og lerdæklag	Vandtype Nitrat i grundvandet Nitratfronten	Udbredelse af lerdæklag Geologiske vinduer	Temakort Plots Principskitser
Hydrogeologiske forhold	Kalkfront og forsurening Nitratfront Nitrat i grundvandet Miljøfremmede stoffer i grundvandet	Teksturvariationer i grundvandssedimentet Strømningshastigheder Grundvandsdannelse Tykkelse af umættet zone	Dybdeplot Konceptuelle profilsnit 3-D præsentationer
Udbredelse af kalk	Fluorid, Ca/Mg,	Kalk i borer	Temakort Plots Principskitser
Kilder til klorid i grundvandet	Klorid, ionbytning Cl/Br	Lavmodstandslag i kalkmagasiner	Temakort Plots Principskitser
Aldersvurdering	Sulfat som alders-indikator Pesticider CFC analyser	Partikelbane-simuleringer	Temakort Plots Principskitser

Tabel 9.3 Den hydro-geokemiske model: sammentolkning af kemiske data med "Den hydrostratigrafiske model"

9.6 Eksempel på sammentolkning: Sammenhæng mellem nitrat og lerdæklag

Heterogen geologi

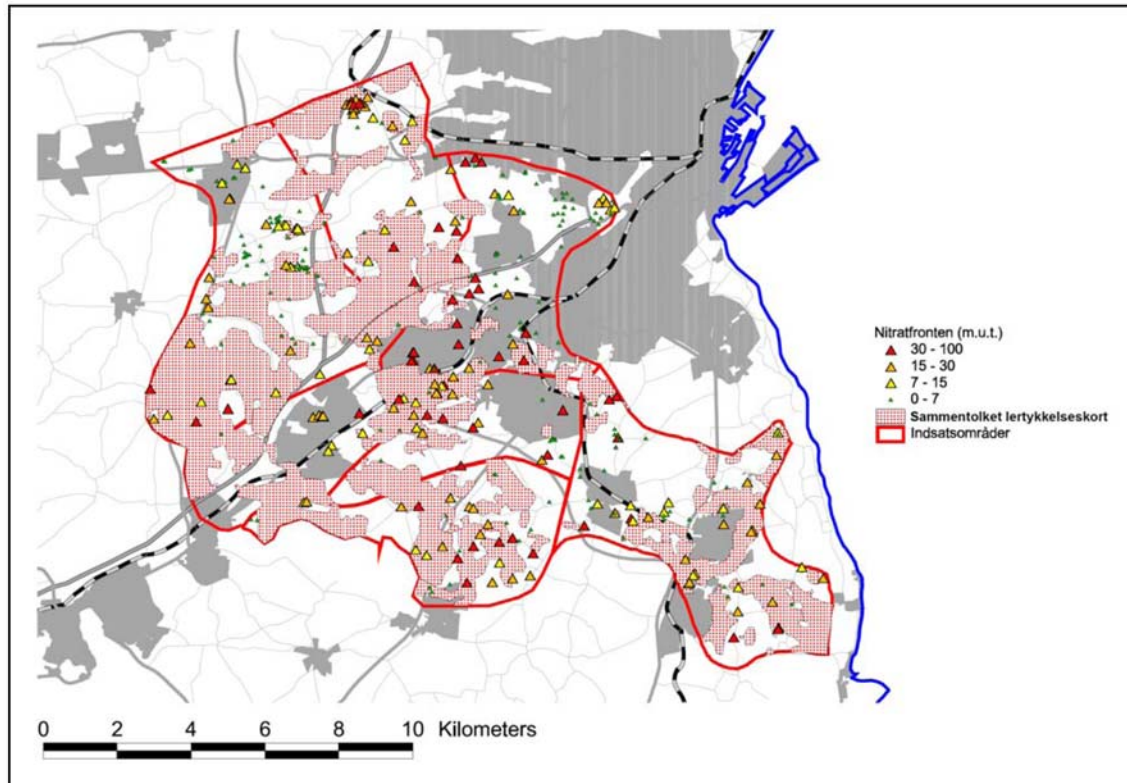
Sammentolkningen af vandkemi med nedtrængningsdybden af nitratfronten og lerlagstykker i de øverste jordlag, baseret på geologiske og geofysiske data, giver mulighed for identifikation af geologiske vinduer. Her er lerdæklaget ikke sammenhængende, men indeholder permeable sandede indslag ved jordoverfladen med hydraulisk kontakt til grundvandet. Disse geologiske vinduer kan være vanskelige at identificere, og dette sker bedst ved sammentolkning og er et vigtigt element i udpegningen af områder, hvor grundvandet er sårbart over for nitrat.

I et heterogent geologisk område vil nitratfronten have en stærkt varierende indtrængningsdybde, og man vil her kunne finde oxiderede vandførende lag under reducerede ler og siltlag, idet den heterogene geologi giver anledning til et komplekst strømningsmønster, der ofte alene kan erkendes gennem de geokemiske egenskaber af grundvandsmagasinet. Dette kan ud over nitratholdigt vand under grå lerlag også være forekomster af hydraulisk stærkt vandførende lag, hvor kalken er udvasket af det strømmende vand, hvor de omgivende mindre hydraulisk ledende lag fortsat er kalkholdige. Det er processer som disse, det er vigtigt at identificere, når sårbarheden af grundvandsmagasinerne i et heterogent område skal kortlægges.

Farvebeskrivelserne af sedimentet fra en boring kan vise mange redoxgrænser (farveskift mellem rødlige og grålige farver). Dette kan vidne om geologiske vinduer, der ikke altid opdages, hvis der ikke ses på sedimenternes farvebeskrivelse. Dermed er iagttagelse af

repeterende redoxskift i en boring en vigtig indikation på, at grundvandsmagasinet er sårbart over for nitrat.

På figur 9.3 ses et eksempel fra Århus Syd-området, hvor nitratfronten baseret på farvebeskrivelser fra jordlagene, er sammenholdt med et samtolket lertykkelseskort. På grund af den heterogene geologi i Århus-Syd området er der store variationer i nitratfrontens beliggenhed inden for korte afstande flere steder med repeterende redoxskift.



Figur 9.3 Nitratfrontens dybde under terræn sammenstillet med kort over samtolket lertykkelse (mindre end 15 meter) i dybdeintervallet 0-30 meter under terræn (Århus Amt, 2006b).

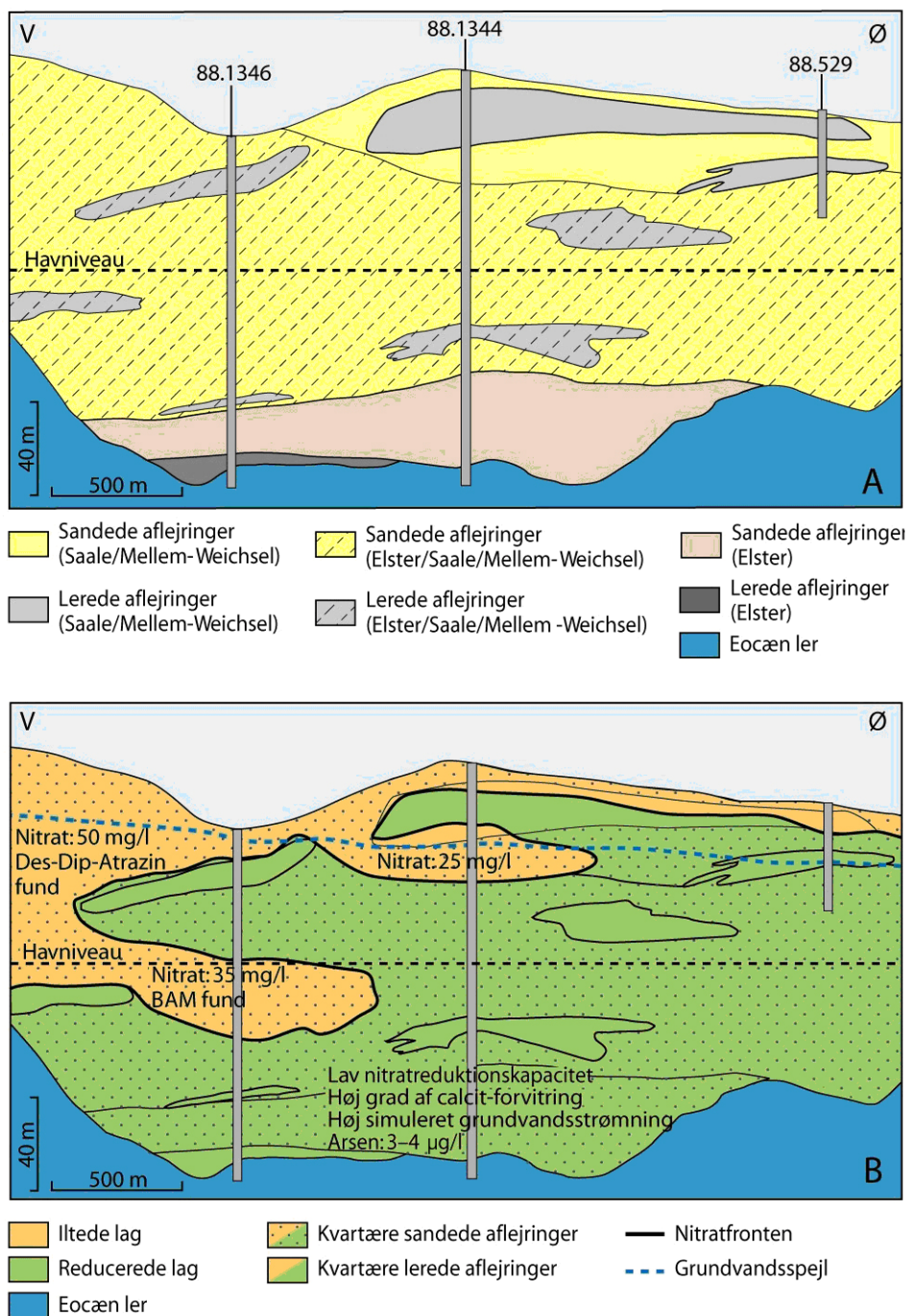
Generelt er der en god overensstemmelse mellem de steder, hvor nitratfronten er trængt dybt ned (> 7 m.u.t.), og de områder, hvor der er en < 15 meter samlet lerlagstykkelse i de øverste 30 meter.

Det fremgår også af figuren, at der er steder, hvor der ikke er overensstemmelse mellem en dybt beliggende nitratfront og en lille tykkelse af lerlagene i de øverste 30 meter. Dette kan have en naturlig forklaring som f.eks. at den umættede zone er stor, eller at der forekommer geologiske vinduer, hvor nitraten er trængt ind under tykke lerdæklag. Når der konstateres uoverensstemmelse mellem lerlags tykkelsen og beliggenheden af nitratfronten i et område, bør dette dog også resultere i, at kortet over lerdæklagene samlede tykkelse i de øverste 30 meter revurderes ved at gennemgå de geologiske og geofysiske oplysninger i området.

I områder med mindre komplicerede geologiske forhold vil udbredelsen af redoxgrænsen typisk udvise langt mindre variation.

9.7 Eksempel på sammentolkning: Kemiske og hydrogeologiske forhold

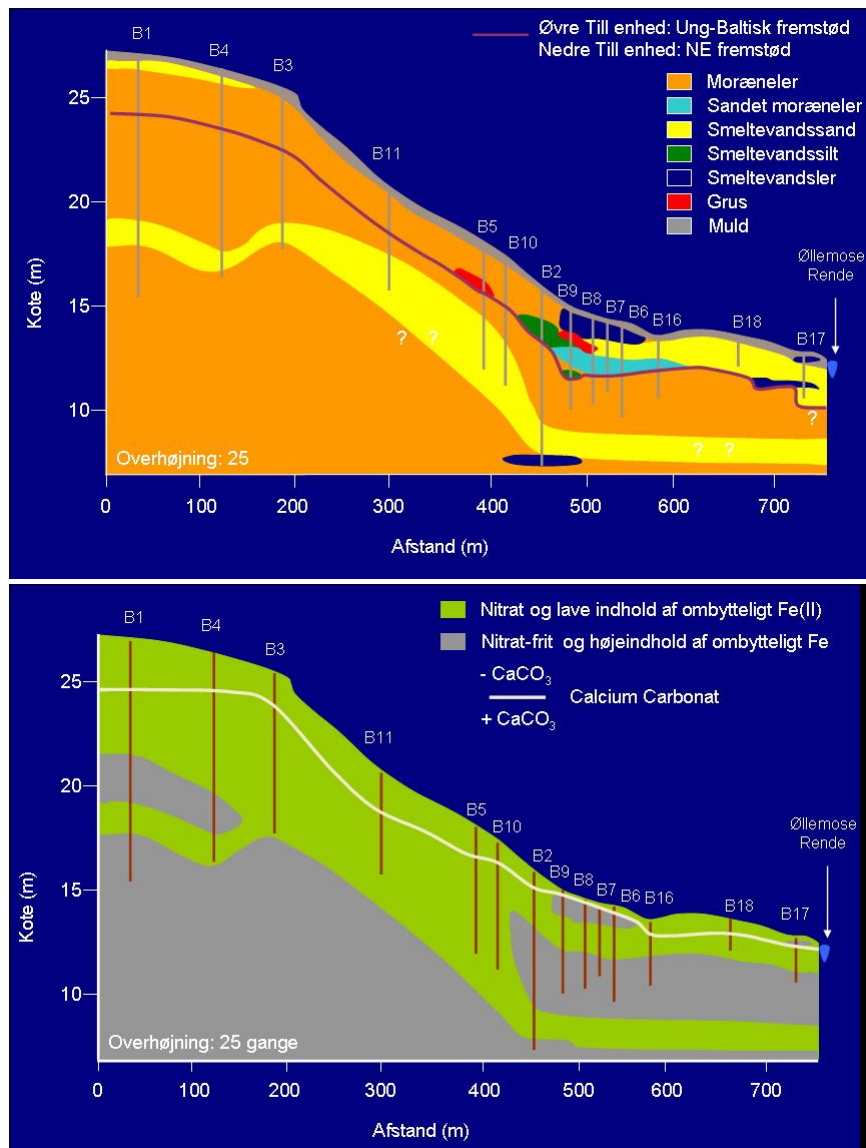
Ved at kombinere grundvands- og sedimentkemiske data (grundvandskemi, sedimentkemi, farvebeskrivelser, kalkindhold fra SESAM undersøgelserne), med geologiske og geofysiske oplysninger kan data styrke hinanden i tolkningen af laggrænser og hydrauliske forhold (Hansen m.fl., 2006). Et eksempel på en sådan sammentolkning er vist i figur 9.4, som viser et ca. 4 km langt geokemisk og geologisk profilsnit gennem en begravet dal syd for Århus. De kemiske data er her brugt til at kalibrere den geologiske model for området. F.eks. er nitratfrontens beliggenhed tolket til stort set at være sammenfaldende med overkanten af lerdæklagen. Selve sammentolkningen er sket i en iterativ proces, hvor det er nødvendigt at inddrage alle datatyper og alle fagligheder, idet det ofte vil blive nødvendigt at forkaste de indledende konceptuelle modeller. Samtidig skal der findes et passende niveau af generalisering og detaljering i forhold til den faktiske heterogenitet, der vil være til stede på næsten alle skalaer.



Figur 9.4 a: Geologisk profilsnit, b: skematisk vand og geokemisk profilsnit af Hasselager-Hørning-Jeksendalen syd for Århus (Hansen m.fl., 2006).

I figur 9.5 ses et andet eksempel på en sammentolkning af sedimentkemiske og geologiske data langs randen af en moræneflade syd for Slagelse på lille skala. I alt 14 borer blev gennemført langs en ca. 700 meter lang linie og på baggrund af analyser af sedimentprøver var det bl.a. muligt at beskrive udbredelsen af to till enheder, hvor overgangen bestod af mere sandet materiale og derfor viste sig at have stor betydning for vandtransporten i området. Fordelingen og udbredelsen af oxiderede og kalkholdige lag bidrog ligeledes til forståelsen af vandets strømningsmønstre. Eksempelvis fremstod laget af smeltevandslér

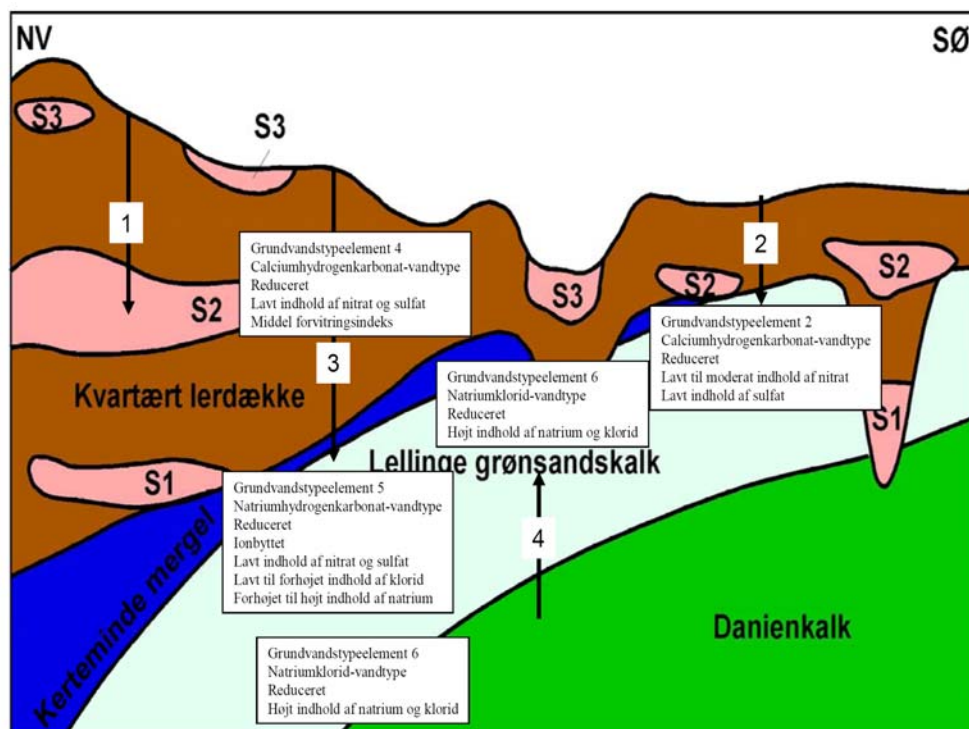
stadig reduceret og kalkholdigt, mens de mere sandede og hydraulisk aktive lag fremstod kalkfrie og oxiderede. Kombinationen af geokemiske og geologiske forhold styrede således fordelingen af bl.a. pesticider og nitrat, hvor sidstnævnte var begrænset til de oxiderede lag karakteriseret ved lave indhold af ferrojern (Ernstsen, 1999).



Figur 9.5. Et 750 meter profil under landbrug ved Frankrup, syd for Slagelse. Øverst: Udbredelsen af forskellige typer sedimentter samt udbredelsen af till enheder. Nederst fordelingen af kalkholdige lag samt oxiderede lag karakteriseret ved geokemisk miljøer, hvor de oxiderede lag indeholder nitrat og lave indhold af ombytteligt ferrojern, og de reducerede nitratfrie jordlag fremstår med høje indhold af ombytteligt ferrojern.

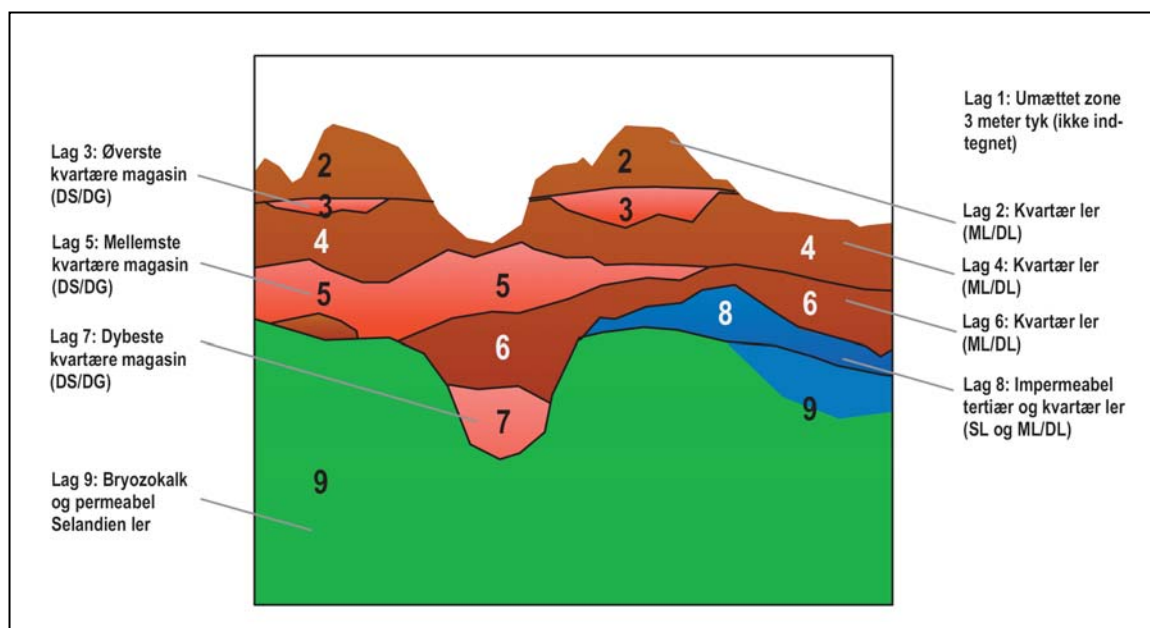
I figur 9.6 vises et eksempel på et geokemisk profil fra Ringsted kortlægningsområdet. Pilene angiver teoretiske strømningsbaner for den grundvandskemiske udvikling. Desuden er angivet grundvandskemiske karakteristika for de forskellige magasiner i området. Kortlægningen viste, at der generelt var god overensstemmelse mellem de grundvandskemiske

forhold i kalkmagasinet og de geologiske og hydrogeologiske forhold i magasinet og dets dæklag (Vestsjællands Amt, 2006).

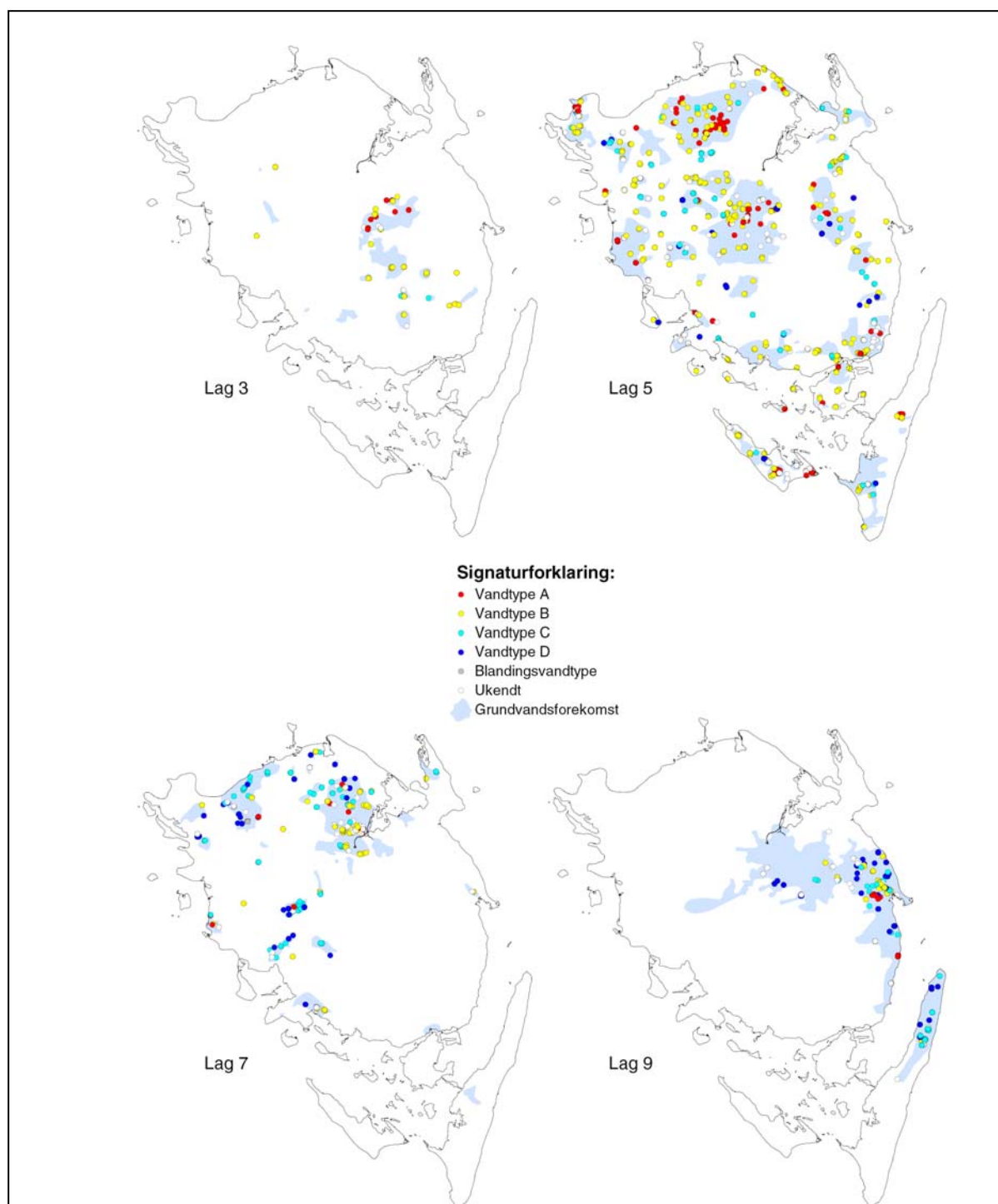


Figur 9.6. Skitse af konceptuel grundvandskemisk model for Ringsted kortlægningsområdet. Pilene angiver teoretiske strømningsbaner for den grundvandskemiske udvikling. I kaserne er vist grundvandskemiske karakteristika (Vestsjællands Amt, 2006).

I figur 9.7 og 9.8 er vist et eksempel fra Fyn, hvor vandtyper og grundvandsforekomsterne er sammenstillet med de forskellige geologiske lag i Fynsmodellen (Fyns Amt, 2005). Sammentolkningen af data er brugt til at vurdere nitratsårbarheden af de forskellige grundvandsforekomster på Fyn.



Figur 9.7 Konceptuel hydrogeologisk model for Fyn (Fyns Amt, 2005).



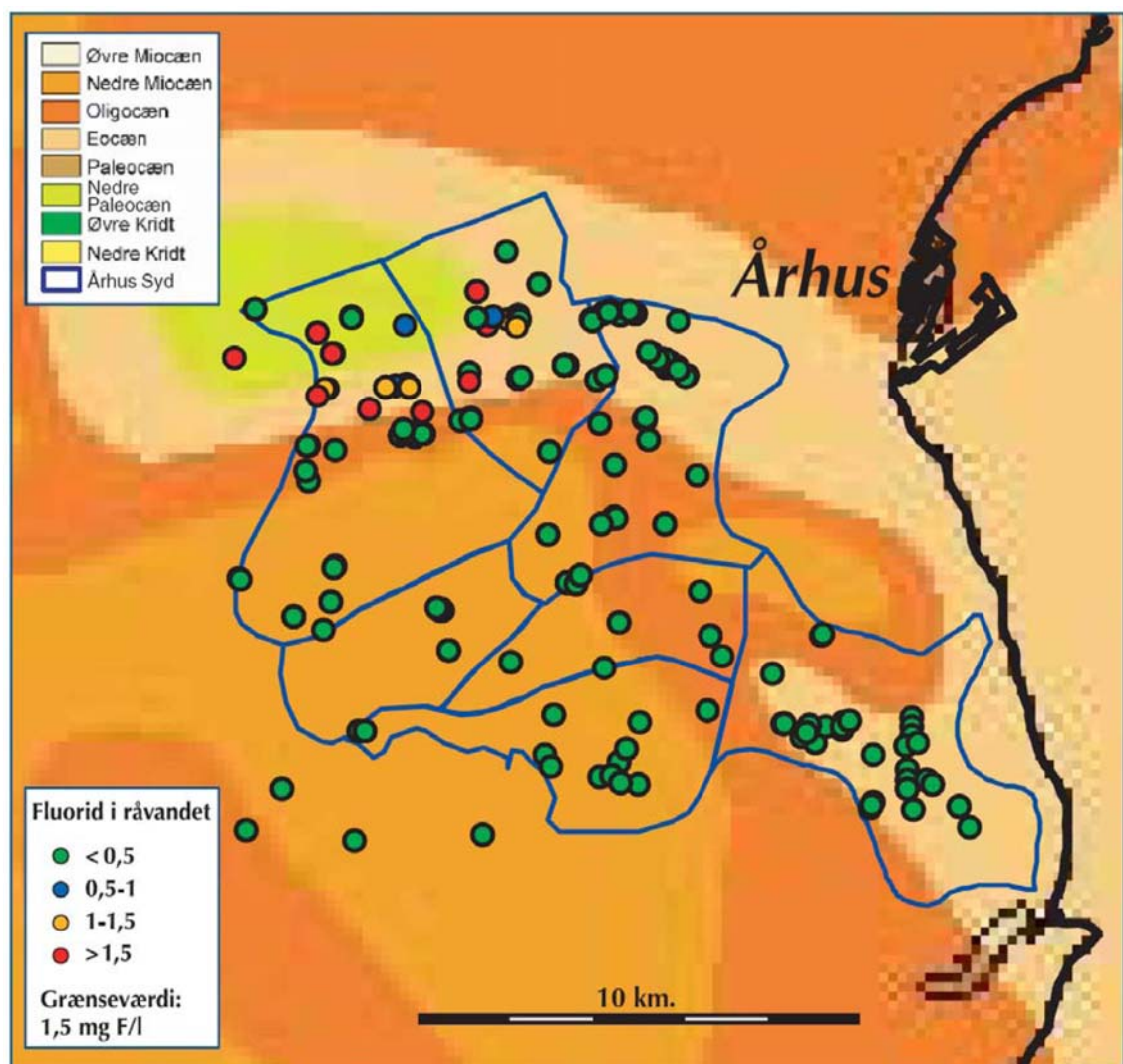
Figur 9.8. Vandtyper og grundvandsforekomster i de forskellige lag identificeret i den konceptuelle hydrogeologiske Fynsmodellen vist i figur 9.7.

9.8 Eksempel på sammentolkning: Udbredelsen af højtliggende kalk

Koncentrationer af fluorid i grundvandet kan bruges til identifikation af dybere laggrænser nemlig kalkoverfladens beliggenhed.

Forekomsten af høje koncentrationer af fluorid i grundvandet er ofte sammenfaldende med forekomsten af kalkaflejringer i grundvandsmagasinet. Fluoridforekomsten skyldes en kombination af ældre stagnerende vand og påvirkning fra fluoridholdige mineraler som fluorit og apatit (Laursen & Kærgaard, 2002). I et område med stor grundvandsgennemstrømning i et kalkmagasin, vil der omvendt ikke være fluorid tilstede i høje koncentrationer, da fluoridkoncentrationen afhænger af reaktionstiden.

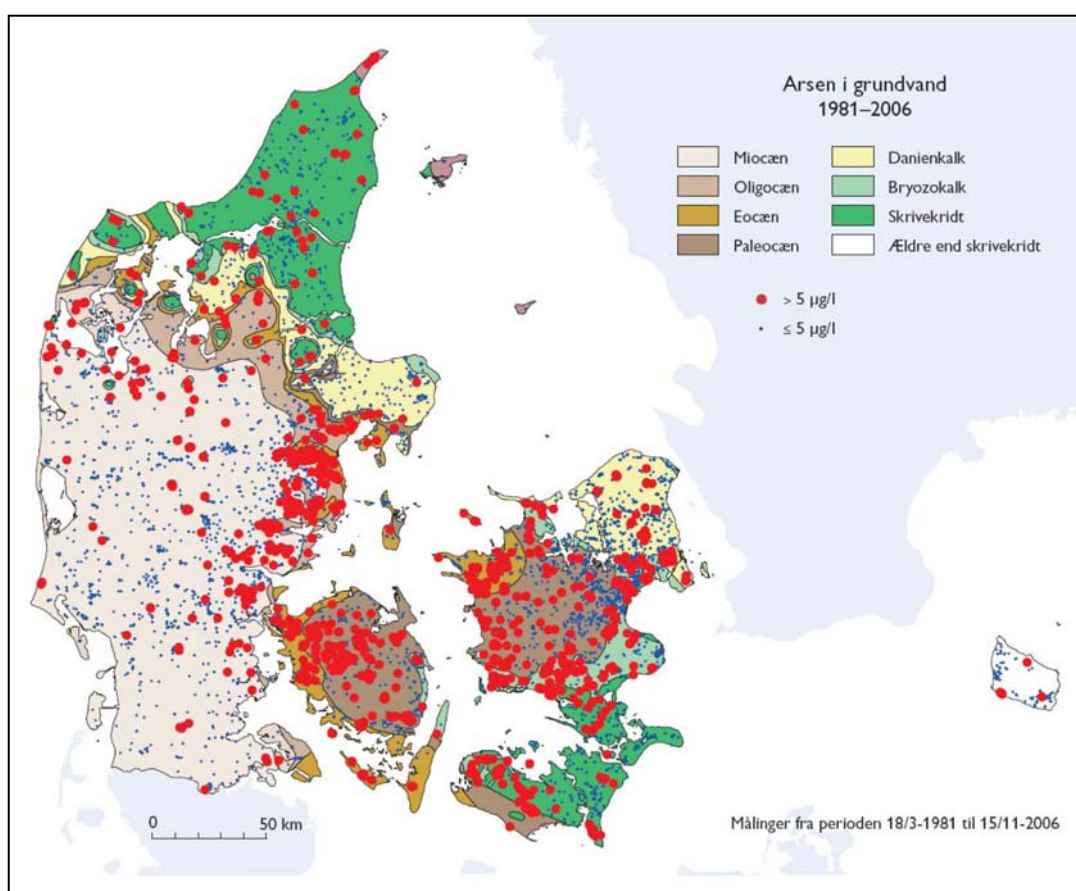
På figur 9.9 ses et eksempel fra Århus ved Brabranddalen, hvor høje fluoridkoncentrationer er sammenfaldende med forekomsten af kalkaflejringer umiddelbart under grundvandsmagasinet. Udbredelsen af de høje fluoridkoncentrationer i grundvandet i dette område indikerer, at kalkoverfladen ligger forholdsvis højt lidt længere mod øst, end det regionale kort fra Varv (1992) viser.



Figur 9.9 Fluoridindholdet i grundvandet ved Brabranddalen ved Århus. Undergrunden omkring Århus Syd er fra Varv (1992) (Århus Amt, 2006b).

9.9 Eksempel på sammentolkning: Kilder til arsen i grundvandet

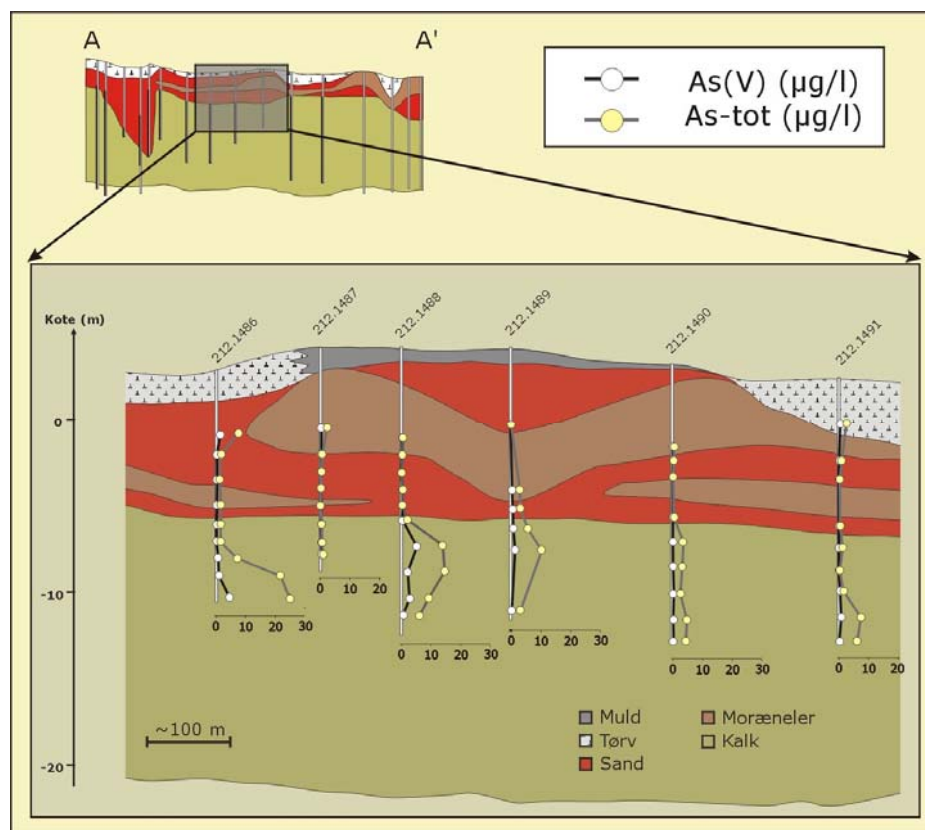
På figur 9.10 vises et eksempel på sammenstilling af den prækvartære overflade med koncentrationsniveauet af arsen i grundvandet (Thorling, 2007). Figuren viser de steder i landet, hvor koncentrationen af arsen i grundvandet er over 5 µg/l (røde prikker) og under 5 µg/l (blå prikker) i forhold til udbredelsen af den prækvartære aflejringer. Høje koncentrationer af arsen i grundvandet er koncentreret til flere sammenhængende områder i landet; 1) områder på Vestsjælland, Fyn og det østlige Midtjylland, hvor den prækvartære overflade består af fedt tertiært ler fra Oligocæn, Eocæn og Palæocæn, 2) Lolland og det sydlige Sjælland, hvor den prækvartære overflade består af kalk og 3) Vestlig del af Limfjordsområdet, hvor der er fundet marin lerede aflejringer fra Elster. Desuden ses høje koncentrationer af arsen i grundvandet i mindre områder mange andre steder i landet.



Figur 9.10 Indholdet af arsen i grundvandet i Danmark i forhold til udbredelsen af prækvartære formationer. Analyserne stammer fra forskellige typer borer: LOOP, GRUMO, indvindingsboringer og undersøgelsesboringer (Thorling, 2007).

På figur 9.11 viser nye resultater fra en undersøgelse af arsen i kalkmagasiner i Danmark (Kjøller m.fl., 2009). I figuren sammenstilles arsenkoncentrationer (arsen total og arsen V) i flere niveauer i 6 undersøgelsesboringer med den konceptuelle hydrogeologiske model for området. Arsen findes i meget lave koncentrationer i de glaciale sedimenter, med de højeste indhold under tørveaflejringerne. I de øverste meter af kalken ses et stigende indhold af

arsen i grundvandet med stigende dybder. I undersøgelsen vurderes det at kilden til arsen i grundvandet i kalken skyldes en reduktiv opløsning af jeroxider.



Figur 9.11. Koncentrationer af As-total og As(V) i seks undersøgelsesboringer placeret syd for Køge Å set i forhold til et hydrogeologisk tværsnit (Kjøller m.fl., 2009).

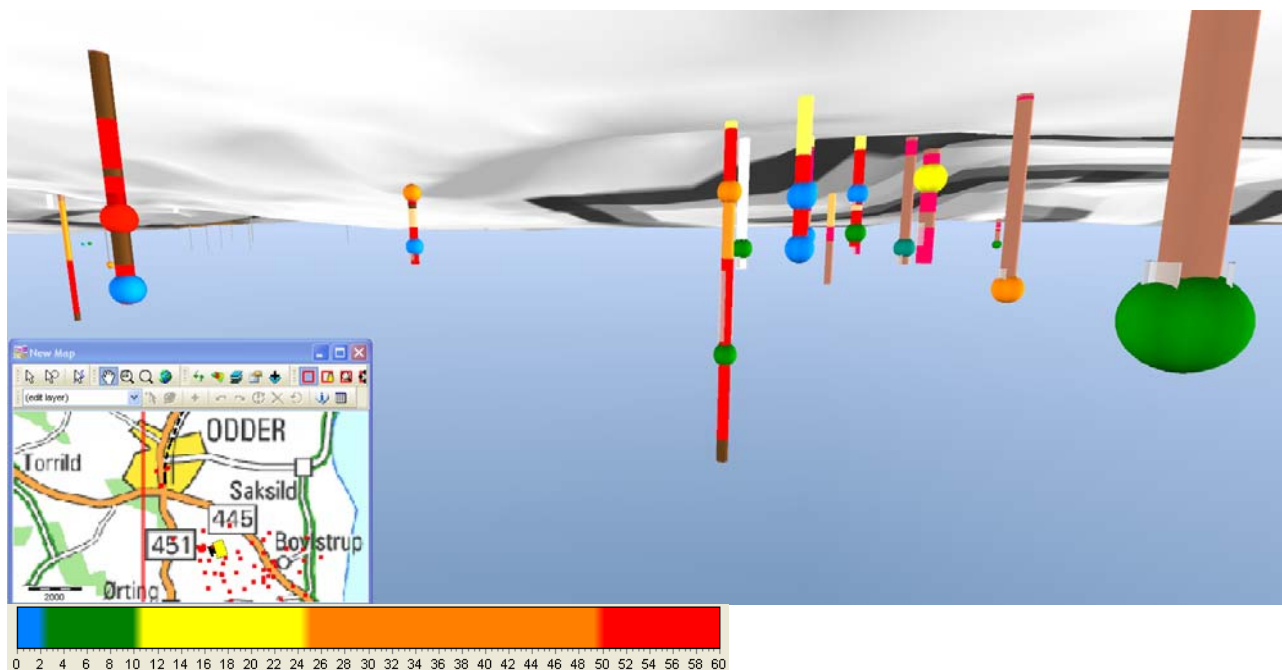
9.10 Sammentolkningsmuligheder i 3D

Kemiske såvel som geologiske data kan rummelig gøres ved 3-dimensionale sammenstillinger og dermed bidrage til en mere komplet fremstilling af forholdene indenfor undersøgelsesområdet. Tolkingsmulighederne i 3D skal ses som et supplement til de øvrige tolkninger.

GeoScene 3D

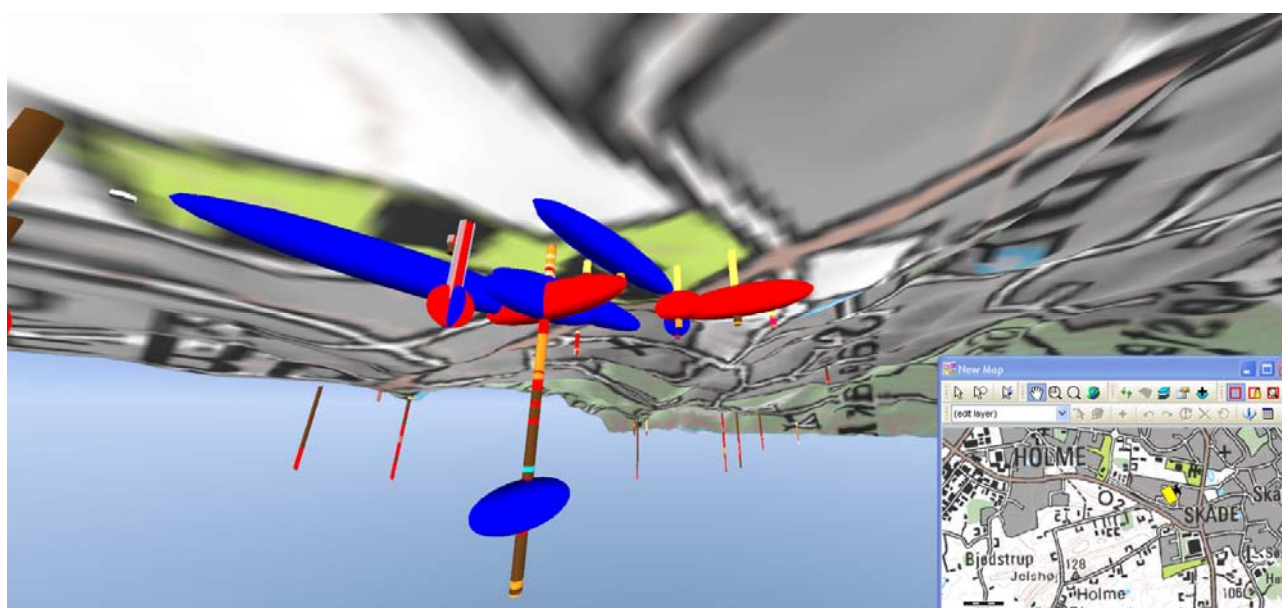
I GeoScene 3D er det muligt at "flyve" rundt i området (på PC'en) og danne sig et overblik over området med kritiske koncentrationer af forskellige parametre.

Data med tilknyttede X-, Y- og Z-koordinater placeres visuelt både i X-, Y-planet og i Z-planet. Brugeren opnår derved reelle opfattelser af både proportioner og beliggenhed af de visualiserede elementer i modelrummet. 3D-visualiseringen giver mulighed for et forbedret overblik over kemiske parametre i forhold til geologiske strukturer, potentialer og andre centrale forhold i den kemiske tolkningsproces (se figur 9.12 og 9.13).



Figur 9.12 Viser gennemsnitsværdier for nitratkoncentrationer (mg/l) over en 10 års periode i et indsatsområde syd for Århus.

Samlet præsentation i 3D

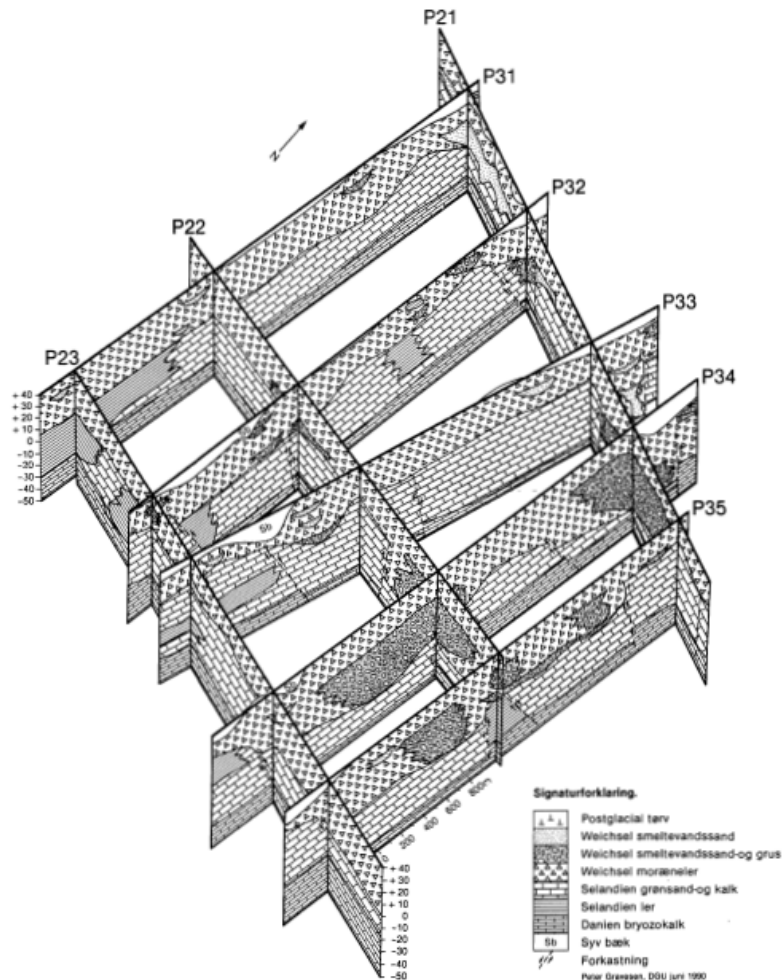


Figur 9.13 Samlet præsentation med Nitrat (blå) og fosfat (rød), hvor den relative koncentration er vist via legemernes bredde.

Fencediagram

Fencediagrammet er traditionelt brugt til at sammenstille boreprofiler i en 3-dimensional model, hvor lagfølgen fra boring til boring korreleres, idet det sikres at aldersfølgen holdes. Den 3-dimensionale model bidrager, ligesom eksempelvis GeoScene 3D, til en rummelig opfattelse eller fortolkning af undersøgelsesområdets geologiske forhold. I tolkningen af geologien anvendes samtlige borer i området, men ved udarbejdelsen af fencediagrammet vises kun de borer, der ligger i diagrammets profilinier. Figur 9.14 viser et fen-

cedigram udarbejdet for oplandet til Syv bæk, hvor de geologiske forhold er præget af tykke forholdsvis uforstyrrede morænelerslag over vandførende lag, stedvis med artesiske forhold (Ernstsen et al., 1990). På lignende vis kan der tegnes et geokemisk fencediagram ved at sammenstille geokemiske profilsnit i en 3-dimensionel model.



Figur 9.14. Fencediagram for oplandet til Syv bæk (Ernstsen et al. 1990).

Fordelene ved 3D-visualisering og -tolkning er følgende:

- 3D-visualiseringen forøger overblikket over de rumlige forhold i modelrummet, og dette medfører bedre indsigt i de anvendte data og udarbejdede modeller.
- Gode muligheder for at visualisere kemiske data med andre datatyper.
- Udførte tolkninger kan effektivt kvalitetssikres.
- Mulighed for anvendelse af 3D-interpolation af data, hvis datatætheden er stor.

Ulemperne ved 3D-visualisering og -tolkning er følgende:

- Det kræver tilvænning at arbejde med 3D.
- Datatætheden for kemiske data er ofte meget lav, så der bliver langt mellem datapunkterne, hvilket på den anden side også er en vigtig erkendelse.

10. Referencer

Aktor, H., 1993. Fluorid i dansk grundvand. Vandteknik nr. 9.

Alectia, 2009. Grundvandskemi. Hadstenområdet. MC Århus.

Analysebekendtgørelsen, 2006. Miljø og Energiministeriets bekendtgørelse nr. 1353 af 11. december 2006. Bekendtgørelse om kvalitetskrav til miljømålinger udført af akkrediterede laboratorier, certificerede personer m.v.

Appelo, C.A.J. & D., 2005. Postma. Geochemistry, Groundwater and Pollution. 2nd edition. A.A. Balkema Publishers, Leiden, The Netherlands.

Miljøministeriet, 2007. Bekendtgørelse om vandkvalitet og tilsyn med vandforsyningsanlæg. LBK Nr. 17 af 17/01/2007.

Dataansvarsaftalen, 2007. Findes på Miljøportalen:
<http://www.miljoportal.dk/Myndigheder/Dataansvarsaftalen/>.

Deutsch, W., 1997. Groundwater Geochemistry: Fundamentals and Applications to Contamination. CRC Press LLC, Boca Raton, Florida.

Ditlevsen, C., Sørensen, J., Pallesen, T.M., Pedersen, D., Nielsen, O.B., Christiansen, C., Hansen, B. & Gravesen, P., 2008. Jordprøver fra grundvandsboringer. Vejledning i udtagning, beskrivelse og geologisk tolkning i felten. Geo-vejledning 1, Særudgivelse, GEUS, 108 pp.

Dyhr-Nielsen, M., Hansen, E., Holter, V., Krag-Andersen, K., Gravesen, P. & Iversen, T.M., 1991. Kvælstof og fosfor i jord og vand. Samlerapport. NPo-forskning fra Miljøstyrelsen.

Engesgaard, P., 2007. Calibration of groundwater models using direct simulation of spatial moments of age distributions. Sixth International Conference on Calibration and Reliability in Groundwater Modelling, ModelCARE 2007, København.

Ernstsen, V., Jørgensen, N. & Jørgensen, C.R., 2005. Metode til analyse af reducerende stoffer i sedimenter. Miljøprojekt Nr. 1024 2005, Miljøstyrelsen, Miljøministeriet.

Ernstsen, V., Henriksen, H.J. & von Platen, F., 2001. Principper for beregning af nitratreduktion i jordlagene under rodzonen. Arbejdsrapport fra Miljøstyrelsen Nr. 24, 2001.

Ernstsen, V. 1999. Micro- and macro-geochemical environments of clayey till deposits. The Geological Society of America, 1999 Annual meeting & exposition, Oktober 25-28 1999, Denver, USA. GSA Abstracts with programs, p. A450.

Ernstsen, V., Gravesen, P., Nilsson, B., Brusch, W., Fredericia, J. og Genders, S. 1990. Transport og omsætning af N og P i Langvad Å's opland. Danmarks Geologiske Undersøgelse, intern rapport nr. 44. pp. 63 + 3 kortbilag

Ernstsen, V., Højberg, A.L., Jakobsen, P.R., Platen, F. von, Tougaard, L., Hansen, J.R., Blicher-Mathiasen, G., Bøgestrand, J. Børgesen, C.D. 2006. Beregning af nitrat-reduktionsfaktorer for zonen mellem rodzonen og frem til vandløbet. Data og metode for 1. generationskortet. Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelse, rapport 2006/93.

European Commission, 2009. Common Implementation Strategy for the Water Framework Directive. Guidance Document No. 18. Guidance on Groundwater Status and Trend Assessment. Technical Report 2009-026.

Freeze, A. & Cherry J., 1979. Groundwater. Prentice Hall Inc., Upper Saddle River, New Jersey.

Fyns Amt., 2005. Kortlægning af grundvandsressourcerne – Status for vandressourcekortlægningen 2005. Miljø- og Arealafdelingen, Fyns Amt.

GEUS, 1995. Grundvandsovervågningen 1995. Miljø- og Energiministeriet, Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelser.

GEUS, 2004. Teknisk anvisning for Grundvandsovervågningen. Version 4 af 17. august 2004.

GEUS 2009. Indberetning til GEUS af ældre data indsamlet under trin 1 af grundvandskortlægningen. GEUS-NOTAT. Eds.: Claus Ditlevsen og Verner Søndergaard. http://gk.geus.info/xpdf/indberetning-af-gamle-data_sept09.pdf.

Grant, R., Blicher-Mathiesen, G., Pedersen, L.E., Jensen, P. G., Madsen, I., Hansen, B., Brusch, W. & Thorling L., 2007. Landovervågningsoplande 2006. Faglig rapport fra DMU nr. 640.

Hansen, L. K., Jakobsen, J. & Postma, D., 2001. Methanogenesis in a shallow sandy aquifer, Rømø, Denmark. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, Vol. 65, nr. 17.

Hansen, B, Jordt B.E. & Thomsen, R. samt Jette Sørensen (tidl. Sedimentsamarbejdet, nu Rambøll), Christian Kronborg & Ole Bjørsløv Nielsen (Geologisk Institut, Aarhus Universitet). 2006. Gebyrkortlægning i Århus Syd – geologisk, kemisk og hydrologisk datasammenstilling. *Geologisk Nyt* nr. 3/06.

Hansen, B. & Thorling, L., 2007. Interkalibreringen af grundvandsprøvetagningen 2007. Særudgivelse. GEUS-rapporten kan hentes fra nettet: www.grundvandsovervaagning.dk.

Hansen, B & Thorling, L., 2008. Use of geochemistry in groundwater vulnerability mapping in Denmark. ROSA. GEUS.

Hinsby, K. 1999: Aldersbestemmelse af grundvand – et vigtigt redskab i forvaltning af vandressourcen. Vandforsyningssteknik, nr. 48.

Iversen, C.H., Lauritsen, L.U., Nyholm, T. & Kürstein, J., 2008. Udpegning af indvindings- og grundvandsdannende oplande (Del 1). Geo-vejledning 2.

Jacobsen, O.S., Laier, T., Juhler, R., Munch Kristiansen, S., Dichmann, E. Brinck, K., Marcher Juhl, M. / Grøn, C., 2007. Forekomst og naturlig produktion af chloroform i grundvand. Udarbejdet for By- og Landskabsstyrelse.

Jørgensen, F., Kristensen, M., Højberg, A.L., Klint, K.E.S., Hansen, C., Jordt, B.E., Richardt, N. & Sandersen, P., 2008. Opstilling af geologiske modeller til grundvandsmodellering. Geo-vejledning 3, 175 pp.

Karlby, H. & Sørensen, I., 2002. Vandforsyning, 2. udgave.

Kazemi, G, Lehr, J. & Perrochet, P. 2006. Groundwater Age. Wiley.

Kjøller, c., Larsen, F., Sø, H.U. & Postma, D., 2009. Arsen i kalkmagasiner i Danmark. GEUS rapport.

Kristiansen, S.M., Damgaard Chistensen, F. & Hansen, B., in press. Vurdering af danske grundvandsmagasiners følsomhed overfor vejsalt. GEUS rapport.

Krog, L., H.B. Madsen & Humlekrog, M., 2000. Cation-Exchange Capacity Pedotransfer Functions for Danish Soils. Acta Agric. Scand., Section B. Soil and Plant. Sci: 50 1-12.

Larsen, F. Cjøller, C. & Ramsay, L, in press. Arsen I dansk grundvand og drikkevand. Udarbejdet for By- og Landskabsstyrelsen.

Laursen og Kærgaard Bjerre, 2002. Fluridindhold i drikkevand (fra kalkmagasiner). ATV-møde. Kalkmagasiner som drikkevandsressource – problemer og løsningsforslag.

Mahrt, J. 2008. Telefonisk kommunikation.

Meyer, A., 2004. Functional foods. 1. Definitioner og eksempler på produkter. Dansk Kemi 1.

Miljøministeriet, 2007. Bekendtgørelse om vandkvalitet og tilsyn med vandforsyningsanlæg. BEK nr. 1449 af 11/12/2007.

Miljøstyrelsen, 2000. Zonering. Detailkortlægning af arealer til beskyttelse af grundvandsressourcen. Vejledning nr. 3, 2000.

MIM, 2009. Administrationsgrundlag for miljøministeriets afgiftsfinansierede grundvandskortlægning. <http://www.blst.dk/NR/rdonlyres/425AA420-781A-4E8A-8D7F-71A3BD14B75A/90910/AdministrationsgrundlagEndelig010709.pdf>.

Miljøstyrelsen, 1997. Boringskontrol på vandværker. Vejledning nr. 2, 1997.

Mossin, L. & Jakobsen, K., 2006. Sulfatindhold og vandtypebestemmelse. Vand og Jord, 13. årgang nr. 2.

Mølsted, H., Buck Jensen, M. & Lykke, A., 2009. Designer-vand i hanen kan redde liv og tænder. Ingeniøren, 20. jan 2009.

Nyvang Iversen, V., 2008. Forekomst af oliestoffer i reducerede grundvandsmagasiner - Er der tale om forureninger? ATV Vintermøde, Vingsted.

Ramsay, L., 2002. Grafisk præsentation af grundvandsanalyser - de kendte metoder og det nye møllehjul. VANDteknik no. 4, maj 2002.

Ramsay, L., 2006. The Chemistry of Groundwater Systems. Noter til undervisning på ingeniørhøjskoler.

Rasmussen, P., H.J. Henriksen, P. Nyegaard, M. Hundahl, R. Thomsen, G. Brannndt, M. landt, A. Mogensen og S. kaalby., 1995. Zoneopdelt grundvandsbeskyttelse. Projekt om jord og grundvand fra Miljøstyrelsen, Nr. 14. Miljøstyrelsen. Miljø- og Energiministeriet.

Thorling, L., 1994. Sulfat som aldersindikator i grundvand. Vand og Miljø, Vol 1, nr. 3.

Thorling, L., 2007. Grundvand – status og udvikling. 1989-2006. Eds.: Thorling, L., Hansen, B., Larsen, C.L., Brusch, W., Jørgensen, L.F., Højberg, A.L. & Trolborg, L.

Varv, 1992. Kort over Prækvarteroverfladen.

Vestsjællands Amt, 2006. Ringsted kortlægningsområde fase 2a. Detailkortlægning i området øst for Ringsted by. Rambøll.

Århus Amt, 2002. Arsen i grundvandet – et fænomen i de tertiære begravede dale? Eds: Birgitte Hansen, Richard Thomsen, Lærke Thorling og Brian Sørensen, 26 p.

Århus Amt, 2006a. Repræsentativ sedimentkemisk prøvetagning fra dybe grundvandsboringer. Eds. Birgitte Hansen, Lærke Thorling, Per V. Misser, Torben Wandall, Mogens Wium (GEO) og Christian Christiansen (Poul Christiansen A/S), 22 pp.

Århus Amt, 2006b. Redegørelser for grundvandsressourcerne i Århus Syd-området. Eds.: Signe Weng Grønhøj, Birgitte Hansen, Ole Dyrsø Jensen, Birthe Eg Jordt, Stine Rasmussen og Richard Thomsen, 285 pp.

Bilag A1: Paradigma til rapportering af den kemiske kortlægning under trin 1b

"Den kemiske model på eksisterende data"

1. Formål og problemstillinger
2. Datahåndtering
 - Datagrundlag
 - Dataoverførsel og udvælgelse
 - Dokumentation og accept af data
 - Dataforberedelse
3. Vandindvinding
 - Overordnet beskrivelse
 - Identifikation af problemstoffer
4. Grundvandsressourcens kemiske tilstand
 - Præsentationer
5. Den kemiske model på eksisterende data
 - sammentolkning med arealmæssige data
 - sammentolkning med "Den geologiske forståelsesmodel"
6. Kvalitetssikring mv.
 - Kvalitetssikring
 - Kvalitetskontrol
 - Usikkerhed
7. Behov for nye data og prøvetagningsstrategi
8. Sammenfatning

Appendix A: Vandværksbeskrivelser (se bilag B i vejledningen)

Bilag A2: Paradigma til rapportering af den kemiske kortlægning under trin 2a

"Nye kemiske kortlægningsresultater"

1. Formål og problemstillinger
2. Dataindsamling
 - Placering af boringer
 - Borearbejde og sedimentprøvebeskrivelser
 - Prøvetagningsprogram
 - Analyseprogram
3. Kvalitetssikring mv.
 - Kvalitetssikring
 - Kvalitetskontrol
 - Usikkerhed
4. Beskrivelse af de nye boringer enkeltvis
 - Lithologisk
 - Vandkemisk
 - Sedimentkemisk

Bilag A3: Paradigma til rapportering af den kemiske kortlægning under trin 2b

"Den Hydro-geokemiske model"

1. Formål og problemstillinger
2. Datahåndtering
 - Datagrundlag
 - Dataoverførsel og udvælgelse
 - Dokumentation og accept af data
 - Dataforberedelse
3. Grundvandsressourcens kemiske tilstand
 - Forureningsstoffer
 - Naturlige stoffer
 - Geokemiske processer
 - Tidslig udvikling
 - Aldersvurdering
4. Den hydro-geokemiske model
 - Sammentolkning til "Den hydrostratigrafiske model"
5. Kvalitetssikring mv.
 - Kvalitetssikring
 - Kvalitetskontrol
 - Usikkerhed
6. Sammenfatning

Bilag B: Paradigma for vandværksbeskrivelse

Forslag til indholdsfortegnelse ved vandværksbeskrivelser samt anbefalede figurer, kort og profilsnit, jf. Kap 5. Vandværksbeskrivelserne indgår som bilag i forbindelse med afrapporteringen af Trin 1b.

1. Indledning

Kort beskrivelse af vandværket: beliggenhed, antal kildepladser, antal borer med angivelse af DGU numre og indvindingens størrelse samt en meget kort beskrivelse af de geologiske forhold i området med fokus på magasinbjergarter og dæklag på kildepladsen.

Figurer:

- evt. foto af vandværket og indvindingsboringerne

2. Hydrogeologiske forhold på kildepladsen

Den hydrogeologiske forståelse af kildepladsen. Beskrivelse af indvindingens størrelse og indvindingsstrategi samt udløbsdato for indvindingstilladelsen.

En meget kortfattet beskrivelse af eventuelle prøvepumpningsforsøg og andre projekter udført på kildepladsen, såfremt disse vurderes at kunne bidrage med relevant information.

Figurer:

- Kort med boringernes indbyrdes placering på kildepladsen
- Tværsnit på kildepladsen, der som udgangspunkt viser samtlige borer
- Evt. tidlig udvikling i indvinding
- Evt. plot af vandspejlsfluktuationer på kildepladsen.

Tabeller:

- Oversigt over borer med DGU nr., alder, dybde, filterinterval, historik, nuværende anvendelse, frit/spændt vandspejl, magasinbjergart, magasintykkelse, dæklagstykkelser, dæklagstype, kemiske problemstoffer og nitratfront

3. Hydrogeologiske forhold i oplandet og arealanvendelsen

Overblik over oplandet: overordnet beskrivelse af regional geologi, hvor dannes grundvandet, forureningstrusler, sårbar natur mv.

Figurer:

- Kort med kortlagte forurenede grunde i oplandet
- Lertykkelseskort, såfremt at det er fremstillet
- Kort med samtlige borer i oplandet og med særlig fremhævelse af dem med vandkemiske analyser

- Kort med målsat natur/vandløb i oplandet
- Hvis der er problemer med sænkning af potentialet i oplandet skal dette illustreres

4. Vandkvalitet

Kvaliteten af råvandet, vurderes ud fra dets anvendelse til drikkevand. Lokale problemstoffer identificeres. De problematiske stoffers følsomhed overfor almindelig vandbehandling. Kilden til de problematiske stoffer vurderes i forhold til geologi og arealanvendelse, og mulighederne for indsats.

Følgende stoffer bør behandles: Nitrat, klorid, sulfat, vandtype, forvittringsindeks, ionbytning, uorganiske sporstoffer, forekomst og analyseomfang af miljøfremmede stoffer, forekomst af vandbehandlingsfølsomme stoffer.

Tabeller

- Oversigt over problematiske stoffer, deres koncentration, deres følsomhed overfor simpel vandbehandling, evt. kilder

5. Tidsserier

Den tidslige udvikling i vandkvalitet skal vurderes i lyset af bl.a. indvinding og arealanvendelse i oplandet. Drikkevandsanalyser på det enkelte vandværk anvendes hvor det skønnes nødvendigt og risikoen for fejltolkning ved anvendelse af disse diskuteres.

Figurer

- Tidsserier for klorid i råvand
- Tidsserier for nitrat i råvand
- Tidsserier for sulfat i råvand
- Tidsserier for ionbytning
- Tidsserier for evt. fund af pesticider
- Tidsserier for evt. fund af andre miljøfremmede stoffer
- Tidsserier for område specifikke problemstoffer – såfremt disse er følsomme for vandbehandling kan den tidslige udvikling i disse stoffer med fordel optegnes
- Tidsserier for grundvandspotentiale og evt. sammenstilling med vandkvalitet

For ovennævnte stoffer vurderes behovet for også at optegne dem på drikkevand ud fra datatæthed, antal boringer/kildepladser, filterintervaller m.v.

6. Sammenfatning

Der skal foretages en opsummering samt laves en konklusion på status og risici for nuværende og fremtidig vandkvalitet.

Bilag C: Geokemiske software programmer

Tabellen angiver en liste over forskelligt software p.t., som kan bruges indenfor geokemisk kortlægning med angivelse af anvendelsesmuligheder.

Programnavn	Udgiver	Seneste version, medio 2009	Form	Anvendelse	Kemiske visualiseringer
AquaChem	Schlumberger Water Services		licens	database og visualiseringsværktøj	Piper, Stiff, radial, scatter, frekvens histogram, lagkage, m.fl.
ChemBase	ALECTIA	2.0	licens	tolkningsværktøj til grundvandskemi	møllehjulplot
ChemGraph	Scientific Software Group		licens	database til grundvandsmonitoring	tidsserier, kontureringer, Stiff, m.fl.
ChemSketch	ACD/ChemSketch	12.0	freeware/betaling	tegning af kemiske stoffers struktur	
ChemStat	Starpoint Software	6.1	freeware	statistisk analyse for USEPA RCRA-programmet	
GeoGis 2005	Rambøll	2.1.11	årlig leje	database og visualiseringsværktøj	temakort, tidsserier
GeoScene	I-GIS		licens	tolkningsværktøj til geologi, m.m.	3-D visualisering af geologiske, geofysiske, hydrologiske & kemiske data
GW_Chart	USGS	1.19.0.0	Open source		Piperplots
JUPITER	GEUS		bruges på nettet	database til grundvands-, drikkevands-, råstof-, miljø- og geotekniske data	tidsserier
Kalk og kuldioxid for alle	Aktor Innovation	1	Open source	ligevægtsmodellering	
PHREEQC	USGS	2.15.0	Open source	modellering af speciering, kemiske reaktioner og 1-D transport	x/y-grafer
PHAST	USGS	1.5.1	Open source	modellering af flow, stoftransport og kemiske reaktioner	
PlotChem	Tecsoft, Inc. (Scientific Software Group)		freeware	visualiseringsværktøj	Piper, Stiff, radial, lagkage, histogrammer
R	R Development Core Team (OpenWetWare)	2.4.1	Open source	sprog for udvikling af statistik	
SAS	SAS		Licens	Databehandling og analyse, statistik	Tidsserier, statistik
SiteFX	EarthFX	4	Licens	Grupering af data, visualiseringsværktøj, statistik, tabeller, rapportopsætninger, beregninger af afledte parametre	Tidsserier, divserne geokemiske plots
Viewlog	EarthFX	3	Licens	Visualisering, analyse og modellering i 1D, 2D og 3D	

Bilag D: Litteratur

Appelo, C.A.J. & D., 2005. Postma. Geochemistry, Groundwater and Pollution. 2nd edition. A.A. Balkema Publishers, Leiden, The Netherlands.

Deutsch, W., 1997. Groundwater Geochemistry: Fundamentals and Applications to Contamination. CRC Press LLC, Boca Raton, Florida.

Freeze, A. & J. Cherry, 1979. Groundwater. Prentice Hall Inc., Upper Saddle River, New Jersey.

Karlby, H. & I. Sørensen, 2002. Vandforsyning, 2. udgave.

Ramsay, L., 2006. The Chemistry of Groundwater Systems. Noter til undervisning på ingeniørhøjskoler.



9 788778 712615

GEO-VEJLEDNING 6 **KEMISK GRUNDVANDSKORTLÆGNING**

Faglige vejledninger i forskellige aspekter af grundvandskortlægningen udarbejdes af GEUS i samarbejde med By- og Landskabsstyrelsens miljøcentre. Disse vejledninger udgives i en serie kaldet geo-vejledninger.

Denne geo-vejledning er den første egentlige håndbog i kemisk grundvandskortlægning i Danmark og kan anvendes bredt i forbindelse med alle typer af grundvandskemiske forsknings- og udviklingsprojekter.

Geo-vejledningens formål er primært at tjene som fagligt grundlag for den kemiske grundvandskortlægning, som miljøcentrene er ansvarlige for, under den nationale grundvandskortlægning.

Geo-vejledningen indeholder praktiske anbefalinger til udførelse af en kemisk grundvandskortlægning med hensyn til arbejdsgang, datahåndtering, vandindvinding, indsamling af nye data, præsentationer og tolkningsværktøjer.