

Metoder til estimering af undersøgelsesomfanget og til vurdering af usikkerheden af forureningsafgrænsningen

Christian Grøn, Jesper Overgaard,
Henrik Madsen, Lars Michael og Lizzi Andersen
DHI

Jens Strodl Andersen
SA-EnviroStat

Miljøstyrelsen vil, når lejligheden gives, offentliggøre rapporter og indlæg vedrørende forsknings- og udviklingsprojekter inden for miljøsektoren, finansieret af Miljøstyrelsens undersøgelsesbevilling.

Det skal bemærkes, at en sådan offentliggørelse ikke nødvendigvis betyder, at det pågældende indlæg giver udtryk for Miljøstyrelsens synspunkter.

Offentliggørelsen betyder imidlertid, at Miljøstyrelsen finder, at indholdet udgør et væsentligt indlæg i debatten omkring den danske miljøpolitik.

Indhold

FORORD	5
SAMMENFATNING OG KONKLUSIONER	7
SUMMARY AND CONCLUSIONS	9
1 INDLEDNING	11
2 KRAV TIL SIKKERHED I UNDERSØGELSER	13
2.1 ELEMENTER I UNDERSØGELSEUSIKKERHED	13
2.1.1 <i>Analyseusikkerhed</i>	13
2.1.2 <i>Prøvetagningsusikkerhed</i>	15
2.1.3 <i>Materialevariabilitet – rumlig variation</i>	17
2.1.4 <i>Materialevariabilitet – tidslig variation</i>	20
2.1.5 <i>Reduktion i usikkerhed</i>	21
2.1.6 <i>Beslutningsregler og beslutningssikkerhed</i>	23
2.1.7 <i>Undersøgelsers omfang</i>	24
2.1.8 <i>Forslag til beslutningsregel og -sikkerhed</i>	26
2.1.9 <i>Gradueret beslutningssikkerhed</i>	26
2.1.10 <i>Beslutningssikkerhed og beskyttelsesniveau</i>	27
3 JORD	29
3.1 RAMMER FOR UNDERSØGELSER AF JORDFORURENING	29
3.1.1 <i>Jordforurening over kriterier, indledende undersøgelser</i>	29
3.1.2 <i>Afgrænsning af jordforurening, supplerende undersøgelser</i>	30
3.1.3 <i>Kontrol af afværges gennemførelse, efterkontrol</i>	30
3.2 METODER TIL FORURENINGSAFGRÆNSNING FOR JORD	31
3.2.1 <i>Koncentrationsbeskrivelse i foruddefineret felt</i>	32
3.2.2 <i>Afgrænsning af felt og forureningsbeskrivelse</i>	33
3.2.3 <i>Effekt af prøveantal på geostatistisk vurdering</i>	36
3.2.4 <i>Geostatistisk vurdering med flere dybder</i>	37
3.2.5 <i>Undersøgelsesusikkerhed</i>	37
3.3 STRATEGI FOR BESKRIVELSE OG AFGRÆNSNING AF JORDFORURENING	38
3.3.1 <i>Identificer sandsynlige forureninger</i>	38
3.3.2 <i>Fastlæg fornøden beslutningssikkerhed</i>	39
3.3.3 <i>Afgræns prøvetagningsfelter</i>	39
3.3.4 <i>Udarbejd prøvetagningsdesign</i>	39
3.3.5 <i>Gennemfør Trin 1 af prøvetagning og analyse</i>	41
3.3.6 <i>Foretag geostatistisk analyse af opnåede resultater</i>	41
3.3.7 <i>Vurder forureningsafgrænsning og -omfang</i>	41
3.3.8 <i>Design af supplerende prøvetagning og analyse med geostatistisk værktøj</i>	42
3.3.9 <i>Gennemfør, analyser og vurder Trin 2</i>	42
3.3.10 <i>Gentag ud fra vurdering af omkostninger</i>	42
3.4 BESKRIVELSE AF GEOSTATISTISK VÆRKTØJ	42
3.5 EKSEMPLER PÅ ANVENDELSE AF DET GEOSTATISTISKE VÆRKTØJ	44
3.5.1 <i>Valg af prøvetagningspositioner</i>	44
3.5.2 <i>Opdeling i prøvetagningsfelter</i>	45
3.5.3 <i>Valg af prøvetagningsdybde</i>	47
3.5.4 <i>Udvidelse af undersøgelsesområde</i>	48
3.5.5 <i>Valg af supplerende prøvetagningspunkter</i>	49
3.5.6 <i>Accept af reduceret beslutningssikkerhed</i>	50

4	GRUNDTVAND	53
4.1	RAMMER FOR UNDERSØGELSER AF GRUNDTVANDSFORURENING	53
4.1.1	<i>Risiko for grundvandet, indledende undersøgelser</i>	53
4.1.2	<i>Afgrænsning af grundvandets forurening, supplerende undersøgelser</i>	54
4.1.3	<i>Monitering af forureningens udvikling, efterkontrol</i>	54
4.2	FORURENINGSAFGRÆNSNING FOR GRUNDTVAND	55
4.2.1	<i>Fuldstændig forureningsafgrænsning</i>	55
4.2.2	<i>Beregning af forureningskoncentration</i>	56
4.2.3	<i>Beregning af forureningskoncentration med tilbageholdelse</i>	58
4.2.4	<i>Beregning af forureningskoncentration med nedbrydning</i>	59
4.2.5	<i>Trinvis, usikkerhedsbaseret forureningsafgrænsning</i>	60
4.2.6	<i>"Usikkerhedskontur" uden usikkerhed</i>	61
4.2.7	<i>Geologisk/hydrogeologisk baseret usikkerhed</i>	62
4.2.8	<i>Kildebaseret usikkerhed</i>	63
4.2.9	<i>Beregningsbaseret usikkerhed</i>	63
4.2.10	<i>Kombineret usikkerhed</i>	65
4.2.11	<i>Usikkerhedsbegrænsning ved supplerende måling af hydrogeologiske/geologiske parametre</i>	67
4.2.12	<i>Usikkerhedsbegrænsning ved supplerende prøvetagning</i>	67
4.2.13	<i>Supplerende afgrænsning ved brug af flere tærskelværdier</i>	69
4.3	STRATEGI FOR BESKRIVELSE OG AFGRÆNSNING AF GRUNDTVANDSFORURENING	70
4.3.1	<i>Indhent grunddata</i>	71
4.3.2	<i>Fastlæg fornøden beslutningssikkerhed</i>	72
4.3.3	<i>Vælg tærskelparametre og -tærskelværdi</i>	72
4.3.4	<i>Foretag 3D-vurdering af grunddata</i>	73
4.3.5	<i>Udarbejd undersøgelsesdesign</i>	73
4.3.6	<i>Gennemfør Trin 1 af prøvetagning og analyse</i>	74
4.3.7	<i>Foretag 3D-vurdering af opnåede resultater</i>	74
4.3.8	<i>Vurder forureningsafgrænsning og -omfang</i>	74
4.3.9	<i>Design af supplerende undersøgelse</i>	75
4.3.10	<i>Gennemfør, analyser og vurder Trin 2</i>	76
4.3.11	<i>Gentag ud fra vurdering af omkostninger</i>	76
4.4	BESKRIVELSE AF 3D-VÆRKTØJET	76
4.5	EKSEMPLER PÅ ANVENDELSE AF 3D-VÆRKTØJET	77
4.5.1	<i>Beskrivelse af forureningsafgrænsning ud fra modellering</i>	78
4.5.2	<i>Afbildning af koncentrationer for forurenede grundvand</i>	78
4.5.3	<i>Afbildning af sandsynlighedskonturer for forureninger i et magasin</i>	81
4.5.4	<i>Effekt af supplerende undersøgelser</i>	82
4.5.5	<i>Effekt af parameterkorrektion</i>	83
4.5.6	<i>Effekt af korrektion af parameterusikkerhed</i>	84
4.5.7	<i>Effekt af ekstra målepunkt</i>	85
4.5.8	<i>Effekt af stedspecifikke hydrogeologiske/geologiske parameterværdier</i>	86
5	PORELUFT	91
6	MÅLING AF UNDERSØGELSE SUSIKKERHED	95
7	RAPPORTERING AF RESULTATER OG RISIKO-VURDERING MED USIKKERHED	99
8	REFERENCER	101
	Bilag A Data fra eksempler benyttet med geostatistisk værktøj, jordforurening	
	Bilag B Vejledning for 3D-GV	
	Bilag C Vejledning for MBGeoStat	

Forord

Projektet ***Metoder til estimering af undersøgelsesomfanget og til vurdering af usikkerheden af forureningsafgrænsningen*** er iværksat under Miljøstyrelsens teknologiprogram for jord- og grundvandsforurening. Projektets formål har været at udvikle metoder og værktøjer til planlægning og vurdering af afgrænsningsundersøgelser på forurenede grunde med inddragelse af undersøgelseernes usikkerhed.

Projekter tager udgangspunkt i eksisterende dansk praksis for kontrol med overholdelse af kriterier og for undersøgelse af forurenede grunde i offentligt regi. Projektet har med det udgangspunkt belyst den nuværende beslutningssikkerhed og foreslået supplerende arbejdsmetoder til at forbedre inddragelse af beslutningssikkerhed i kriterieoverholdelse, samt i undersøgelsesplanlægning og -rapportering. I projektet er udviklet to softwareprodukter (værktøjer) til understøttelse af sandsynlighedsbaseret forureningsafgrænsning for henholdsvis jord og grundvand. Foruden denne rapport er udarbejdet brugervejledninger til de to softwareprodukter i form af to tekniske notater.

Projektet er udført af DHI (DHI) i samarbejde med JSA-Envirostat (EnviroStat):

Christian Grøn, Jesper Overgaard, Henrik Madsen, Lars Michael og
Lizzi Andersen, DHI
Jens Strodl Andersen, JSA-EnviroStat

Projektet har været fulgt af Miljøstyrelsen ved:

Kim Dahlstrøm
Arne Rokkjær
Ole Kiilerich

Data fra feltundersøgelser og modelsimuleringer har velvilligst været stillet til rådighed af:

Torben Sonnenborg, Peter Engesgaard og Karsten Høgh Jensen,
Geologisk Institut, Københavns Universitet
Annette Grarup, Skude & Jacobsen A/S
Per Loll, Dansk Miljørådgivning A/S
Jussi Laiho, AEL
Mads Georg Møller, Rambøll
Tage V. Bote og Torben Højer Jørgensen, COWI

De udviklede værktøjer betjener sig i vid udstrækning af farveplot. Derfor læses rapporten bedst i farveprint eller på skærmen.

Sammenfatning og konklusioner

Afgrænsning af forurening og beskrivelse af forureningens koncentrationer og fordeling er en central del af videregående undersøgelser af forurenede grunde. Med udgangspunkt i danske regler og praksis for videregående undersøgelser beskrives i projektet afgrænsning af forurening ud fra en sandsynlighedsbaseret undersøgelsesstrategi for jord og grundvand.

For undersøgelse af forurenede jord er udviklet et geostatistisk værktøj, der tillader udnyttelse af avanceret statistisk analyse til beskrivelse af sandsynlighed for overholdelse af kriterier, uden nødvendigvis at have indgående geostatistisk viden.

Ved hjælp af det geostatistiske værktøj beskrives forureningens fordeling horisontalt, eventuelt i flere dybder, baseret på målte forureningskoncentrationer. Konturer for overholdelse af kriterier med valgt sikkerhed, for eksempel 65% eller 95%, afgrænser forurenede dele af den undersøgte grund. Er der behov for nærmere afgrænsning, designes yderligere prøvetagning, hvor dette giver den største effekt på afgrænsning, og forureningsfordeling og konturer for kriterieoverholdelse genoptegnes. Med eksempler beskrives valg af prøvetagningspositioner, opdeling i prøvetagningsfelter, valg af prøvetagningsdybder, afgrænsning af undersøgelsesområde og effekt af valgt beslutningssikkerhed.

For undersøgelser af forurenede grundvand er udviklet et modelværktøj baseret på en analytisk 3-dimensional transportmodel suppleret med en Monte Carlo baseret beregning af usikkerhed på transportbeskrivelsen. 3D-værktøjet giver mulighed for at gennemføre sandsynlighedsbaseret ud fra et datagrundlag svarende til en indledende undersøgelse, som så derefter gradvist udbygges.

Ved hjælp af 3D-værktøjet beskrives forureningens transport og udbredelse horisontalt og vertikalt. Konturer for overholdelse af kriterier benyttes til at afgrænse det forurenede grundvand, og den fremtidige transport kan beregnes. Også for grundvand vurderes behovet for yderligere afgrænsning, som kan designes ved hjælp af 3D-værktøjet. Med eksempler er vist afgrænsning baseret på data fra indledende undersøgelser alene, fordelene ved at forbedre det geologiske og hydrogeologiske grundlag og effekt af supplerende måleresultater.

For poreluft beskrives en beregning af undersøgelsesusikkerhed baseret på flere målinger over tid i flere målepunkter.

En enkel metode til måling af undersøgelsesusikkerheden baseret på gentagelsesmetoden er beskrevet, hvor usikkerhed på analyser, prøvetagning og materialets variabilitet kan beskrives og indgå i vurderingen af den samlede undersøgelsesusikkerhed.

Den sandsynlighedsbaserede undersøgelsesstrategi tilskynder til afvejning af yderligere undersøgelser med henblik på bedre forureningsafgrænsning overfor omkostninger ved omfattende afværgeforanstaltninger. Forslag til rapportering af undersøgelsesresultater med tilknyttet usikkerhed er præsenteret, som understøtter dette.

Summary and conclusions

In contaminated site investigations, accurate and precise delineation and description of contaminated sections are essential. In this project, strategies, methods and tools for probability based delineation of contaminated areas and plumes have been developed. The development has been based upon the Danish regulations, guidelines and traditions for contaminated site investigations.

For contaminated soil investigations, a spreadsheet tool has been developed incorporating the statistical software packet R. The tool allows for advanced geostatistical calculations, even for users without profound geostatistical knowledge.

Using the tool, contaminant concentrations are predicted over the study site allowing for separate descriptions in one or more depths. The areas with concentrations less than a limit value can be delineated as contours of e.g. 65% or 95% probability. Additional measurements can be planned, simulating the effects on the concentration profiles and probability contours. Examples show the effects of different sampling depths, use of decision units, definition of study boundaries and chosen probability.

For contaminated groundwater studies, an analytical solution for three dimensional solute transport in aquifers, ANALGWST, has been implemented into a spreadsheet and overlaid with a Monte Carlo based routine for calculating probabilities of not exceeding specified criteria. The 3D-tool allows for calculation of groundwater concentrations in three dimensions. Examples show calculations based upon simple source estimates and generic geological and hydrogeological information only, the effects of improving the calculations with supporting site specific data, as well as the improvements obtained with additional measurements.

For soil air, calculation of investigation uncertainty based upon measurements of soil air concentrations in several positions and at several occasions for each position is described.

Estimation of measurement uncertainty and variability due to inhomogeneity using the duplicate design and range statistics is described, and the use of the resulting uncertainties in decisions is suggested.

The suggested probabilistic investigation strategies support fitness for purpose considerations including costs and benefits from intensified investigations in relation to those from extensive site cleanup and remediation. A format for reporting including investigation uncertainties is suggested that further supports this feature.

1 Indledning

Undersøgelser af forurenede grunde i offentligt regi udføres i Danmark efter rammer fastlagt primært i vejledning fra Miljøstyrelsen /1/ om oprydning på forurenede grunde med tilhørende selvstændige branchevejledninger /2-5/, i vejledningerne om kortlægning og rådgivning /6;7/, samt i en vejledning om prøvetagning og analyse af jord /8/. I forbindelse med undtagelse eller inddragelse af områder af områdeklassificering kan indgå vurdering af jords områdevis forureningsgrad ud fra jordforureningsdata /9/. Vejledningerne angiver for eksempel undersøgelsesprincipper, kvalitetskrav (jord, grundvand, luft), metoder til risikovurdering samt administrative regler og forslag til indsats/oprydning/klassificering. I anvendelsen af vejledningerne er opstået et behov for en præcisering af en undersøgelses omfang og sikkerhed, samt for metoder til vurdering af sikkerheden i forhold til undersøgelsens formål. Dette projekt har derfor til formål at give forslag til:

- Omfang af undersøgelser og til sikkerhed i dækning i forhold til undersøgelsens formål
- Metoder til kvantitativt at beskrive (planlagte eller gennemførte) undersøgelsers sikkerhed
- Vurdering af undersøgelsers omfang i forhold til de opstillede krav

Forslagene kan anvendes for jord og grundvand, både ved mindre og ved større forurenede grunde og områder. For poreluft har metoderne vist sig mindre velegnede, se Kapitel 5.

Undersøgelser på forurenede grunde omfatter tre faser /1-5;7/:

- Kortlægning frem til vidensniveau 1, hvor den potentielle forurening på en grund beskrives ud fra generelle og historiske oplysninger men uden egentlige undersøgelser (kan grunden være forurenet?)
- Kortlægning frem til vidensniveau 2, hvor en grund kortlagt som muligt forurenet på vidensniveau 1 gennemgår nærmere historiske og tekniske undersøgelser til eventuel bekræftelse og beskrivelse af forureningen (er grunden forurenet, og udgør forureningen en risiko?)
- Videregående undersøgelser, hvor forureningen afgrænses nærmere (hvordan og hvor meget skal der ryddes op?)

I niveau 2 kortlægning af jordforureningen identificeres ud fra den historiske undersøgelse af jord kendte kilder og områder med forventet høj koncentration af forurening ("hot spots"), og der udføres tillige undersøgelser af forureningen af jord, poreluft og/eller grundvand, afhængig af forureningen og forholdene på grunden.

Forslag og metoder udarbejdet i dette projekt for undersøgelse af jordforurening er rettet imod både vidensniveau 2 undersøgelser og ved videregående undersøgelser.

Forslag og metoder udarbejdet i dette projekt for undersøgelse af grundvandsforurening er rettet imod forureningsafgrænsning og er dermed mest anvendelige ved videregående undersøgelser. Afklaring af, om der på en grund er risiko for grundvandsforurening i niveau 2 undersøgelser, udføres

efter principperne beskrevet i den foreliggende vejledning /1/ og JAGG regnearket /10/.

Anvendelse af forslag og metoder udarbejdet i dette projekt på data fra undersøgelse af poreluftforurening har vist, at de ikke er velegnede til undersøgelser af poreluft. Der er derfor givet supplerende forslag til beregning af undersøgelsesusikkerhed for poreluft i Kapitel 5.

Forslag og metoder er udarbejdet med udgangspunkt i danske regler og vejledninger vedrørende gennemførelse af undersøgelser af forurenede grunde og rettet imod her at benytte en usikkerhedsbaseret tilgang. Det har således ikke været hensigten at forslå alternative strategier eller fremgangsmåder for for eksempel prøvetagning, risikovurdering eller andre dele af dansk undersøgelsespraksis.

Betegnelsen forurenede eller ikke forurenede benyttes i projektet om materialer, hvor koncentrationen af en forurening overskrider, respektive ikke overskrider det fastlagte kriterium for kortlægning og/eller indsats, altså kvalitetskriteriet eller afskæringskriteriet.

2 Krav til sikkerhed i undersøgelser

Første trin i en undersøgelse af forureninger er oftest at afgøre, om et materiale er forurenet. Forurenet betyder i denne sammenhæng i reglen forurenet over de kriterier, der af myndighederne er sat for forurening med acceptabel risiko /11/. Selvom dette første trin lyder simpelt, kompliceres det af, at (stort set) enhver undersøgelse er behæftet med en usikkerhed, som kan påvirke beslutningen forurenet eller ikke forurenet.

2.1 Elementer i undersøgelsesusikkerhed

I sin simpleste form afgøres dette ved udtagning af én prøve repræsenterende materialet, analyse for den pågældende forurenings koncentration og sammenligning af resultat med kriteriet. Hvis prøven virkelig er repræsentativ (enhver mulig udtaget prøve er ens) og analysen fuldstændig sikker (uanset antal analyser af prøven fås samme resultat), da kan det med 100% sikkerhed siges, om et materiales indhold af forureningen (koncentrationen, her kaldet x , typisk i mg/kg jord, $\mu\text{g/L}$ grundvand eller mg/m^3 luft) overskrider et kriterium (her kaldet K):

$x > K$, 100% sikkerhed

2.1.1 Analyseusikkerhed

Desværre er analyser sjældent fuldstændigt sikre (gentagne analyser giver lidt forskellige resultater).

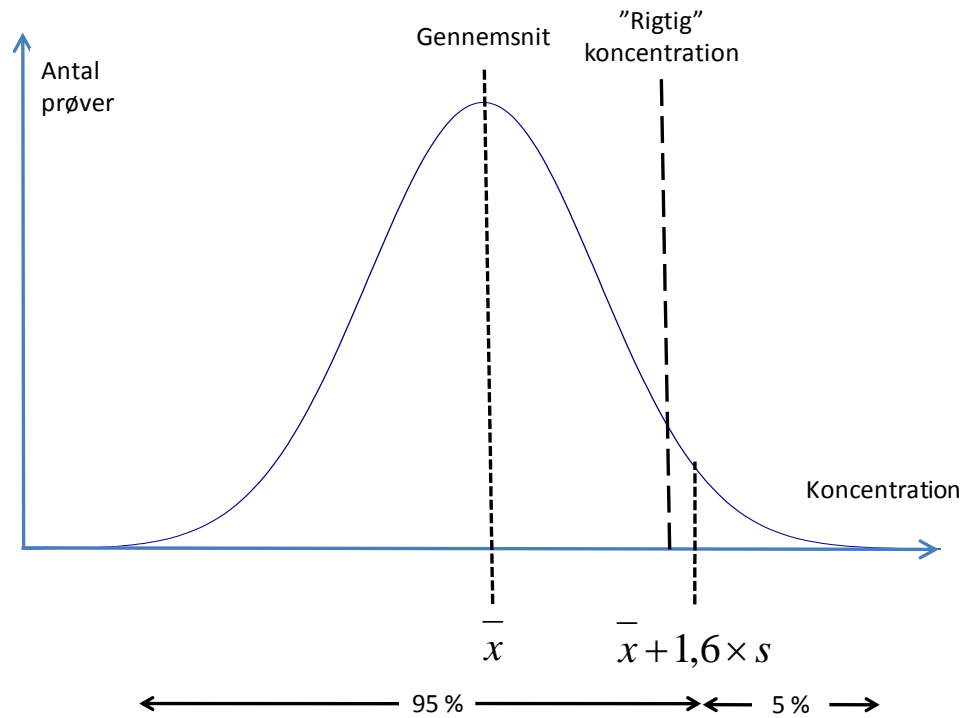
Almindeligvis fordeler gentagne analyseresultater sig om gennemsnitsværdien, her kaldet \bar{x} , som vist i Figur 1, efter en såkaldt normalfordeling. Gennemsnittet af resultaterne vil normalt ikke falde sammen med den "rigtige" værdi (den koncentration af forurening, der reelt er i materialet) og kan være både større og mindre end denne. Hvor langt både enkelte analyseresultater og gennemsnit kan falde fra den rigtige koncentration på grund af tilfældig analysevariation, afhænger af usikkerheden¹ på analyseresultaterne. Usikkerheden på analyseresultaterne angives ved standardafvigelsen, her kaldet s . Jo større standardafvigelsen er, jo mere usikre og jo mindre sikre er resultaterne, og desto længere kan et analyseresultat ligge fra den rigtige koncentration på grund af tilfældigheder. Omkring 5% af analyseresultaterne vil ligge mere end 1,6 gange standardafvigelsen fra gennemsnittet². På Figur 1 er gennemsnittet af analyseresultater under den rigtige koncentration, men enkeltresultater vil alligevel for lidt mere end 5%'s vedkommende ligge over den rigtige værdi.

Det skal bemærkes, at data for naturlige systemer, som for eksempel forurenede grunde, ofte ikke følger en normalfordeling. I databehandling kan det derfor være nødvendigt at arbejde med transformerede data, for eksempel

¹ I denne sammenhæng er kun den tilfældige variation inddraget i usikkerhedsbegrebet for at forenkle fremstilling. Mere korrekt skulle både den tilfældige og den systematiske variation inddrages.

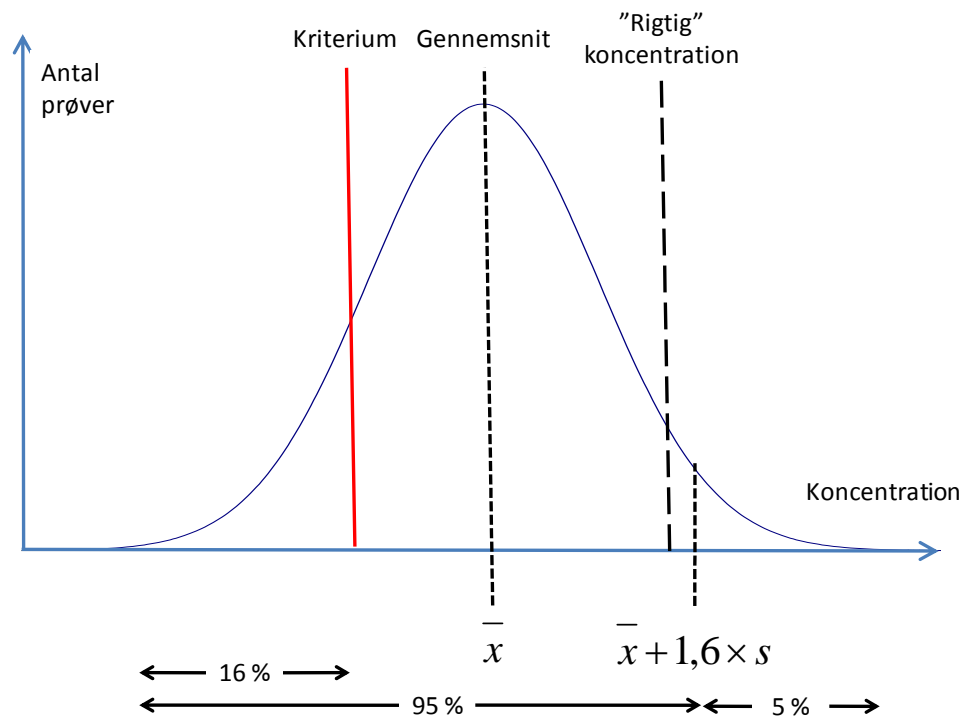
² Der er her taget udgangspunkt i en én-sidet test af, om et analyseresultat er under eller over en bestemt værdi.

logaritmerede data, som oftest er normalfordelte. I dette kapitel er usikkerhed generelt beskrevet ud fra normalfordelte data for ikke at komplicere beskrivelserne unødigt.



Figur 1
Normalfordeling af analyseresultater.

For beslutningen forurennet eller ikke forurennet betyder denne uundgåelige usikkerhed, at der er risiko for at træffe en forkert beslutning. I Figur 2 er indtegnet kriteriet for det materiale, hvis rigtige værdi blev vist på Figur 1.



Figur 2
Analyseresultater i forhold til kriterium.

De fleste analyseresultater vil ligge over kriteriet, ligesom både gennemsnitskoncentrationen og den rigtige koncentration. Ikke desto mindre vil cirka 16% af enkeltresultater være under kriteriet. Der er altså en risiko på omkring 16% for at tage en forkert beslutning, hvis materialet kun vurderes ud fra, om et enkelt analyseresultat overskrider kriteriet.

I princippet kan vi ikke vide, hvor stor risikoen for at tage en forkert beslutning er, fordi standardafvigelsen ikke kendes. Risikoen er tit tæt på 0%, når analyseresultatet ligger langt fra kriteriet, og standardafvigelsen er lille, men kan være op til 50% af på grund af denne tilfældige variation, når analyseresultatet ligger tæt på kriteriet og/eller standardafvigelsen er stor.

For at nå til en rigtig beslutning forurenede eller ikke forurenede er der derfor stillet krav til analysemetode og til højeste usikkerhed på analyseresultaterne, for eksempel i /8/ og /12/. Ved kontrol af grundvand for forurening med udvalgte metaller og organiske forureninger kræves for eksempel, at standardafvigelsen ikke er over 5% af analyseresultatet /12/. Figur 1 viser, at 95% af resultaterne ligger under gennemsnittet + 1,6 gange standardafvigelsen. Vi ville altså sikre os med kravet om højst 5% relativ standardafvigelse, at 95% af resultaterne højst er 8% større (eller mindre) end gennemsnittet (1,6 gange 5% standardafvigelse), hvis vi inddrog usikkerheden i vurderingen af resultat over for kriterium. Sagt på en anden måde, så kunne vi med 95% sikkerhed sige, at vi ikke tager mere end 8% fejl i beslutningen forurenede eller ikke forurenede:

$$x \leq K + 8\%, 95\% \text{ sikkerhed}$$

Fremgangsmåden med at stille krav til den højst acceptable analyseusikkerhed benyttes også til monitorering og kontrol under EU's Vandrammedirektiv og datterdirektiver, det vil sige også for grundvandsdirektivet, men her er kravet en relativ standardafvigelse på ikke over 25% /13/.

2.1.2 Prøvetagningsusikkerhed

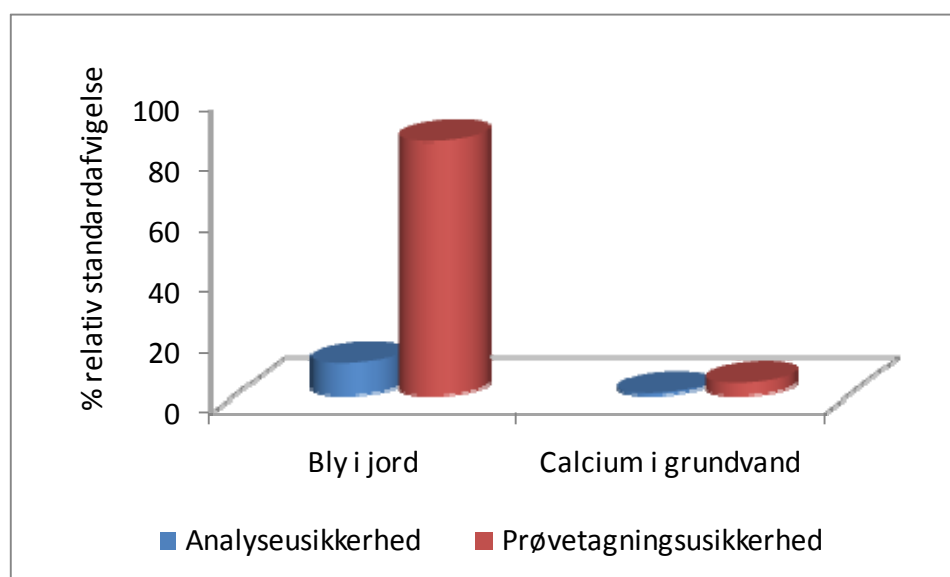
Desværre er prøver sjældent fuldstændigt repræsentative (to prøver taget af samme materiale er ikke ens), fordi materialet ikke er helt ensartet, se Afsnit 2.1.3. Almindeligvis fordeler prøvernes egenskaber sig om gennemsnitsværdien for prøverne ligesom for analyseresultaterne, se Figur 1, og igen kan vi bruge standardafvigelsen til at beskrive prøvetagningens usikkerhed, vi kalder den s_p . Usikkerheden på den koncentration, som skal beskrive materialets indhold af forurening, kommer til at afhænge af både prøvetagningsusikkerheden, s_p , og analyseusikkerheden, som vi nu kalder s_a :

$$s = \sqrt{s_a^2 + s_p^2}$$

Sikkerheden i beslutningen forurenede eller ikke forurenede afhænger altså både af analyseusikkerheden og af prøvetagningsusikkerheden. Analyseusikkerheden er i reglen kendt, mens prøvetagningsusikkerheden sjældent er det. I mange tilfælde er prøvetagningen mere usikker end analysen, mere udtalt for jord end for grundvand, se Figur 3 for eksempler.

For at nå frem til den rigtige beslutning forurenede eller ikke forurenede er der stillet krav om, at prøvetagning skal være repræsentativ /12/, men kravet er ikke specificeret. For grundvand stilles krav om at følge en standardmetode /16/, og det anbefales at følge en detaljeret dansk prøvetagningsmetode

udviklet til grundvandsovervågning /17/, ligesom der gives råd om god prøvetagning af jord, grundvand og/eller poreluft i /1/ og /8/.



Figur 3
Eksempler på analyse- og prøvetagningsusikkerhed, modificeret efter /14;15/.

Sagt på en anden måde, er kravene til prøvetagning ikke formuleret i form af kvantitative krav til repræsentativitet og dermed ikke i forhold til den samlede sikkerhed af beslutningen forurenede eller ikke forurenede.

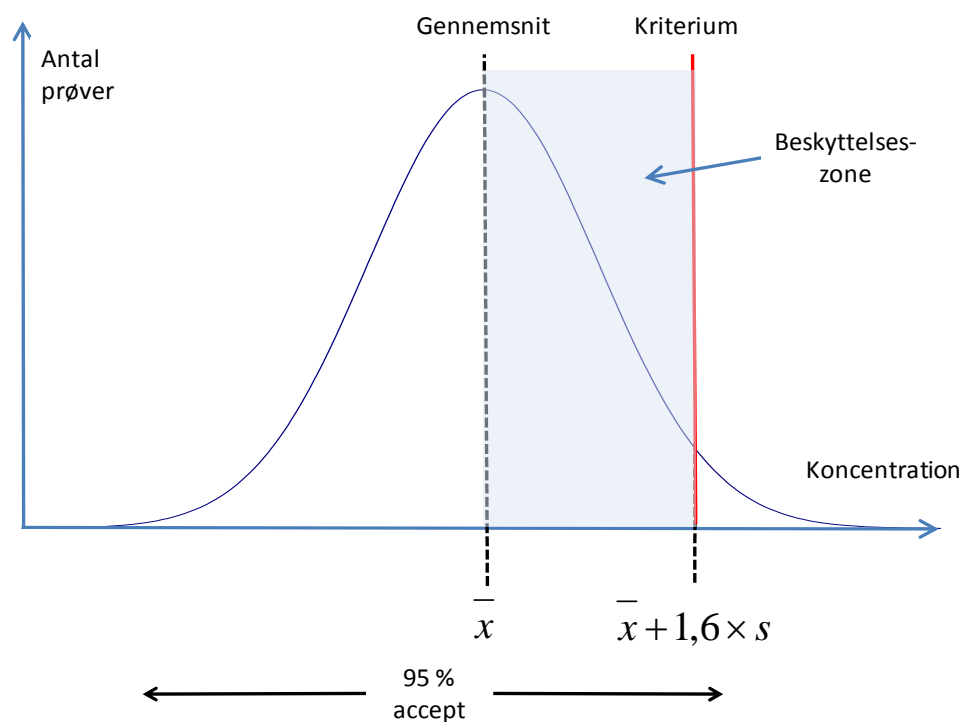
Indenfor de senere år er der udviklet enkle metoder til måling af prøvetagningsmetoders usikkerhed /14;15;18-20/, men disse er endnu ikke almindeligt anvendte, se også Kapitel 6.

På andre områder er prøvetagnings- og analysesikkerheden inddraget i beslutningen på den måde, at den samlede usikkerhed på koncentrationen af en forurening i materialet inddrages i beslutningen. Dette er beskrevet generelt i en vejledning udarbejdet for den Europæiske sammenslutning af laboratorier (EURACHEM) /21/. I vejledningen skelnes imellem, om beslutningen er "materialet indeholder med sikkerhed ikke forureningen over en bestemt værdi" (beskyttelse af mennesker og miljø) eller beslutningen "materialet indeholder med sikkerhed forureningen over en bestemt værdi" (beskyttelse af grundejer). Denne skelnen afspejler altså, på hvilken "side" usikkerheden skal inddrages. I Figur 4 er fremgangsmåden vist i den version, der normalt vil være foretrukket for beslutninger indenfor miljøområdet: beskyttelse af mennesker og miljø.

Beslutningen er her, at et analyseresultat med 95% sikkerhed skal være under kriteriet:

$$x < K - 1,6 \times s, 95\% \text{ sikkerhed}$$

Fremgangsmåden betyder, at resultater skal være under kriteriet minus beskyttelseszonens bredde, for at de kan give en beslutning forurenede eller ikke forurenede med den ønskede sikkerhed. Fremgangsmåden kræver også, at den samlede usikkerhed på analyseresultater kendes eller med rimelighed antages.



Figur 4
Beslutning om overholdelse af kriterium med inddragelse af usikkerhed, modificeret efter /21/.

Samme statistiske metode benyttes i den internationale standard for, hvornår resultater overholder grænseværdier /22/. Fremgangsmåden er formuleret således, at det gennemsnitlige analyseresultat tillagt en usikkerhed svarende til beskyttelseszonen beskrevet ovenfor, eventuelt formuleret som et konfidensinterval, skal være mindre end kriteriet, hvis materialet skal vurderes som ikke forurenet.

I kontrol af fødevarer anbefales det at basere beslutningen forurenet eller ikke forurenet på frekvensen af analyseresultater over et kriterium, snarere end på (gennemsnits-) koncentrationers overskridelse af kriteriet. Fremgangsmåden benytter såkaldte operationskarakteristikkurver (OC kurver), som afbilder sikkerhed i beslutning imod frekvensen af overskridelser, se for eksempel /23/. Både den samlede usikkerhed og antallet af prøver af materialet inddrages i beslutning forurenet eller ikke forurenet, ligesom både beskyttelse af forbruger og af producent kan benyttes som udgangspunkt. Fremgangsmåden er baseret på en statistisk vurdering af beslutningssikkerheden.

Fremgangsmåden med beskyttelseszone og fremgangsmåden baseret på frekvensen af analyseresultater over et kriterium er baseret på samme statistiske grundlag og på hensynet til at nå en acceptabel sikkerhed for beslutningen forurenet eller ikke forurenet.

2.1.3 Materialevariabilitet – rumlig variation

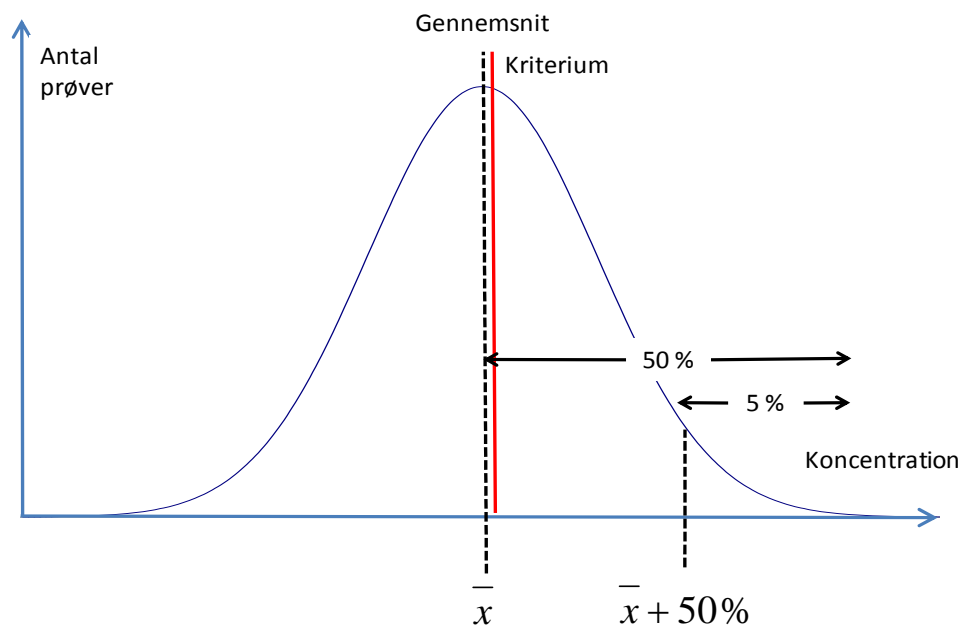
Desværre er materialer sjældent så ensartede, at selv repræsentative prøver fra forskellige positioner i samme materiale giver samme resultat. Det skyldes, at materialets sammensætning varierer, både på lille og på stor skala. Et eksempel på variationen på lille skala er fordelingen af en forurening i en afgrænset mængde jord med samme forureningshistorie (kilde, tidsforløb, påvirkninger), mens variation i stor skala for eksempel kan være fordeling af diffus forurening med dybde i overfladejord eller fordeling af forurening i hot

spots over et forurennet område. Den usikkerhed, som skyldes materialets variation på lille skala, indgår normalt i prøvetagningsusikkerheden, og effekten på beslutningssikkerheden håndteres som beskrevet i Afsnit 2.1.2.

For et materiale med variation på stor skala vil usikkerheden på en gennemsnitskoncentration typisk blive stor, idet denne variation, s_v , indgår i den samlede usikkerhed på resultaterne, s , sammen med analyseusikkerheden, s_a , og prøvetagningsusikkerheden, s_p :

$$s = \sqrt{s_a^2 + s_p^2 + s_v^2}$$

Beslutningen forurennet eller ikke forurennet tages for forureninger med kriterier fastsat ud fra kroniske effekter ved sammenligning af gennemsnit for analyseresultater med kriteriet /1/. Der er altså ikke eksplicit stillet krav til den samlede sikkerhed i beslutningen forurennet ikke forurennet i forbindelse med undersøgelser af forurenede grunde, men kravet om ikke at vurdere forurenede og uforurenede områder sammen /1/ reducerer risikoen for en meget stor samlet usikkerhed på beslutningsgrundlaget på grund af variation i stor skala. For forureninger med kriterier baserede på akutte effekter gælder foruden, at gennemsnittet skal være under kriteriet, også, at højst 10% af de enkelte analyseresultater må ligge over kriteriet, samt at den højeste koncentration for disse ikke må være mere end 50% over kriteriet /1/. Dette er implicit et krav til sikkerheden af beslutningen forurennet eller ikke forurennet, idet begrænsningen på frekvens og størrelse af overskridelser af kriteriet i realiteten er en begrænsning af variabiliteten på stor skala, s_v . Figur 5 viser, at for en realistisk situation med en samlet usikkerhed på 50% og tre analyseresultater/prøver vil 50% af resultaterne ligge over kriteriet og 5% mere end 50% over kriteriet, selvom gennemsnittet netop er under kriteriet. I denne situation betyder begrænsningen på frekvens og størrelse af overskridelser af kriteriet altså, at der implicit er indlagt en beskyttelseszone, se Figur 4, på 50% af kriteriet.



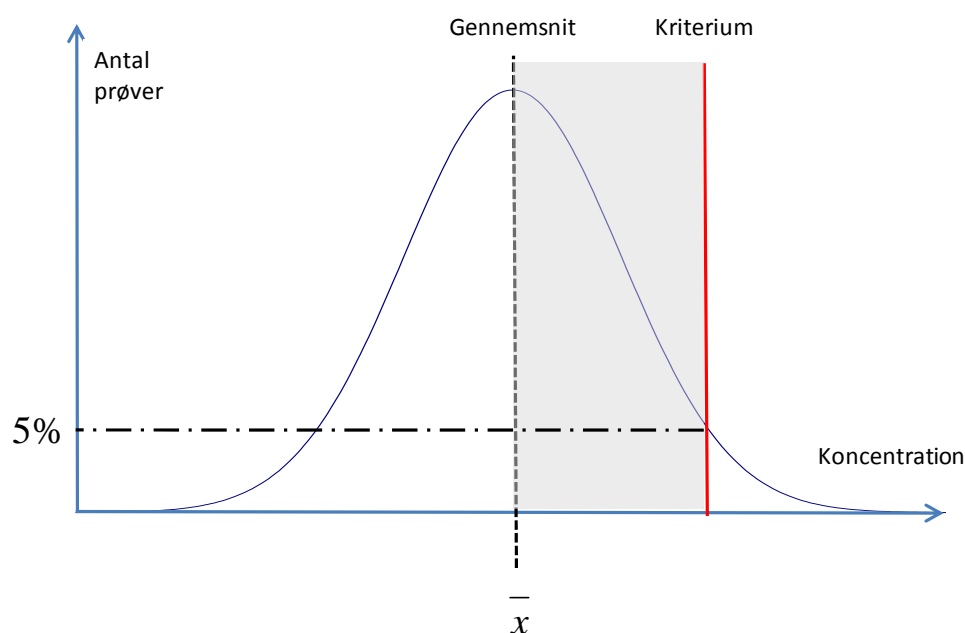
Figur 5
Hyppighed af overskridelser af kriterium og kriterium + 50% for gennemsnit ud fra tre analyseresultater og samlet usikkerhed på 50% af gennemsnit.

Beslutningen er altså her, at et gennemsnitligt analyseresultat, \bar{x} , skal være under kriteriet, K, med en sikkerhed der afhænger af afstand imellem gennemsnit og kriterium, samt af den samlede usikkerhed, s:

$$\bar{x} < K, \text{ variabel sikkerhed}$$

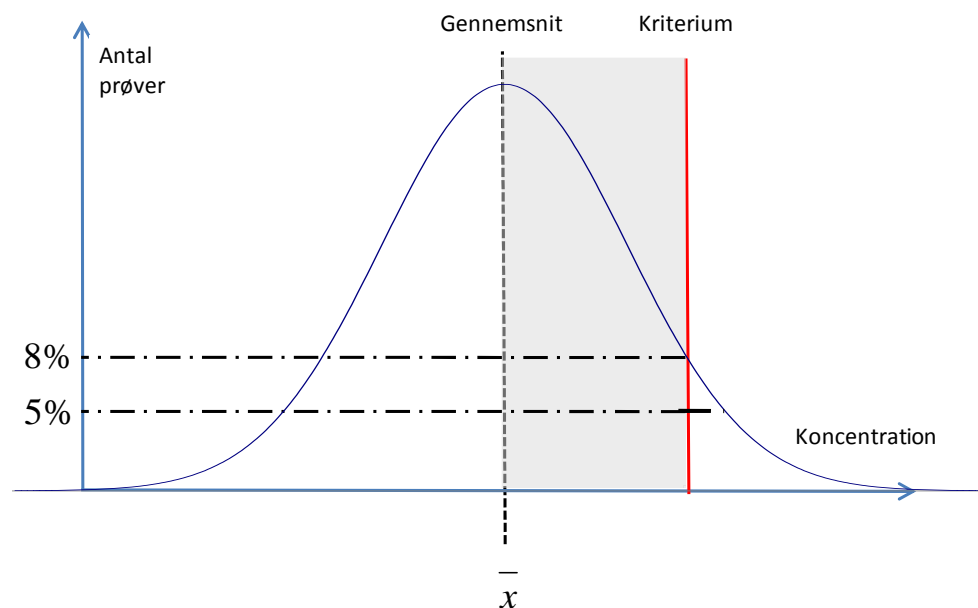
Fremgangsmåden betyder, at sikkerheden i beslutningen forurenede eller ikke forurenede for et materiale er 50% for gennemsnit tæt på kriteriet, men også at en væsentlig øgning af beslutningssikkerheden i praksis ikke er mulig. Der er altså en grå zone, hvor en sikker beslutning ikke er mulig. Sagt på en anden måde, vil områder med gennemsnit under – men tæt på kriteriet – med stor sandsynlighed alligevel blive vurderet som forurenede på grund af begrænsningen på frekvens og størrelse af overskridelser af kriteriet.

For undersøgelser af forurenede grunde har den amerikanske miljøstyrelse (US EPA, United States Environmental Protection Agency) anvist en fremgangsmåde baseret på en højest accepteret risiko for at bedømme et materiale forkert /24/. I metoden vælges et koncentrationsinterval under kriteriet, hvor det er acceptabelt med en lav sikkerhed i beslutning, fordi risikoen ved at tage fejl er lille. Man kan sige, at der foretages et fagligt baseret valg af den acceptable bredde af den grå zone, se Figur 6. Derefter besluttes det, igen ud fra risikoen ved at tage fejl, hvor sikker beslutningen forurenede eller ikke forurenede skal være under den grå zone. I Figur 6 er vist, hvordan et krav om højst 5% risiko for forkert beslutning under den grå zone netop opfyldes for et delområde med et gennemsnit svarende til undergrænsen for den grå zone og den angivne samlede usikkerhed (standardafvigelse).



Figur 6
Sikkerhed i beslutning og grå zone af lav sikkerhed ved undersøgelser af forurenede grunde som foreskrevet af US EPA /24/.

Er undersøgelsens resultat mindre sikkert – se den bredere fordeling i Figur 7 – vil der for eksempel være 8% risiko for forkert beslutning, når gennemsnittet svarer til undergrænsen for den grå zone. I den situation skal undersøgelsens sikkerhed forbedres.



Figur 7
Sikkerhed i beslutning og grå zone af lav sikkerhed ved undersøgelser af forurenede grunde som foreskrevet af US EPA /24/, mindre sikker undersøgelse.

Ligesom der her er beskrevet et krav til højst acceptable risiko for forkert beslutning under den grå zone (vurdere et uforurennet område som forurennet), fastlægges også en højst acceptabel (og i reglen lavere) acceptabel risiko for forkert beslutning over den grå zone (vurdere et forurennet område som uforurennet).

Fremgangsmåden betyder, at resultater i den grå zone vurderes som ikke forurenede, hvis usikkerheden er så lille, at kravet til højeste risiko for fejl udenfor den grå zone er opfyldt.

2.1.4 Materialevariabilitet – tidlig variation

Desværre er materialers sammensætning sjældent så konstant over tid, at repræsentative prøver udtaget af et materiale uden variabilitet på stor skala på forskellige tidspunkter er ens. Betydningen af variation over tid for beslutningen forurennet eller ikke forurennet afhænger foruden af variationens størrelse også af variationshastigheden.

Forurening af jord ændres langsomt med tiden, for eksempel ved udvaskning, fordampning, nedbrydning og binding, men som hovedregel relativt langsomt, således at ændringer over måneder til år er betydende. Forurening af grundvand ændres ligeledes med tiden ved de samme mekanismer som for forurennet jord, men tillige også ved transport og ved ændringer i transport med grundvandet. Ændringer over dage til år kan være betydende. Forurening af poreluft ændres med tiden ved samme mekanismer som for jord og grundvand, men tillige også ved ændringer i vejrforhold, herunder særligt atmosfæretrykket. Ændringer over timer kan være betydende. Foretages målinger af udeluft bliver vejrforhold særligt vigtige og variationer over minutter kan være betydende.

Beskrivelsen af en forurennet grounds forureningstilstand gennemføres typisk over så kort tid (dage), at den tidlige variation ikke giver anledning til ekstra usikkerhed i forhold til beslutningen forurennet eller ikke forurennet, når der er tale om jord og grundvand. For poreluft kan usikkerhedsbidraget over timer være betydende, se Kapitel 5.

For et materiale med variation på stor skala og tidslig variation vil usikkerheden på en gennemsnitskoncentration typisk blive meget stor, idet denne variation, s_v , kan indgå i den samlede usikkerhed på resultaterne, s , sammen med analyseusikkerheden, s_a , prøvetagningsusikkerheden, s_p og den rumlige variation, s_r :

$$s = \sqrt{s_a^2 + s_p^2 + s_r^2 + s_v^2}$$

Beslutningen forurenede af betydning for udeluft/indeklime eller ikke tages ved direkte sammenligning af måleresultater med kriterier, eventuelt korrigeret for reduceret transport til indeklime /1/.

Beslutningen er altså her, se også Afsnit 2.1.3, at et enkelt eller et gennemsnitligt analyseresultat, \bar{x} , skal være under kriteriet, K , med en sikkerhed der afhænger af afstand imellem gennemsnit og kriterium, samt af den samlede usikkerhed, s :

\bar{x} eller $\bar{x} < K$, variabel sikkerhed

Det gælder som for den rumlige variation, at fremgangsmåden betyder en sikkerhed i beslutningen forurenede eller ikke forurenede for et materiale på 50% tæt på kriteriet, men også at en væsentlig øgning af beslutningssikkerheden i praksis ikke er mulig på grund af den grå zone.

For udledning af spildevand har man valgt at basere beslutningen om overskridelse af kriterium eller ikke på det gennemsnitlige analyseresultat over kontrolperioden tillagt en usikkerhed baseret på standardafvigelsen som beskrevet i Afsnit 2.1.3 /25-28/. Beregningerne er baserede på logaritmen til analyseresultaterne, fordi der ikke forventes en normalfordeling af resultaterne.

Fremgangsmåden betyder, at beslutningen overskridelse eller ikke overskridelse kan tages med 95% sikkerhed under inddragelse af den samlede sikkerhed inklusive analyse og prøvetagning samt stor skala rumlig variation og tidslig variation.

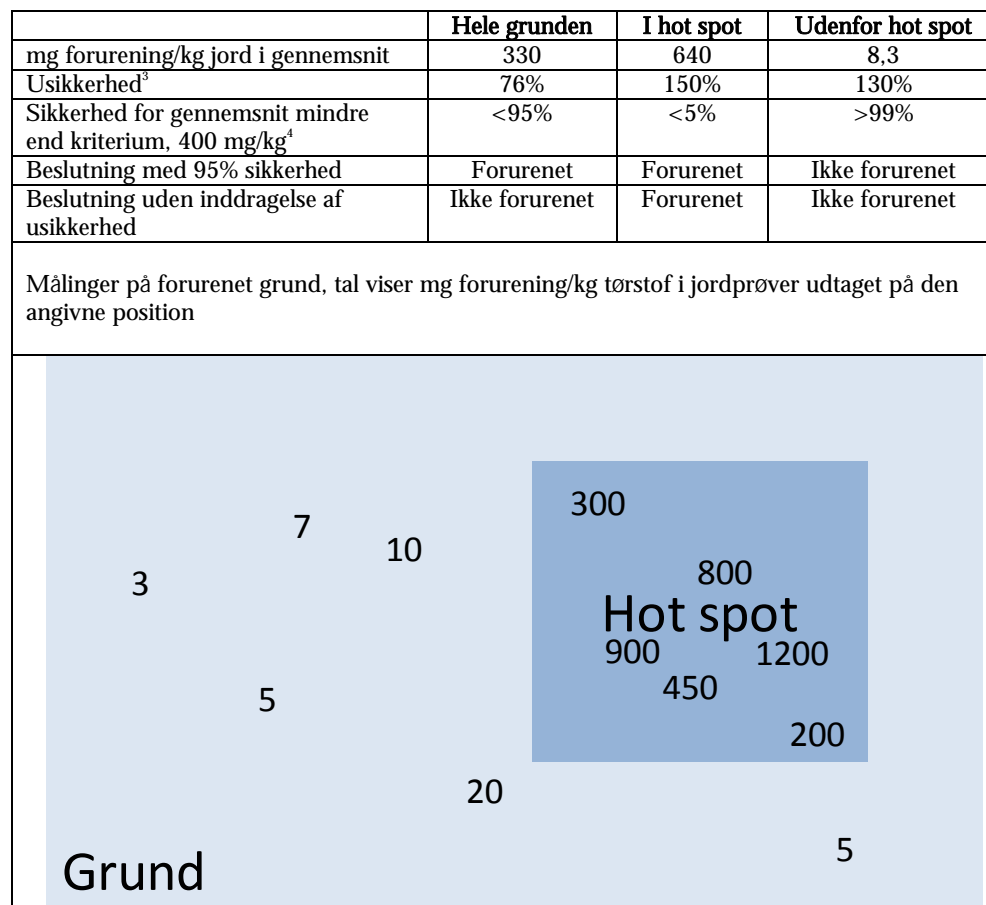
2.1.5 Reduktion i usikkerhed

Reduktion af usikkerhed på analyse og prøvetagning kan dels ske ved at forbedre de benyttede metoder og dels ved at udtage og analysere flere delprøver. Usikkerheden af en beslutning baseret på for eksempel analyseresultater, U_a , reduceres med kvadratroden af antallet af analyserede prøver:

$$U_a(n \text{ prøver}) = \frac{U_a(1 \text{ prøve})}{\sqrt{n}}$$

Tilsvarende kan usikkerheden på koncentrationen af forurening i et materiale med rumlig eller tidslig variation på lille skala reduceres ved at analysere blandeprøver af flere enkeltprøver, hvor standardafvigelsen igen typisk reduceres med kvadratroden af antallet af delprøver i blandeprøver. Dette gælder, forudsat usikkerheden på udtagning af prøver er større end usikkerheden på analyser.

Hvis et materiale med variation på stor skala vurderes samlet, som for eksempel grunden med jordforurening i et hot spot vist i Figur 8, bliver sikkerhed i beslutningen forurenede eller ikke forurenede enten lille, eller det samlede materiale bliver vurderet som forurenede på grund af en bred beskyttelseszone. En opdeling af materialet i dele efter koncentration af forureninger giver mulighed for at foretage beslutningen forurenede eller ikke forurenede med større sikkerhed, se Figur 8.



Figur 8
Eksempel på effekt af variation på stor skala for beslutningen forurenede eller ikke forurenede.

Hvis der ikke på forhånd er kendskab til variationen på stor skala, skal antallet af prøvetagningspunkter være stort for at sikre, at forurenede dele af et materiale findes. Det er tidligere beregnet, at der skal udtages og analyseres mindst 24 jordprøver fra en forurenede grund på 400 m², hvis en hot spot på 5 m² i diameter skal opdages /1;8/. Med inddragelse også af dybden af materialet er tidligere fundet, at der med 22 borer og 145 jordprøver til analyse er 7% sikkerhed for at finde et forurenede jordlegeme på 15 m³ på en grund, der er 100 m lang, 10 m bred og undersøgt til 10 m's dybde /29/.

Opdeling af materialet efter forventet forureningsfordeling baseret på forhåndsviden er altså nødvendig for i praksis at opnå en acceptabel sikkerhed i beslutningen forurenede eller ikke forurenede for et materiale med variation på stor skala. Opdeling af en forurenede grund i prøvetagningsfelter er beskrevet i /8/ og udføres som første del af de tekniske undersøgelser hen imod kortlægning på vidensniveau 2 /7/.

³ Usikkerheden er her opgjort som den relative standardafvigelse.

⁴ Ud over den samlede usikkerhed er inddraget antallet af prøver bag hvert gennemsnit.

2.1.6 Beslutningsregler og beslutningssikkerhed

Det ideelle grundlag for at beslutte, om et materiale er forurenet eller ikke, er en 100% sikker viden om koncentrationen af forurening i enhver del af materialet. Som det fremgår af diskussionen af usikkerhed på beskrivelsen af en forurenet grund i de foregående afsnit, er dette ikke muligt i praksis. Derfor er det nødvendigt nærmere at specificere det grundlag, som en beslutning skal tages på. Specifikationen kan for eksempel have form af en beslutningsregel med en nødvendig beslutningssikkerhed /21/.

Et simpelt eksempel på en beslutningsregel er, at analyseresultatet for én prøve udtaget af materialet skal overholde kriteriet. En sådan beslutningsregel vil ikke fastlægge den nødvendige beslutningssikkerhed, og risikoen for forkerte beslutninger er ukendt, men kan være høj.

Som nævnt benyttes i forbindelse med danske miljøundersøgelser ofte at supplere beslutningsreglen med krav til kvaliteten af de metoder, der benyttes til at frembringe resultatet. Et eksempel på dette er kravet om at benytte bestemte analysemetoder med specificeret mindste analysekvalitet i /12/. På den måde begrænses usikkerheden på den del af beslutningsgrundlaget, der er stillet kvalitetskrav til.

I undersøgelser af forurenede grunde benyttes for jordforureninger med kroniske effekter bag kriteriet beslutningsreglen, at gennemsnittet af analyseresultater skal være under kriteriet. Beslutningsreglen er suppleret med råd om antal prøver, opdeling i prøvetagningsfelter og prøvetagningsstrategi /1;7;8/. På den måde fastlægges den nødvendige beslutningssikkerhed ikke, og risikoen for forkerte beslutninger er ukendt, men følges de givne råd, reduceres den.

Er der tale om forureninger med akutte effekter, suppleres yderligere kravet om gennemsnitlig overholdelse med et implicit krav til usikkerheden på gennemsnittet i form af krav til frekvens og størrelse af overskridelser af kriteriet /1/. På den måde stilles implicit krav til undersøgelsens sikkerhed, men beslutningsreglen og kravet til sikkerhed er ikke i statistisk balance.

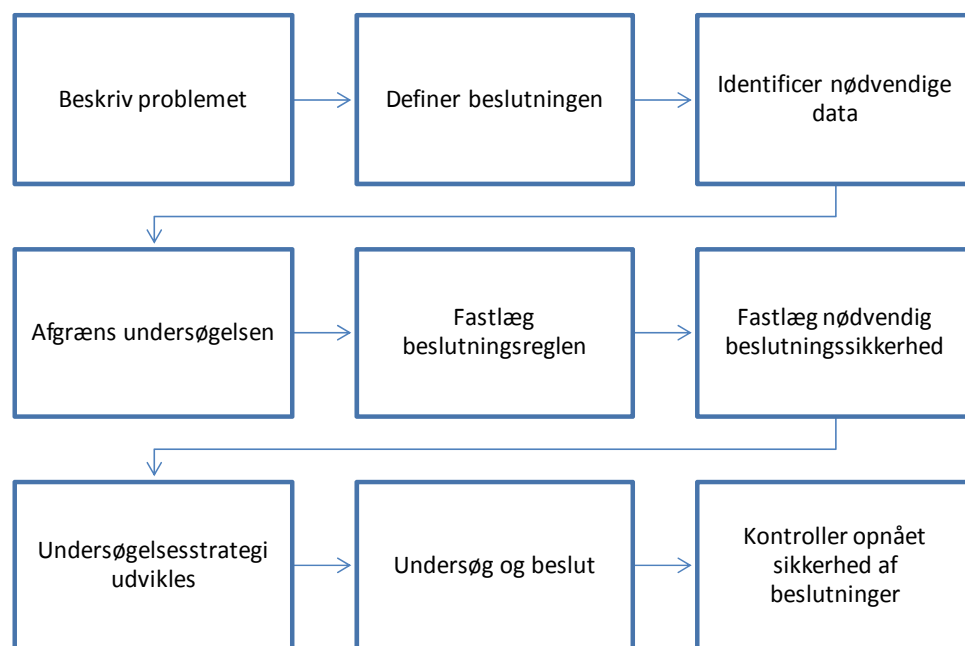
Usikkerheden i de opnåede måleresultater og risikovurderinger vil i dag normalt ikke blive opgjort, rapporteret og taget i betragtning eksplicit, ligesom de ikke vil blive inddraget i planlægningen af en undersøgelse.

I sine anvisninger for undersøgelser af forurenede grunde anviser den amerikanske miljøstyrelse en systematisk fremgangsmåde for at opnå den nødvendige beslutningssikkerhed for beslutningen forurenet eller ikke forurenet, hvor nøglen er opstilling af krav til datakvalitet (data quality objectives process, DQOP) /24/. Fremgangsmåden er kort opsummeret i Figur 9, og en gennemgang af principperne og de benyttede undersøgelsesstrategier kan for eksempel findes i /30/.

Det bærende princip i fremgangsmåden er ud fra problembeskrivelsen (grundens forureningshistorie, data fra tidligere undersøgelser) at beskrive de nødvendige beslutninger (for eksempel delområde A er forurenet over kriterier, resten er ikke) og den nødvendige beslutningssikkerhed (for eksempel 95% sikkerhed for ikke at tage en forkert beslutning om et delområdes forurening). Den nødvendige beslutningssikkerhed er så udgangspunktet for fastlæggelsen af undersøgelsesstrategien og for vurdering af undersøgelsens resultater. Fremgangsmåden bærer præg af at være udviklet til store forurenede grunde, som det ofte ses i USA, hvor der er plads til og

behov for individuel risikovurdering og afvejning af risiko overfor for eksempel ressourceforbrug.

Princippet om at benytte et krav til sikkerhed i beslutning kan ikke desto mindre med fordel anvendes også for mindre grunde, blot med forudgående generel fastlæggelse af netop beslutningsregel og undersøgelsessikkerhed. Fordelen med denne fremgangsmåde er, at undersøgelsesstrategi og -omfang kan tilpasses den enkelte grund, uden at hensynet til beskyttelse af mennesker og miljø tilsidesættes.



Figur 9
Fremgangsmåde i data quality objectives process, modificeret efter /24/.

2.1.7 Undersøgelsers omfang

Undersøgelsen af jord på forurenede grunde har til formål at beskrive forureningens udbredelse i jorden i og udenfor hot spots. For lokalisering af hot spots er det nødvendige omfang af borer og prøver belyst i form af sikkerhed for identifikation som funktion af hot spots relative størrelse /1;7;8/, og Miljøstyrelsens regneark for risikovurdering, JAGG, giver mulighed for beregning af sikkerhed ud fra specificerede forudsætninger /10/. Klassificering af jorden udenfor hot spots baseres på den gennemsnitlige forureningskoncentration (kvalitetskriterier baserede på kroniske effekter), eventuelt i kombination med et krav om højeste overskridelse (50%) for enkeltprøver og højeste frekvens af overskridelser (10%) (kvalitetskriterier baserede på akutte effekter) /1/. For undersøgelser af forurenede grunde kræves som minimum udtagning og analyse af 5-10 prøver per 400 m² (lille parcelhusgrund) /1;8/ og forventes udtaget som minimum 3-6 prøver per prøvetagningsfelt /7/, mens der for diffust forurenede arealer kræves udtagning af fem delprøver og analyse af én blandeprøve per 10.000 m² /7/. En erfaringsopsamling viste i 1997, at der i forbindelse med registreringsundersøgelser af forurenede grunde i gennemsnit på det tidspunkt var blevet foretaget analyse af 2-4 prøver for metaller og organiske forureninger /31/. Vejledningen om prøvetagning og analyse af jord beskriver en niveaupdeling af undersøgelser med forskelligt omfang afhængig af formål og ønsket sikkerhed for at finde en ukendt hot spot forurening /8/, se Tabel 1.

Tabel 1
Niveauopdelt undersøgelsesstrategi og -omfang, efter /1;8;10/.

Niveau	Anvendelse	Antal prøver per 400 m ²	Sikkerhed for hot spot genfindning
1 Grov screening	Indledende undersøgelse og detaljeret undersøgelse af diffus forurening	5-10	13% (9 prøver, 2 m hot spot radius)
2 Lav tæthed	Indledende undersøgelse til lokalisering af hot spot	10-25	52% (16 prøver, 2 m hot spot radius)
3 Mellem tæthed	Supplerende undersøgelse med afgrænsning af forurening	25-50	97% (36 prøver, 2 m hot spot radius)
4 Høj tæthed	Supplerende undersøgelse med detaljeret afgrænsning af forurening	50-100	100% (81 prøver, 2 m hot spot radius)

For niveau 1 og 2 udtages prøver i flere dybder afhængig af undersøgelsesformålet, mens der for niveau 3 og 4 forventes udtaget prøver for hver ½ m /8/, typisk ned til 3-6 m /7/. For diffust forurenede områder udtages normalt prøver af overfladejorden (0-10 cm) og eventuelt i 45-55 cm's dybde, hvis der ikke med sikkerhed vides at være tale om en overfladeforurening /7/.

For grundvand anbefales i forbindelse med undersøgelser af forurenede grunde mindst én boring til den forurenede del af magasinet, mens der i forbindelse med risikovurdering under anvendelse af nedbrydning og tilbageholdelse skal inddrages data fra mindst tre boringer på en strømningslinie nedstrøms for kilden /1/. Der foreligger vejledning /1/ og JAGG regneark /10/ til risikovurdering for grundvandet, hvor forureningskoncentrationen 100 m eller 1 års transport nedstrøms for kilden kan beregnes og sammenholdes direkte med kriterier for grundvand.

Poreluftmålinger har typisk til formål at finde den højeste koncentration af forureninger i poreluften med henblik på beregning af bidrag til udeluft eller indeklime /1/, hvorefter disse bidrag kan beregnes, for eksempel i JAGG regneark /10/, og sammenholdes direkte med kvalitetskrav til højeste afdampning. Hvis beregninger tyder på overskridelser af afdampningskriterier, foreskrives gennemførelse af målinger af forureningskoncentrationer i poreluft, udeluft og indeklime /1/. Det skal bemærkes, at poreluftmålinger tillige kan benyttes til lokalisering eller afgrænsning af områder med høj forurening af jord eller terrænnært grundvand.

Eksemplet i Figur 8 viser, at mens der for et stort område uden variation på stor skala af jordforurening kan nås en beslutning med 99% sikkerhed om ikke forurenede med 6 prøver, kan beslutningen ikke tages for hele området inklusive hot spot (altså med stor skala variation) med blot 95% sikkerhed med 12 prøver. Sagt på en anden måde, er fastlæggelse af nødvendigt antal målinger til at beslutte, om et materiale er forurenede eller ikke forurenede, ikke generelt mulig. Erkendelsen af dette forhold kan antages at være baggrunden for, at sådanne generelle krav som nævnt ovenfor kun stilles begrænset for undersøgelser af forurenede grunde.

Beslutninger baseret på krav til beslutningssikkerhed har derimod den fordel, at bedre undersøgelseskvalitet (mindre usikkerhed opnået for eksempel ved bedre historiske undersøgelser, bedre planlægning eller mere omfattende prøvetagning) kan medføre lavere efterfølgende omkostninger til oprydning, mindre værditab eller mindre områder til kortlægning. Figur 4 illustrerer, at med en mindre usikkerhed på en undersøgelses resultater kan accepteres en højere gennemsnitlig forureningskoncentration, uden at beskyttelsesniveauet

kommer under pres. Der er altså her et klart incitament til bedre undersøgelser.

2.1.8 Forslag til beslutningsregel og -sikkerhed

For at opnå en konsistent og tilstrækkelig god sikkerhed i beslutningen forurenede eller ikke forurenede foreslås det at formulere beslutningsregel og -sikkerhed som følger:

- Et materiale betragtes som ikke forurenede, hvis gennemsnittet af målinger med 95% sikkerhed er under kriteriet

Den formulering indebærer, at undersøgelsens sikkerhed skal kendes, men giver mulighed for at tilpasse undersøgelsesstrategi og -omfang til forholdene for den enkelte forurenede grund.

Valget af 95% sikkerhed er arbitrært og afhænger af det beskyttelsesniveau, som ønskes.

Vurderes et forurenede materiale indenfor et afgrænset område med faste grænser, vil dette svare til at kræve:

$$\bar{x} + \frac{s \times t_{0,95}}{\sqrt{n}} < K, 95\% \text{ sikkerhed}$$

I formlen er s den samlede standardafvigelse på undersøgelsens resultater, n er antallet af analyseresultater, \bar{x} er deres gennemsnit, og $t_{0,95}$ er en statistisk faktor, der kan findes ved tabelopslag.

I princippet kan gennemsnittet være et enkelt resultat, hvis undersøgelsesusikkerheden er kendt på forhånd.

Med udgangspunkt i den foreslåede beslutningsregel og -sikkerhed beskriver projektet metoder til fastlæggelse af områdegrænser og beregning af undersøgelsessikkerhed i undersøgelser af forurenede grunde.

2.1.9 Graderet beslutningssikkerhed

Den ønskede sikkerhed i beslutning kan varieres, for eksempel således at en kronisk effekt kræver lavere sikkerhed end en akut, eller en følsom arealanvendelse en større sikkerhed end en ikke følsom. Tilsvarende kunne en erkendt risiko for grundvandsforurening medføre krav om høj beslutningssikkerhed og fravær af en sådan tillade lavere beslutningssikkerhed, for eksempel 65%:

$$\bar{x} + \frac{s \times t_{0,65}}{\sqrt{n}} < K, 65\% \text{ sikkerhed}$$

En lavere beslutningssikkerhed giver reduceret beskyttelsesniveau, men kan også åbne for godkendelse af flere materialer med begrænset forurening eller for gennemførelse af undersøgelser med færre områdeopdelinger eller færre prøver til analyse, se Figur 10.

	Hele grunden	I hot spot	Udenfor hot spot
mg forurening/kg jord i gennemsnit	330	640	8,3
Usikkerhed	76%	150%	130%
Beslutning med 65% sikkerhed	Ikke forurenet	Forurenet	Ikke forurenet
Beslutning med 95% sikkerhed	Forurenet	Forurenet	Ikke forurenet

Figur 10

Eksempel på effekt af graderet beslutningssikkerhed, data fra Figur 8.

Et forslag til valg af graderet usikkerhed er vist i Tabel 2.

Tabel 2

Forslag til graderet beslutningssikkerhed ved undersøgelse af forurenede grunde, jord.

	Følsom arealanvendelse og/eller erkendt risiko for grundvandsforurening	Ikke følsom arealanvendelse og ingen erkendt risiko for grundvandsforurening
Forslag til beslutningssikkerhed	95%	65%

Det skal bemærkes, at der bag forslaget om niveauer af beslutningssikkerhed ikke ligger en kvantitativ analyse af konsekvenserne, men alene en kvalitativ erkendelse af et behov for at kræve større beslutningssikkerhed ved større risiko. For at afspejle et ønske om en større sikkerhed for forureninger med kriterier baseret på akutte effekter, som det ses af kravene til højeste overskridelse og frekvens af overskridelser, kunne det overvejes at skærpe kravet til beslutningssikkerhed for følsom arealanvendelse for disse forureninger.

2.1.10 Beslutningssikkerhed og beskyttelsesniveau

Beslutninger baseret på beslutningsregel og -sikkerhed giver som beskrevet en mindre tilfældig beslutning med incitament til at øge undersøgelsers kvalitet (mindske usikkerheden). Samtidig vil det reelle beskyttelsesniveau øges. Figur 4 viser, at det reelle kriterium for en gennemsnitsværdi bliver 1,6 x usikkerheden lavere end det hidtidige kriterium. Såfremt beskyttelsesniveauet ønskes fastholdt, med beslutninger baseret på beslutningsregel og -sikkerhed, kan det være nødvendigt at øge kriterieværdierne. Den nødvendige faktor hertil vil afhænge både af forureningernes variabilitet på de enkelte forurenede grunde og af sikkerheden i undersøgelserne (kvaliteten). Det er derfor ikke muligt at foreslå en faktor med generel anvendelighed. I det omfang, at undersøgelsesusikkerheden har været taget i betragtning i fastlæggelsen af kriterium, kan usikkerhedsfaktoren herfra benyttes til, helt eller delvis, at opjustere kriteriet.

3 Jord

Med hensyn til jordforurening er projektets fokus på indledende og afgrænsende undersøgelser, altså både undersøgelser af grunde frem til beslutning om kortlægning på vidensniveau 2 og undersøgelser inden en beslutning om oprydning foretages ("videregående undersøgelser" eller "supplerende undersøgelser"). Det forudsættes i beskrivelsen nedenfor, at der er foretaget en beskrivelse af den potentielle forurening på den forurenede grund svarende til en kortlægning på vidensniveau 1.

3.1 Rammer for undersøgelser af jordforurening

Undersøgelser af en forurenede grund vil typisk foregå i separate delundersøgelser:

- Af- eller bekræftelse af jordforurening over kriterier, indledende undersøgelser
- Afgrænsning af jordforurening, supplerende undersøgelser
- Kontrol af afværger gennemførelse, efterkontrol

Delundersøgelserne foregår normalt i den angivne rækkefølge med de angivne formål, men resultaterne fra de indledende undersøgelser af jordforurening vil ofte blive benyttet i de indledende undersøgelser af risiko for grundvand og/eller poreluft, hvorfor datakvalitet og dækning kan være af særlig stor betydning.

Det er, som vist i Afsnit 2.1.5, ikke praktisk og økonomisk muligt at identificere et begrænset forurenede område (hot spot af lille størrelse) i et større, eventuelt diffust forurenede areal, i hvert fald ikke med metoder baseret på prøvetagning og analyser. Der er derfor afgørende, at viden bag beslutningen om opdeling i prøvetagningsfelter og tilordning til punktkilde eller diffus forurening er fyldestgørende. At dette er tilfældet, er lagt til grund i udarbejdelse af prøvetagningsstrategier i det følgende. Det indgår altså ikke i formålet at sikre identifikation af mindre hot spots.

3.1.1 Jordforurening over kriterier, indledende undersøgelser

De indledende undersøgelser har til formål at konstatere, om der i et område er selv en lille, men konsekvent overskridelse af kriterier /1/. Fremgangsmåden vil afhænge af, om indsamlingen af viden op til vidensniveau 1 kortlægning har identificeret en risiko for punktkildeforurening (hot spot), eller om den indsamlede viden peger på diffus forurening.

Hvis der er identificeret risiko for punktkildeforurening, opdeles området i prøvetagningsfelter med forventet ensartet forurening, hvorefter der gennemføres det nødvendige antal målinger (prøvetagning og analyser) til at identificere forureningen, altså tage beslutningen forurenede eller ikke forurenede /7/. Beslutningen baseres som tidligere nævnt på, om gennemsnitlig koncentration overskrider kriteriet, eventuelt med de også tidligere omtalte begrænsninger i frekvens af overskridelser (10%) og maksimal overskridelse (50%) for forureninger med akutte effekter. Er beslutningen, at

prøvetagningsfeltet er forurenet over de kriterier, der kræver indsats (jordkvalitets- eller afskæringskriterier), fortsættes med egentlig afgrænsning og indsats /1/. Området (grunden) kortlægges som forurenet på vidensniveau 2.

Hvis der ikke er identificeret risiko for punktkildeforurening, undersøges området samlet ved udlægning af et prøvetagningsnet, hvor der udtages fem delprøver og analyseres én blandeprøve for hver 10.000 m², eventuelt i to dybder /7/. Er beslutningen, at området er forurenet, se ovenfor, kortlægges området som diffust forurenet på vidensniveau 2. Det skal bemærkes, at en række områder som udgangspunkt er kortlagt som diffust forurenede ud fra viden på niveau 1 i kraft af områdeklassificering /9/. For sådanne områder vil viden om den målte forurening først og fremmest kunne have betydning for udtagning af større, sammenhængende områder af områdeklassificeringen.

3.1.2 Afgrænsning af jordforurening, supplerende undersøgelser

Når et område er fundet forurenet og dermed kortlagt på vidensniveau 2, kan det være nødvendigt at foretage en nærmere afgrænsning af forureningen, dels for at afklare om og hvor rådgivning er tilstrækkeligt (jordkvalitetskriteriet er overskredet, men afskæringskriteriet er ikke overskredet), dels for at afklare hvor afskæring eller oprydning er nødvendig (afskæringskriteriet er overskredet) /6/. En præcis afgrænsning af jordforureningen giver mulighed for at anslå oprydningsudgifter og dermed for at vælge imellem forskellige indsatsmuligheder.

Hvis de indledende undersøgelser har givet tilstrækkelig information om forureningens fordeling, kan afgrænsning være unødvendig. Hvis der under alle omstændigheder gennemføres oprydning ved bortgravning uden rumlige begrænsninger, kan en afgrænsning være unødvendig, idet afgravningen da kan styres ved prøvetagning og analyse under gravearbejdet. Det skal dog bemærkes, at præcis viden om forureningens fordeling i et afgravningsområde kan benyttes til at forhåndssortere opgravet jord i forureningsklasser og dermed til at reducere bortskaffelsesomkostningerne.

Forhåndssortering eller -klassificering kan baseres på inddeling af jordlegemet i dellegemer, hvorfra der tages (blande- eller enkelt-) prøver til analyse. Antallet af prøver til analyse er fastlagt, og gennemsnittet af analyseresultater skal være under kategorigrænsen, ligesom ingen resultater må overskride grænsen mere end 50%, eksempel fra Københavns Kommune /32;33/. På den måde stilles implicit krav til undersøgelsens sikkerhed, men beslutningsreglen (under gennemsnit) og kravet til sikkerhed (højst 50% overskridelse) er ikke i statistisk balance.

Vejledning i afgræsningsundersøgelse af forurenet jord i øvrigt findes på mere generel form i for eksempel /8;34;35/, men der er ikke konkrete krav til denne del af jordforureningsundersøgelsen.

3.1.3 Kontrol af afværges gennemførelse, efterkontrol

Hvis forureningen efterlades, med eller uden afskæring, er der i princippet ikke krav om efterkontrol. Ønskes kortlægning revurderet, vil kravet til undersøgelse svare til kravet under den indledende undersøgelse.

Hvis forureningen underkastes *in situ* oprensning, vil der normalt være krav om dokumentation af oprensningsgrad, hvor kravet til undersøgelse forventeligt svarer til kravet under den indledende undersøgelse.

Under bortgravning kontrolleres forureningsfjernelsen normalt ved udtagning af et antal prøver per m² gravefront, der ved afslutning alle skal være "rene", det vil sige med koncentrationer under kriteriet. Dette har praktisk været implementeret som et krav om mindst én "ren" prøve per 7 x 7 m² afgravningsbund /36/, mens der i /8/ foreslås 6-10 prøver til analyse per 60 m² gravefront eller -bund. På denne måde stilles implicit krav om en høj undersøgelsessikkerhed eller bortgravning til under kriteriet.

Hvis der foretages prøvetagning og analyse, der skal benyttes som udgangspunkt for klassificering af jordens forureningsklasse (forklassificering), kræves for eksempel i København /32/ udtagning af svarende til en prøve per 30 t jord eller en prøve per 36 m² med afgravning af den øverste ½ m. Prøven skal være en blandeprøve af fem enkeltprøver, og er der flere resultater for et jordparti, skal gennemsnittet være under klassificeringsgrænsen, og hvert enkelt resultat må højst overskride grænsen med 50%. Er der kun ét resultat for hvert jordparti, skal hvert resultat ligge under grænsen. På denne måde stilles ligeledes implicit krav om en høj undersøgelsessikkerhed eller bortgravning til under kriteriet.

3.2 Metoder til forureningsafgrænsning for jord

Indenfor rammerne af jordforureningsundersøgelser er der altså fire hovedformål:

- Beskrive forureningskoncentrationen indenfor et foruddefineret prøvetagningsfelt med henblik på beslutningen forurennet eller ikke forurennet
- Afgrænse ensartede prøvetagningsfelter og beskrive forureningskoncentrationen indenfor de resulterende prøvetagningsfelter
- Forklassificere jord til bortskaffelse
- Dokumentere afgravning

Alle fire hovedformål skal understøtte beslutningen forurennet eller ikke forurennet, eventuelt suppleret med beslutning om hvor forurennet. Det første formål forfølges primært i en indledende undersøgelse, mens begge de første formål forfølges i den afgrænsende undersøgelse. I det omfang en afgrænsning praktisk og økonomisk kan foretages i den indledende undersøgelse, vil det muliggøre en mere præcis kortlægning og dermed reducere de langsigtede omkostninger.

I det omfang en forklassificering kan udføres i forbindelse med en indledende eller afgrænsende undersøgelse, vil det muliggøre en mere præcis dimensionering af bortskaffelse. Forklassificeringen indeholder de samme elementer som indledende og afgrænsende undersøgelser, nemlig en beskrivelse af forureningskoncentrationen og sikkerheden af denne beskrivelse for et jordvolumen.

Disse tre første hovedformål lægges til grund for det følgende, men med forklassificering som en del af de to første hovedformål.

Dokumentation af bortgravning adskiller sig ved krav til kriterieoverholdelse (rene prøver), som ikke er velegnet for en usikkerhedsbaseret strategi, hvorfor dette hovedformål ikke er medtaget.

3.2.1 Koncentrationsbeskrivelse i foruddefineret felt

Forureningskoncentrationen indenfor et prøvetagningsfelt kan som tidligere nævnt beskrives som en gennemsnitlig koncentration, eventuelt suppleret med størrelse/hyppighed af overskridelser af relevante kriterier. For den forurenede grund vist i Figur 8 er denne form for karakterisering vist i Tabel 3. Det skal bemærkes, at en overskridelse af jordkvalitetskriterium på mere end 100% ville medføre krav om revurdering af behov for supplerende undersøgelse af hot spots, idet dog en enkelt forhøjet værdi ikke betragtes som en hot spot /1/.

Tabel 3

Eksempler på beskrivelse af forureningsvariation på en grund og i et prøvetagningsfelt, data fra Figur 8.

	Hele grunden	I hot spot	Udenfor hot spot
mg forurening/kg jord i gennemsnit	330	640	8,3
Hyppighed af overskridelser	33%	66%	0%
Største overskridelse af kriterium, 400 mg/kg	200%	200%	0%
Beslutning baseret på gennemsnit	Ikke forurenede	Forurenede	Ikke forurenede
Beslutning med inddragelse af overskridelser	Forurenede	Forurenede	Ikke forurenede
Beslutning med inddragelse af 100% overskridelse som hot spot indikation	Vurder risiko for hot spot	Vurder risiko for hot spot	Ikke forurenede

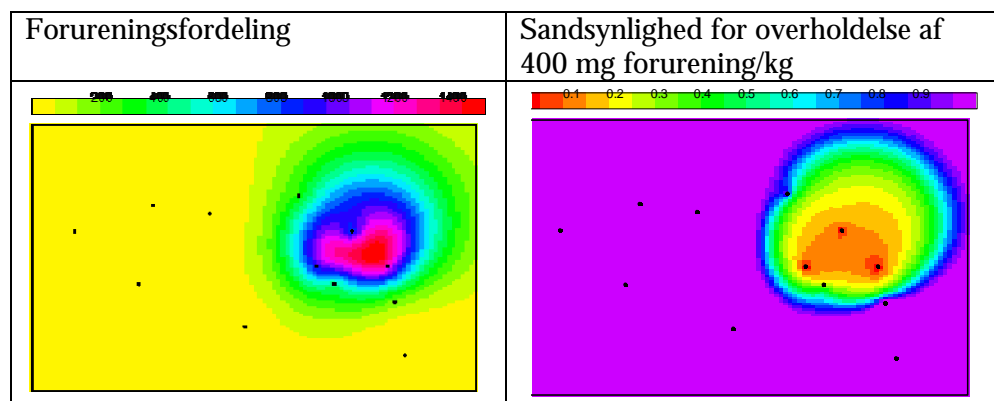
For at inddrage usikkerheden i beslutningen kan, som nævnt i Afsnit 2.1.5, foretages vurdering ud fra variationen af resultaterne, se Tabel 4.

Tabel 4

Eksempler på beskrivelse af forureningsvariation på en grund og i et prøvetagningsfelt, data fra Figur 8.

	Hele grunden	I hot spot	Udenfor hot spot
mg forurening/kg jord i gennemsnit	330	640	8,3
Usikkerhed	76%	150%	130%
Beslutning med 95% sikkerhed	Forurenede	Forurenede	Ikke forurenede

Ved hjælp af det geostatistiske værktøj kan yderligere vurderes, om afgrænsningen af prøvetagningsfeltet indledningsvist var retvisende, Figur 11, se Afsnit 3.4 for en beskrivelse af værktøjet. Den tolkede forureningsfordeling viser et lidt større område end det oprindelige hot spot prøvetagningsfelt med koncentration over kriteriet på 400 mg forurening/kg, ligesom konturen for 95% sikkerhed for koncentration under kriteriet viser et lidt bredere forurenede område end det oprindelige hot spot prøvetagningsfelt, (udenfor violet farve på sandsynlighedsplot).

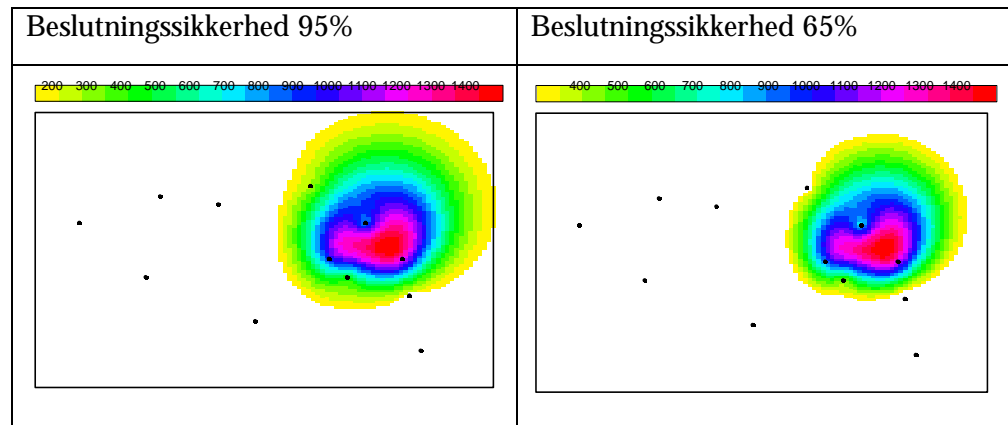


Figur 11

Geostatistisk tolket forureningsfordeling og sandsynlighed for overholdelse af kriterium på en grund, data fra Figur 8.

Den geostatistiske behandling kan altså benyttes til at afprøve den oprindelige afgrænsning af hot spot eller prøvetagningsfelt. Derudover kan afgrænsning, hvis relevant, forbedres ved geostatistisk baseret udtagning af supplerende prøver, se Afsnit 3.2.2. Det skal bemærkes, at kortlægning i dag normalt foretages ud fra den oprindelige opdeling i prøvetagningsfelter, som ikke ændres på baggrund af opnåede resultater /7/.

Hvis afgrænsningen af det forurenede (hot spot) område kan foretages med et lavere beskyttelsesniveau, kan det vælges at benytte en 65% sikkerhed i afgrænsning i stedet for 95% sikkerhed, se Figur 12.



Figur 12

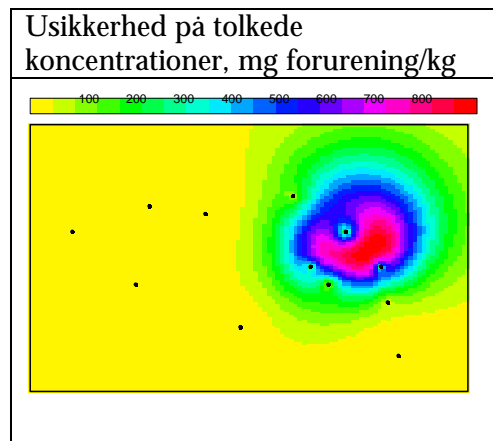
Geostatistisk tolket kontur for overholdelse af kriterium på en grund med forskellig sikkerhed, data fra Figur 8.

Figur 12 viser, at kræves 95% sikkerhed i beslutningen, da er området (farvet i figuren) karakteriseret som forurenede større, end hvis 65% er tilstrækkelig sikkerhed. Forskellen på forskellige beskyttelsesniveauer kan være betydeligt større i afgrænset område for mere komplicerede grunde.

3.2.2 Afgrænsning af felt og forureningsbeskrivelse

Afgrænsningen af en forurening indenfor et prøvetagningsfelt, hvor der ikke ud fra kortlægning til vidensniveau 1 og eventuelle supplerende, indledende undersøgelser er fundet hot spot, udføres sædvanligvis ved udtagning af et antal prøver og visuel udskillelse af eventuelle områder med højere koncentration, typisk vist med en manuel afgrænsning ("håndtegning"). Figur 11 viser, hvordan denne afgrænsning kan foretages baseret på den geostatistiske analyse af resultaterne.

Hvis det område, der er beskrevet som forurenede (overskrider med for eksempel 95% sikkerhed det relevante kriterium), er for stort, set ud fra vurderinger af omkostninger til bortskaffelse af jord eller ud fra størrelsen af det område, som skal underlægges begrænsninger i arealanvendelse eller klassificeres som forurenede, kan det geostatistiske værktøj benyttes til at identificere områder med højest sandsynlighed for forbedring ved supplerende prøvetagning og analyse. Figur 13 viser områder med størst usikkerhed på forureningsbeskrivelsen i øverste højre del (grønt område ud til kanten), hvor en forbedring af datagrundlaget forventeligt ville betyde den største forbedring. En intuitiv vurdering ville på samme måde pege på, at der var behov for flere prøver fra denne del af området, idet der reelt ikke er resultater herfra.



Figur 13
Effekt på usikkerhed på tolket forureningsfordeling, data fra Figur 8.

For at få en forventning om effekten af at udtage og analysere ekstra prøver, kan resultaterne indsættes i det geostatistiske værktøj og prøves af. I Figur 14 er vist effekten af en sådan afprøvning gennemført med de tre forskellige metoder, som værktøjet stiller til rådighed:

- Planlægger kan ud fra identifikation af områder med lav sikkerhed, se ovenfor, på egen hånd angive punkter til udtagning af ekstra prøver og sine forventninger til resultater
- Planlægger kan angive område til ekstra prøvetagning, lade værktøjet generere tilfældige positioner indenfor dette og selv angive sine forventninger til resultater
- Planlægger kan angive område til ekstra prøvetagning og så lade værktøj generere positioner og forudsige resultater ud fra de hidtil målte resultater

Eget valg af positioner og forventede resultater	Værktøjsvalg af positioner og eget valg af forventede resultater	Værktøjsvalg af positioner og forudsigelse af forventede resultater

Figur 14
Eksempler på beslutningssikkerhed 95% for overskridelse af kriterium på 400 mg forurening/kg simuleret på forskellig vis, data fra Figur 8.

Med eget valg af positioner og forventede resultater kan fås en klar reduktion i det område, der beskrives som forurenet, indtil videre på baggrund af forventede resultater. Svarer de efterfølgende resultater til det forventede, er områder til oprensning eller klassificering klart reduceret.

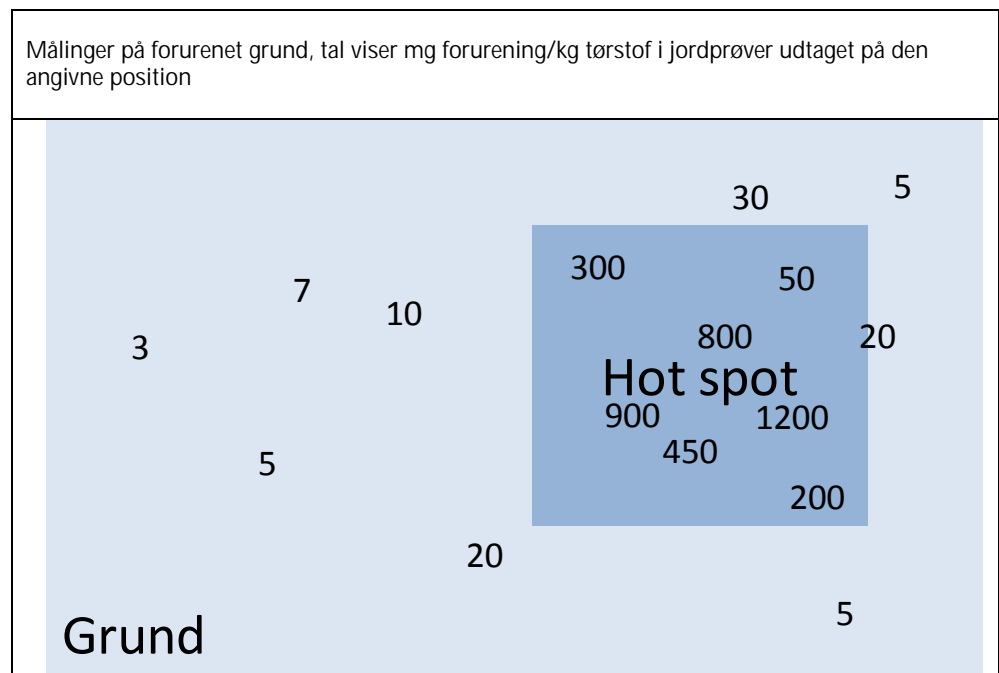
Med værktøjets valg af positioner og eget valg af forventede resultater tilsvarende ovenfor fås en mindre tydelig reduktion, primært fordi positionerne placeres tilfældigt indenfor det kritiske område og ikke selektivt i områder med lav resultatdækning.

Med værktøjets valg af positioner og forudsigelse af forventede resultater ud fra den geostatistiske analyse fås en endnu mindre reduktion i område,

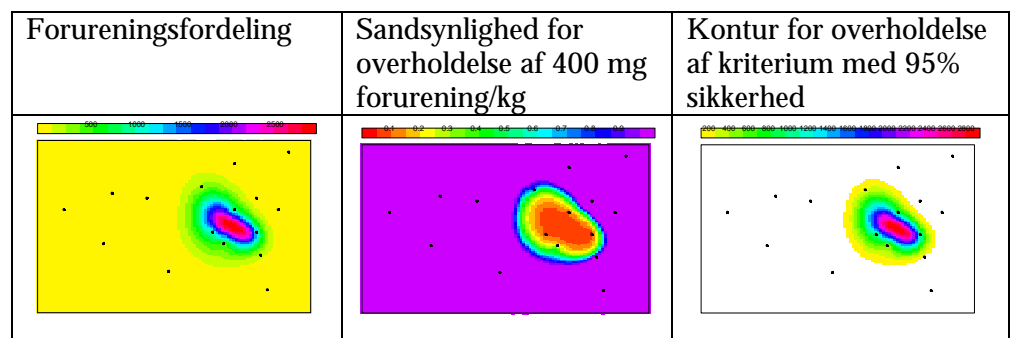
primært forårsaget af, at de ekstra målepunkter viser resultater svarende til det statistisk forventede og dermed kun bidrager begrænset med ny viden.

Med udgangspunkt i en supplerende prøvetagning og analyse med fire ekstra prøver, se Figur 15, kan foretages en geostatistiske revurdering af data, se Figur 16.

En vurdering baseret på gennemsnit af koncentrationer i hot spot (560 mg forurening/kg) vil stadig vise, at hot spot er forurenet, mens det omkringliggende område ikke er forurenet. Der kunne være en visuel indikation af en for omfattende afgrænsning af hot spot som prøvetagningsfelt, men en revideret afgrænsning ville alene være intuitiv og reelt alene baseret på det ene ny resultat inde i hot spot.



Figur 15
Resultater for den forurenede grund efter supplerende prøvetagning og analyse.



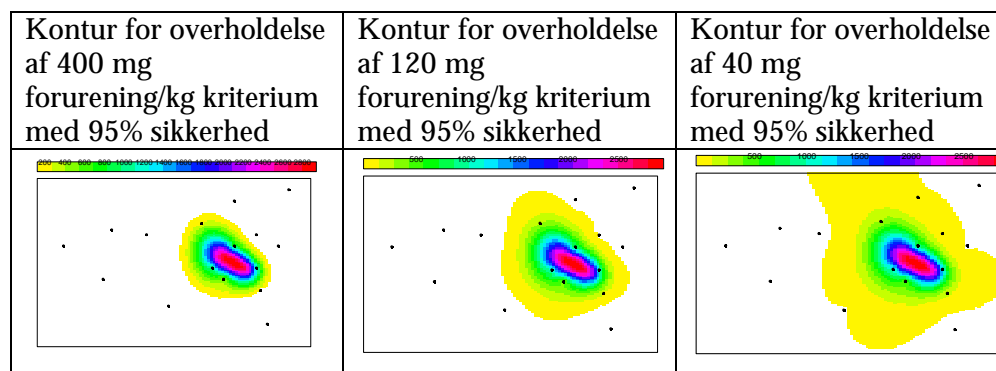
Figur 16
Geostatistisk vurdering af data for forurenede grund efter supplerende undersøgelse, data fra Figur 15.

Benyttes den geostatistiske vurdering, se Figur 16, kan afgrænsning af prøvetagningsfelt med forureningskoncentration over kriterium foretages baseret på statistisk vurdering af data med alle fire nye resultater inddraget i vurderingen. Det skal bemærkes, at en sådan revurdering af afgrænsningen af

prøvetagningsfeltet eller hot spot forudsætter, at dette accepteres i denne fase af undersøgelsen.

Ønskes en forklassificering efter andre "kriterier" eller klassificeringsgrænser med henblik på dimensionering af for eksempel bortskaffelse, kan det geostatistiske værktøj benyttes igen til optegning af kontur for 95% sikkerhed for overholdelse af 40 mg forurening/kg eller 120 mg forurening/kg, se Figur 18.

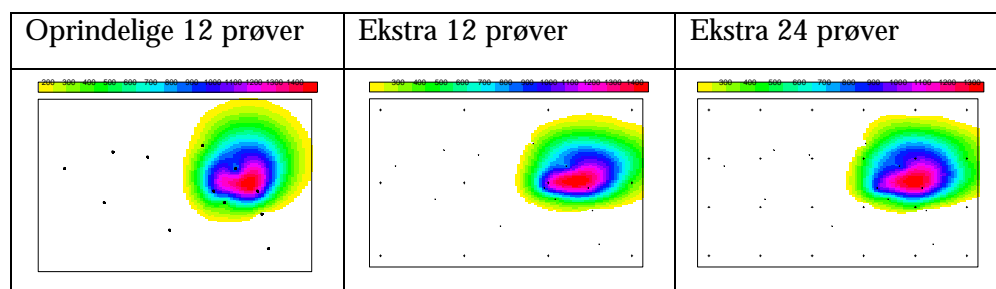
De geostatistiske afbildninger kan benyttes til at foretage en forklassificering af jorden i den undersøgte dybde med specificeret sikkerhed. Det skal dog bemærkes, at der her er få data til rådighed, således at yderligere prøver uden tvivl vil medføre en reduktion af de klassificerede områder.



Figur 17
Geostatistisk vurdering af data for forurennet grund som led i forklassificering, data fra Figur 15.

3.2.3 Effekt af prøveantal på geostatistisk vurdering

Med et øget prøveantal opnås en bedre sikkerhed for at belyse variationer i forureningens fordeling. Figur 14 viser, hvordan supplerende prøvetagning placeret i dårligt belyst område og med ny information kan bidrage til en mere præcis afgrænsning. I Figur 18 er vist effekten af alene at øge prøveantallet, hvor der ikke opnås ny viden. Figuren er optegnet ved at lade værktøjet genere ekstra resultater fordelt i grid over grunden ud fra den geostatistiske forureningsfordeling.



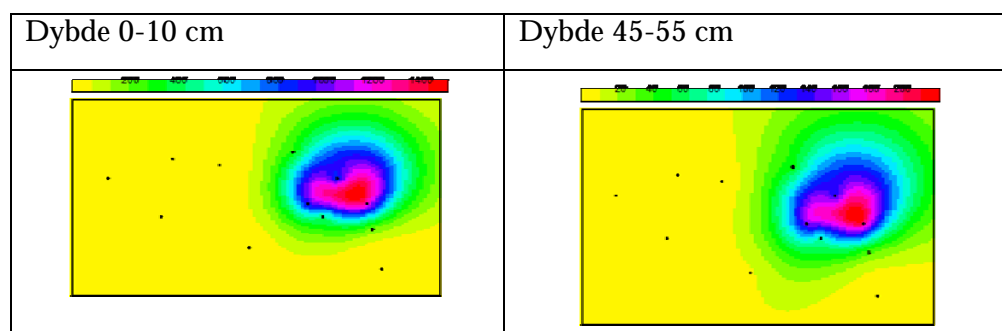
Figur 18
Kontur for overholdelse af kriterium på en grund med 95% sikkerhed med stigende prøveantal, data fra Figur 8.

Figur 18 viser, at der med væsentligt større prøveantal kun fås en mindre reduktion i forureningsbeskrivelsens usikkerhed (lille indsnævring af forurennet område), så længe placeringen ikke styres ud fra identifikation af usikre områder og ikke producerer ny information om forureningsfordelingen.

3.2.4 Geostatistisk vurdering med flere dybder

Afgrænsningen af en forurening i dybden foretages normalt ved udtagning af prøver i flere dybder, afhængig af oplysninger om punktkilde (for eksempel hver ½ m til uforurenet) eller diffus forurening (0-10 cm og eventuelt 45-55 cm), samt om egenskaber af en eventuel punktkilde og anvendelsesdybden for jorden. Beskrivelse af forureningen i flere dybder kan dels tjene til at dimensionere eventuel opgravning, dels til at underbygge en formodning om diffus forurening som primær kilde.

Det geostatistiske værktøj er sat op til at analysere variationer i to plan (horisontalt), men kan gøre dette i flere planer separat. Det er altså muligt at forudsige forureningsfordeling og beskrive sandsynlighed af overholdelse af kriterium for hvert lag separat, hvor lagenes tæthed alene begrænses af de benyttede prøvetagningsdybder.



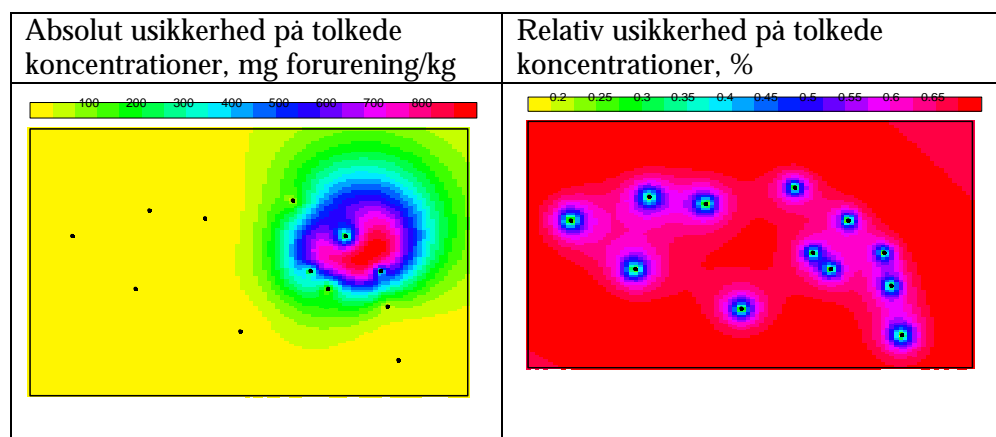
Figur 19

Kontur for overholdelse af kriterium på en grund med 95% sikkerhed udteget for to dybder, data fra Figur 8 suppleret med tilsvarende data i dybere lag.

Værktøjet er ikke sat op til at foretage en egentlig 3-dimensional geostatistisk analyse, dels fordi dette ville kræve flere datapunkter i flere dybder, end der normalt kan forventes til rådighed, dels fordi dette vil komplicere beregningerne og dermed forlænge beregningstiderne. Desuden ville tolkning af 3-dimensional geostatistik være meget vanskelig at automatisere, idet der kræves geostatistisk ekspertise og individuelle vurderinger hertil.

3.2.5 Undersøgelsesusikkerhed

Særligt med en lav dækning af et prøvetagningsfelt med prøvetagningspunkter kan der opstå tvivl om validiteten af eventuelle beslutninger. Det geostatistiske værktøj giver som nævnt mulighed for at beregne usikkerheden på beskrivelsen af forureningsudbredelsen, se Figur 20.



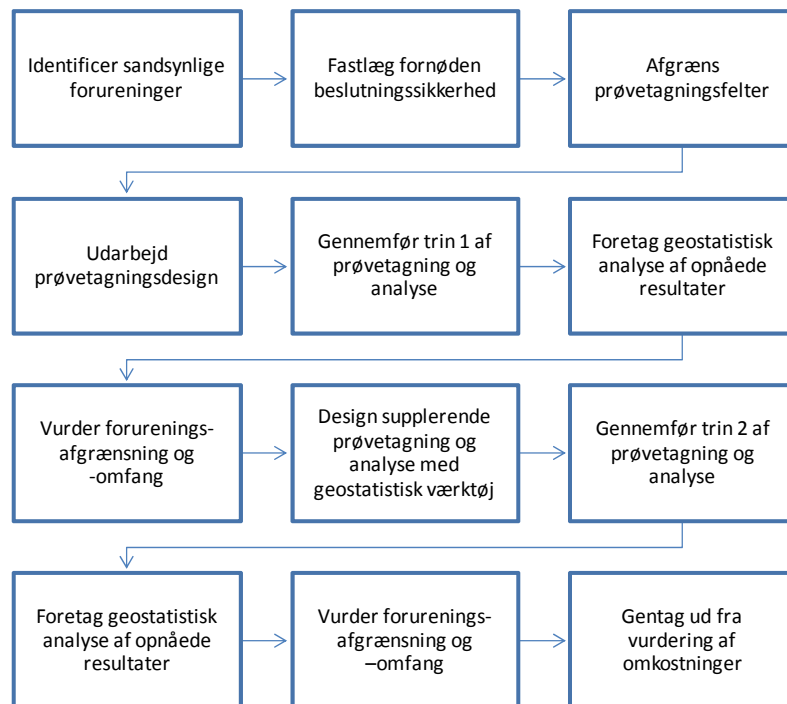
Figur 20

Absolut og relativ usikkerhed på tolket forureningsfordeling, data fra Figur 8.

Figur 20 viser, hvordan den absolutte usikkerhed på den geostatistisk forudsagte forureningsfordeling er under 50 mg forurening/kg i et stort område (gult), hvorfor der selv med det relativt lave antal prøvetagningspunkter kan tages beslutning med rimelig sikkerhed. Ikke overraskende er den relative usikkerhed stor (rødt) udenfor de områder, hvor der er taget prøver.

3.3 Strategi for beskrivelse og afgrænsning af jordforurening

I Figur 21 er vist et forslag til sandsynlighedsbaseret undersøgelsesstrategi, der inddrager det geostatistiske værktøj og er baseret på den modificerede data quality objectives proces, Figur 9.



Figur 21
Forslag til sandsynlighedsbaseret undersøgelsesstrategi.

3.3.1 Identificer sandsynlige forureninger

På sædvanlig vis identificeres de forureninger, som sandsynligvis vil findes på grunden baseret på undersøgelserne til kortlægning på vidensniveau 1 eller tilsvarende. Der henvises for eksempel til branchevejledningerne fra Miljøstyrelsen /2-5;37/ og Videncenter for Jordforurening /38/ for sandsynlige forureninger ved forskellige kildetyper.

Hvis der fra undersøgelser til kortlægning på vidensniveau 2 foreligger viden, der giver mulighed for at udpege en følsom indikatorparameter for forurening af den enkelte grund med tilstrækkelig sikkerhed, bør kun denne benyttes i efterfølgende videregående/supplerende undersøgelser.

For hver sandsynlig forurening skal indhentes de relevante kriterier og eventuelle klassificeringsgrænser til brug i vurderingerne.

3.3.2 Fastlæg fornøden beslutningssikkerhed

Ud fra oplysninger fra grundejer og planmyndighed fastlægges den fremtidige arealanvendelse, hvor ændringer af denne arealanvendelse vil kræve forudgående godkendelse /7/. Arealanvendelsen klassificeres som følsom (bolig, institution, offentlig legeplads, rekreativt område, alment tilgængeligt område, kolonihave eller sommerhusgrund) eller ikke følsom (andet).

Ud fra kortlægningen af områder med særlige drikkevandsinteresser /39;40/ afgøres det, om der i området er risiko for grundvandsforurening med påvirkning af drikkevandsinteresser. Hvis der er tale om videregående/supplerende undersøgelser, inddrages konklusionen vedrørende grundvandsrisiko fra risikoidentifikationen bag kortlægning på vidensniveau 2. Hvis der er tale om undersøgelser inden kortlægning på vidensniveau 2, kan det efterfølgende være nødvendig at revurdere grundvandsrisikoen og på den baggrund øge kravet til beslutningssikkerhed for jordundersøgelserne eller inddrage en lav beslutningssikkerhed i planlægningsgrundlaget for efterfølgende videregående grundvandsundersøgelser.

Endelig vurderes, om nogle af de sandsynlige forureninger har kriterier fastsat på baggrund af akutte effekter: arsen, uorganisk fluorid, kobbernikkel og phenoler /1/.

Med udgangspunkt i Tabel 2 besluttet derefter for 65% eller 95% nødvendig beslutningssikkerhed, og behovet for skærpet beslutningssikkerhed for følsom arealanvendelse, og akut effekt bag kriterier vurderes.

3.3.3 Afgræns prøvetagningsfelter

Der foretages på sædvanlig vis /8/ afgrænsning af prøvetagningsfelter tilknyttet de mulige punktkilder, der er identificerede i forbindelse med kortlægning til vidensniveau 1 og eventuelt for videregående/supplerende undersøgelser i forbindelse med kortlægning til vidensniveau 2.

For diffust forurenede områder kan afgrænses større områder med ensartet kildeafstand og -påvirkningstid.

Mens det er afgørende, at mindre hot spots er identificerede og repræsenteres ved prøver i undersøgelsen, er strengt korrekt afgrænsning i prøvetagningsfelter mindre afgørende i en sandsynlighedsbaseret undersøgelsesstrategi. Det skyldes, at felternes afgrænsning kan revurderes databaseret. Man er derfor ikke henvist til alene at støtte sig på gennemsnitlige koncentrationer af forureninger i beslutningen forurenede eller ikke forurenede, men kan korrigere eventuelle fejlafrænsninger.

3.3.4 Udarbejd prøvetagningsdesign

Prøvetagningsdesignet omfatter fastlæggelse af antal prøver, placering af prøver i prøvetagningsfelter, udvælgelse af dybder for prøvetagning, anvendelse af blandeprøver, samt omfang af kvalitetskontrolprøver.

Der er ikke éntydigt fastlagt et nødvendigt antal prøver til analyse i forbindelse med undersøgelse af en forurenede grund, se Afsnit 2.1.7. For at sikre det nødvendige grundlag for den geostatistiske analyse anbefales det at udtage og analysere prøver fra mindst 10-12 positioner per prøvetagningsfelt, som ønskes selvstændigt vurderet, dog mindst det nødvendige minimumsantal som tidligere beskrevet. Det skal bemærkes, at et utilstrækkeligt prøveantal i værste

fald bevirker, at det geostatistiske værktøj ikke kan gennemføre analysen. I de fleste tilfælde vil analysen kunne gennemføres, men resultatet vil blive udpegning af store felter som muligt forurenet. Det vil i de fleste tilfælde være økonomisk favorabelt at udtage og analysere et større antal prøver, således at der efterfølgende ved hjælp af en reduceret undersøgelsesusikkerhed kan opnås reduktion i omkostninger til bortgravning eller kortlægning som forurenet.

I /8/ beskrives en feltopdelt, systematisk prøvetagning med prøvetagningspunkter placeret i gitter, og samme princip anvises for undersøgelse af diffust forurenede områder i /7/. For punktkilder angives at prøver udtages, hvor forurening forventes /1/, såkaldt vurderingsbaseret prøvetagning. Fordele og ulemper ved forskellige principper for placering af prøvetagningspunkter er detaljeret beskrevet i /41;42/. Ved brug af geostatistisk analyse af resultater kan brug af systematisk prøvetagning med samme afstand imellem prøvetagningspunkter (systematisk i gitter) medføre behov for et stort antal prøver, fordi analysen kræver et vist antal forskellige afstande imellem prøvetagningspunkter. Til en usikkerhedsbaseret undersøgelsesstrategi anbefales det at benytte placering af prøvetagningspunkter som vist i Tabel 5. Det forudsættes, at der i alle tilfælde er foretaget den bedst mulige opdeling af undersøgelsesområdet i prøvetagningsfelter.

Tabel 5
Forslag til princip for placering af prøvetagningspunkter i usikkerhedsbaseret undersøgelsesstrategi.

	Omkring kendt kilde	I punktkildeforurenet prøvetagningsfelt	I diffust forurenet prøvetagningsfelt
Trin 1 ⁵ prøvetagning og analyse	Vurderingsbaseret fra mest forurenet område	Tilfældigt indenfor gitter	Tilfældigt indenfor gitter
Trin 2 prøvetagning og analyse	Vurderingsbaseret fra mest usikre område	Vurderingsbaseret fra mest usikre område	Vurderingsbaseret fra mest usikre område

Det geostatistiske værktøj kan benyttes til at genere tilfældige positioner indenfor specificerede prøvetagningsfelter for at lette udpegning af reelt tilfældige positioner.

Det skal bemærkes, at vurderingsbaseret prøvetagningsdesign ikke er velegnet til beslutning forurenet eller ikke forurenet baseret på gennemsnit, fordi netop denne metode vil give et værst tænkeligt resultat og ikke et gennemsnitligt resultat på grund af udvælgelsen af de forventede mest forurenede positioner til prøvetagning. Derimod er dette design velegnet til sandsynlighedsbaseret undersøgelsesstrategi, fordi den giver et detaljeret kendskab til forureningsfordelingen, afbalanceret af resultaterne for lavt forurenede delområder.

En væsentlig del af prøvetagningsdesign er valg af den rette prøvetagningsdybde. For forventet diffust forurenede grunde benyttes prøvetagning i 0-10 cm, samt ved ikke overfladenær forurening tillige 45-55 cm /7/.

For prøvetagningsfelter med forventning om punktkilder er rette valg af dybde mindre éntydigt. Det foreslås at udtage en prøve per 0,5 m, dog mindst én prøve per lag /1/. I en afgrænsende undersøgelse vil prøvetagning ned til

⁵ Se Figur 21.

uforurene lag som udgangspunkt være nødvendig. I en sandsynlighedsbaseret strategi vil det være mest hensigtsmæssigt at fastlægge et antal horisontale lag, der hver for sig undersøges som beskrevet i Tabel 5, altså for eksempel et lag i 0-10 cm, et lag i 0,5-1,0 m og et lag i 1,5-2,0 m, som derefter kan vurderes separat. Lagenes dybde skal fastlægges ud fra forureningsbillede og anvendelsesdybde. Ligeledes skal udstrækningen af et lag i en bestemt dybde vurderes kritisk. Der bør for eksempel ikke benyttes et lag i 1,5-2,0 m i hele et prøvetagningsfelt, hvis denne dybde kun forventes nært i et meget lokaliseret delområde.

I undersøgelser af forurenede jord benyttes ofte fremstilling af blandeprøver ud fra enkeltprøver, hvor kun blandeprøven analyseres. Denne fremgangsmåde reducerer den del af usikkerheden på enkeltprøver, der har sin oprindelse i stor skala variation, og er som sådan velegnet, når der foretages vurdering af enkeltresultat eller gennemsnit overfor kriterium. Metoden er ikke velegnet i en sandsynlighedsbaseret undersøgelsesstrategi, idet den information om variationen, som benyttes i den geostatistiske analyse, herved går tabt.

3.3.5 Gennemfør Trin 1 af prøvetagning og analyse

Med udgangspunkt i det fastlagte prøvetagningsdesign gennemføres første trin af prøvetagning og analyse. Der henvises til for eksempel /1;8;12;34/ for metoder for prøvetagning og analyser.

Det skal her særligt bemærkes, at en løbende vurdering af opnåede resultater under prøvetagning og analyse giver mulighed for at opnå en langt bedre sikkerhed i forureningsbeskrivelsen. Den mest effektive fremgangsmåde er her at benytte resultater af feltmålinger til løbende justering af prøvetagningslags udstrækning som beskrevet i den såkaldte "triade approach" af den amerikanske miljøstyrelse /43/.

3.3.6 Foretag geostatistisk analyse af opnåede resultater

Med det geostatistiske værktøj beskrives, som vist i Afsnit 3.2, idet der som minimum beregnes:

- Forureningsfordeling
- Sandsynlighed for overholdelse af kriterium
- Kontur for valgt sikkerhed for overholdelse af kriterium
- Absolut usikkerhed på forureningsfordeling

I nogle tilfælde kan den geostatistiske analyse ikke gennemføres. Dette vil typisk være der, hvor der ikke er en sammenhæng imellem afstanden imellem prøvetagningspunkter og forskellen i forureningskoncentration. I en række tilfælde vil dette kunne afhjælpes ved udtagning af flere prøver (Trin 2) eller i nogle tilfælde også ved retvisende opdeling af forureningslag efter dybde.

3.3.7 Vurder forureningsafgrænsning og -omfang

Det vurderes, om forureningsfordelingen giver en afgrænsning af et forurenede område, der svarer til det forventede, og om der er gode grunde, hvis dette ikke er tilfældet. Området uden sikkerhed for at overholde kriterium vurderes for, om det vil være økonomisk eller på anden måde berettiget at fortsætte til Trin 2 for at opnå en bedre afgrænsning af forureningen. Ud fra konturen for sandsynlighed for overholdelse af kriterium vurderes, i hvilket omfang delområder kunne vurderes at overholde kriterium med anden sikkerhed end den valgte. Usikkerhedsfordelingen vurderes for områder med klart behov for

supplerende data i et eventuelt Trin 2, enten til at understøtte vurdering, eller til at forbedre en afgrænsning.

I forbindelse med vurderingen af usikkerheden i Trin 1 kan det være nyttigt at inddrage den samlede prøvetagnings- og analyseusikkerhed, se Kapitel 6. Der kan selvsagt ikke forventes en bedre samlet undersøgelsessikkerhed end det, der betinges af sikkerheden i prøvetagning og analyse. Hvis denne sikkerhed er utilstrækkelig, vil en indsats her være mere nyttig end at inddrage flere prøver i et eventuelt Trin 2 af forureningsundersøgelsen.

3.3.8 Design af supplerende prøvetagning og analyse med geostatistisk værktøj

Hvis det er fundet berettiget og/eller nødvendigt at supplere resultater og vurderinger fra Trin 1 med yderligere resultater i et Trin 2, udpeges de mest usikre delområder fra afbildningen af absolut usikkerhed.

I det geostatistiske værktøj afgrænses disse delområder, og værktøjet genererer tilfældige positioner til prøvetagning. For hver position gættes på en forureningskoncentration ud fra planlæggerens bedste viden, og værktøjet benyttes til at forudsige resultatet af Trin 2. Dette vil ofte resultere i en "bedst tænkelig" beskrivelse af forureningen. Hvis resultatet ikke forbedrer beslutningsgrundlaget, kan flyttes på placering af punkter eller på forventede koncentrationer for at nå et bedre grundlag.

Når der er opnået et tilfredsstillende forventet resultat, kan værktøjet bedes om at generere sandsynlige resultater ud fra den geostatistiske analyse, og igen kan det vurderes, om der på denne måde kan forventes opnået et forbedret beslutningsgrundlag. Denne del af designprocessen vil generere en "sandsynlig" beskrivelse af forureningen.

På den baggrund udvælges de positioner til prøvetagning og analyse i Trin 2, der realistisk kan give den bedste forbedring af beslutningsgrundlaget i form af reduceret usikkerhed og snævrere forureningsafgrænsning.

3.3.9 Gennemfør, analyser og vurder Trin 2

Trin 2 gennemføres som beskrevet ovenfor.

3.3.10 Gentag ud fra vurdering af omkostninger

Såfremt forureningsafgrænsningen efter Trin 2 stadig har uacceptable konsekvenser i form af begrænsninger i arealanvendelse, store oprensningsomkostninger eller store områder kortlagt som forurenede, kan processen gentages.

Hvis en undersøgelse naturligt kan gennemføres i en serie mindre trin, for eksempel ved brug af feltanalyser, kan vurdering af hvert trin og planlægning af det næste med fordel foretages som her beskrevet. I den situation kan det være en fordel at benytte adskillige trin af begrænset omfang, snarere end måske to mere omfattende, idet viden opnået i de enkelte trin derved kan nyttiggøres i planlægningen af de næste.

3.4 Beskrivelse af geostatistisk værktøj

Formålet med udviklingen af det geostatistiske værktøj har været at skabe et værktøj, der baseret på målinger kan beskrive koncentrationen af en

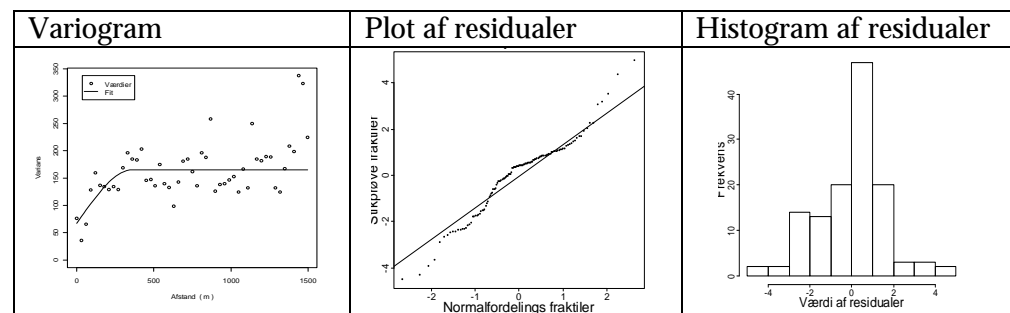
forurening indenfor et afgrænset område. Yderligere har formålet været at kvantificere usikkerheden på denne beskrivelse og dermed sætte brugeren i stand til at vurdere sandsynligheder for overskridelse af kriterier. Disse beregninger er pakket ind i en let tilgængelig Excel brugerflade. Værktøjet er baseret på Excel, samt det offentligt tilgængelige statistiske program R. De bagvedliggende beregningsrutiner er udviklet til at kunne afvikles på en almindelig standard PC. Regnearket er udviklet til brug i Excel 1997-2003 installeret på en Microsoft Windows XP platform. Installation og anvendelsen af programmet er nærmere beskrevet i en manual.

Det geostatistiske værktøj giver mulighed for at beskrive en forureningsfordeling over et areal i én eller flere dybder. Derudover giver værktøjet mulighed for at beregne og optegne konturer for sandsynlighed for overholdelse af et kriterium med specificeret sandsynlighed.

Værktøjets forudsætninger og geostatistiske muligheder er mere indgående beskrevet i manualen. Her skal nævnes tre nøgleparametre for vurdering af anvendeligheden for et givent datasæt: variogram, plot af residualer og histogram af residualer.

Hvis data udviser rumlig korrelation, vil data tæt på hinanden være mere ens og dermed have mindre varians end data langt fra hinanden. Et plot af afstand mod variansen (variogrammet) vil være en voksende kurve. Er dette ikke tilfældet, er der grund til forsigtighed ved anvendelse af værktøjet for et datasæt.

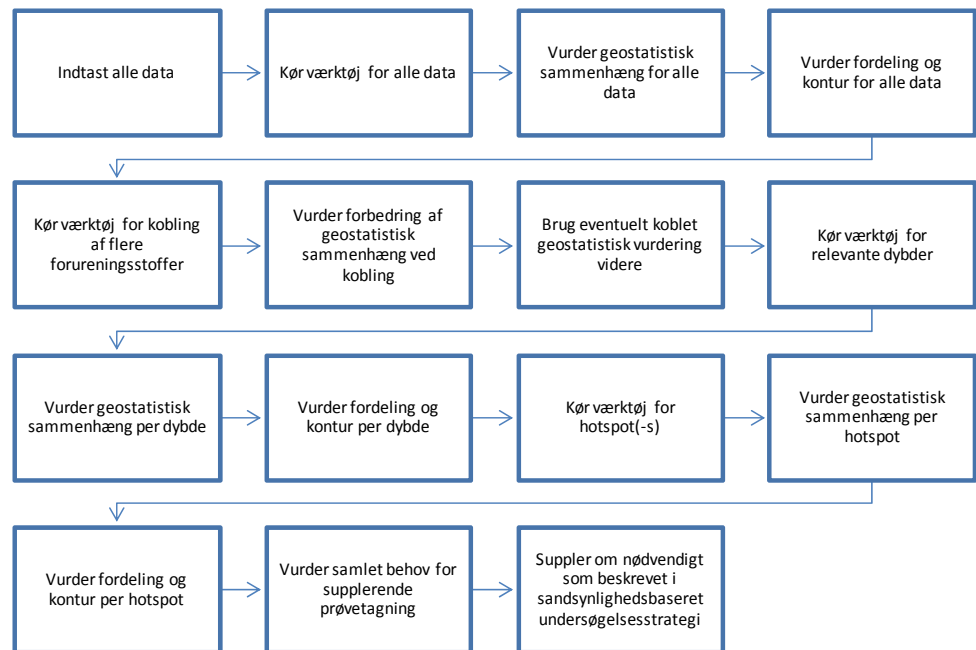
En forudsætning for at kunne "stole på" værktøjets sandsynlighedskonturer er, at residualerne fra beregningerne er normalfordelte. Tilnærmelsesvist normalfordelt er generelt tilstrækkeligt. Dette kan kontrolleres på to plot: et plot af residualer skal være lineært, i hvert tilfælde imellem -1 og 1, og et histogram af residualerne skal vise en fordeling grupperet omkring 0. Et eksempel på et "godt" datasæt er vist i Figur 22.



Figur 22

Eksempel på variogram, plot af residualer og histogram af residualer, data fra skydebane på Sjælland, se Afsnit 3.5 for data.

Det geostatistiske værktøj anvendes til trinnet "Foretag geostatistisk analyse af opnåede resultater" i Figur 21 med deltrin som beskrevet i Figur 23.



Figur 23
Flow i geostatistisk analyse.

De forskellige deltrin er illustreret med eksempler i Afsnit 3.5.

3.5 Eksempler på anvendelse af det geostatistiske værktøj

For at illustrere anvendelsen af det geostatistiske værktøj er der benyttet data fra undersøgelse af tre forurenede grunde: en forurenede industrigrund i Finland, en forurenede byggegrund på Sjælland og en skydebane ligeledes på Sjælland.

På den forurenede industrigrund i Finland er et slaggedepot placeret i et kuperet terræn med 41 prøver udtaget fordelt over området i ni punkter, hvert med prøvetagning i tre til seks dybder. Forureningen er fulgt for bly.

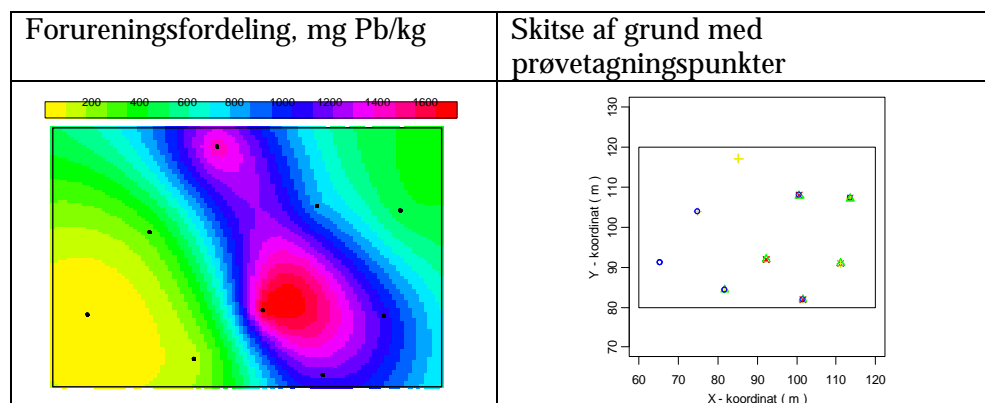
Den forurenede byggegrund på Sjælland er et kystnært, lavtliggende område med organiske sedimenter i nogle delområder. Der er udtaget 167 prøver fordelt over 51 punkter og med fra en til ni dybder prøvetaget i hver position. Forureningen er fulgt for sum af kulbrinter. Der er indres om, at analyseparameteren sum af kulbrinter både kan afspejle forurening med olie (petrogene kulbrinter) og naturligt forekommende organiske stoffer (biogene kulbrinter), se for eksempel: /44/.

Skydebanen på Sjælland er et fladt afgrænset område, som er forurenede med bly og cadmium fra nedskydning af lerdue, således at der er et centralt område med højere forurening end omgivelserne. Der er udtaget 126 prøver på 79 positioner med op til tre dybder prøvetaget i hver position. Forureningen er her fulgt for bly.

Hver grund er benyttet til at illustrere forskellige aspekter af værktøjets anvendelse, og de benyttede data er vist i Bilag A.

3.5.1 Valg af prøvetagningspositioner

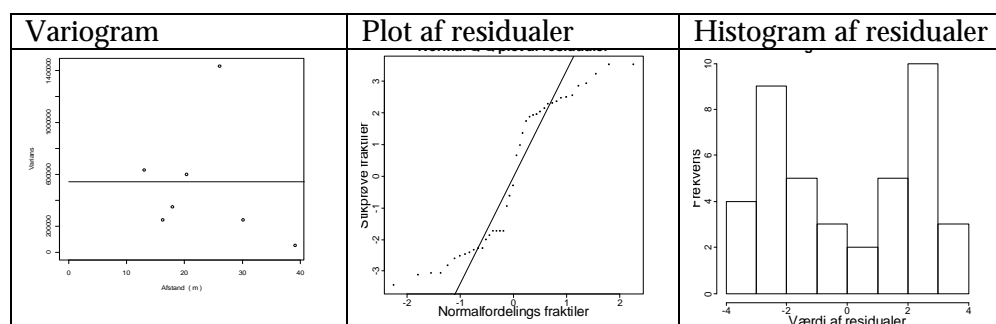
I Figur 24 er vist den forudsagte forureningsfordeling for grunden for den finske industrigrund, hvor alle dybder er inddraget.



Figur 24
Fordeling af blykoncentrationer samt prøvetagningspunkter for den finske industrigrund.

Det samlede billede er her, at det meste af området vil udvise koncentrationer over et kriterium på for eksempel 400 mg Pb/kg. Et eftersyn af variogram og plot/histogram af residualer tyder dog ikke på den nødvendige sammenhæng imellem forskel på koncentration imellem prøvepar og afstanden imellem dem, se Figur 25.

En medvirkende årsag til den manglende sammenhæng kan være prøvetagningspositionernes relativt systematiske placering og eventuelt antal prøvepunkter, sammenlign Figur 22, hvor 79 prøvetagningspositioner indgår tilfældigt fordelt.

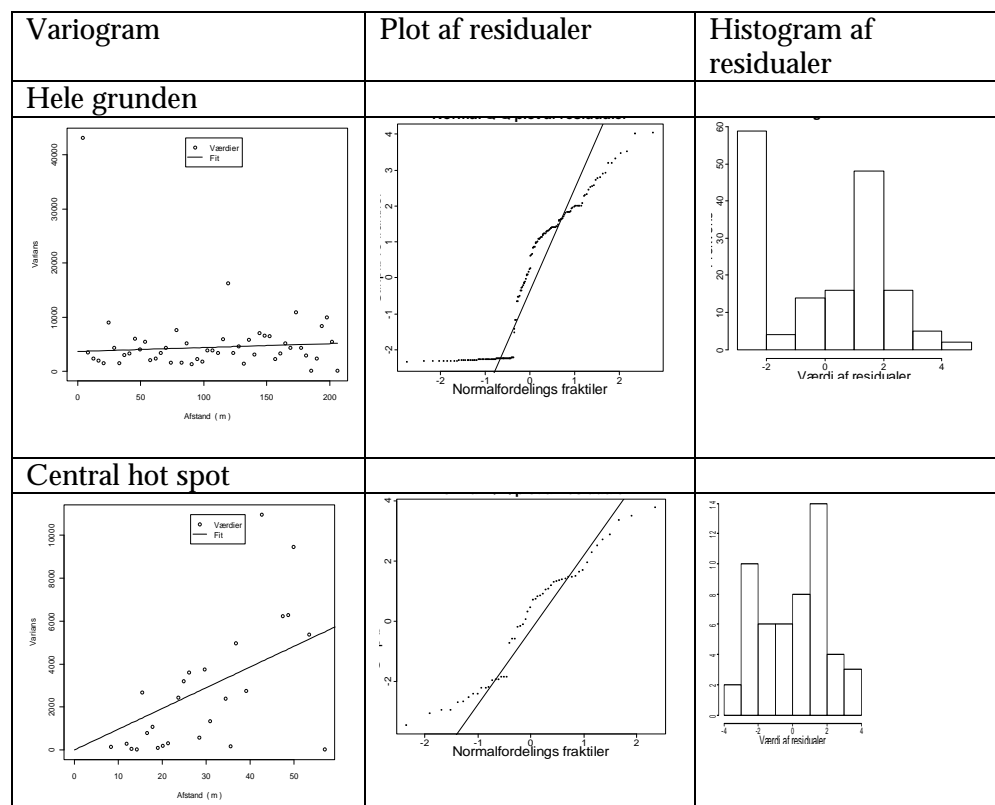


Figur 25
Variogram, plot af residualer og histogram af residualer for den finske industrigrund.

Eksemplet viser, at der kan være grund til forsigtighed i fortolkning af den geostatistisk baserede forureningsfordeling, når der indgår få prøvetagningspositioner i systematisk placering.

3.5.2 Opdeling i prøvetagningsfelter

I Figur 26 er vist variogram for den forurenede byggegrund på Sjælland, hvor alle dybder er inddraget.

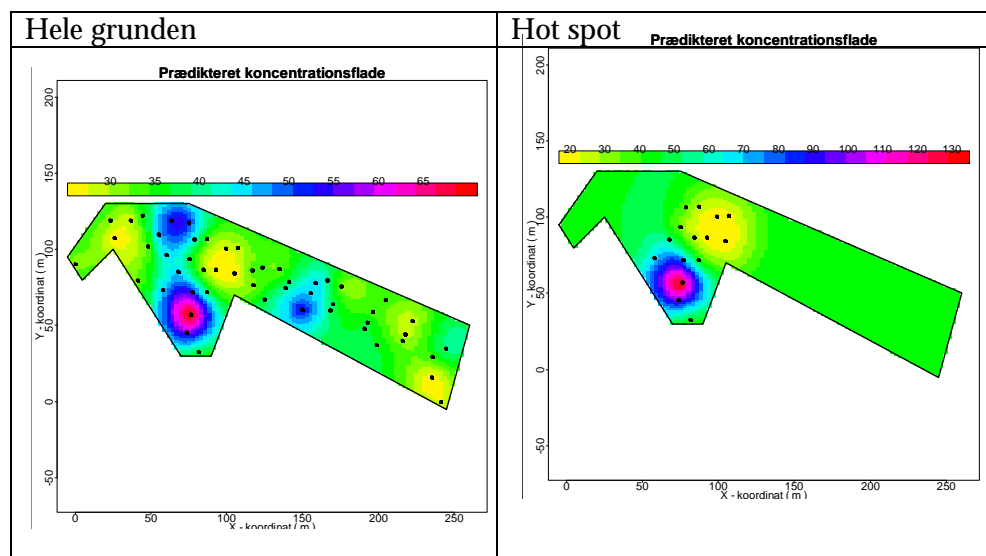


Figur 26
Variogram samt prøvetagningspunkter for den forurenedede byggegrund på Sjælland, alle dybder, hele grunden og centralt hot spot.

Det geostatistiske værktøj viser en meget begrænset sammenhæng imellem forskel på koncentration imellem prøvepar og afstanden imellem dem, se den meget flade kurve i variogrammet i Figur 26. Der er altså grund til at være forsigtig i tolkningen af den geostatistiske vurdering. Som et kuriosum kan nævnes, at resultatet for ét prøvepunkt er udeladt i den geostatistiske vurdering, fordi dette forhindrede gennemførelsen, formodentlig som et sidste halmstrå, der knækkede den nødvendige sammenhæng imellem koncentrationsforskelle og afstand.

Betragtes en forhåndsafgrænset hot spot alene, se Figur 26, viser variogrammet en tydeligere sammenhæng, plot af residualer er tæt på lineær fra -1 til 1, og histogrammet udviser mindre skævhed omkring 0 end for hele grunden. Der kan altså lægges mere vægt på den geostatistiske vurdering for hot spot alene end for hele grunden. Dette skyldes formodentlig, at det færre antal prøvetagningspunkter for hot spot mere end opvejes, geostatistisk, af en mere ensartet kilde (reelt én kilde) og dermed en bedre sammenhæng imellem afstand imellem prøvetagningspunkter og forskelle i koncentrationer.

Den geostatistiske vurdering af hot spot alene giver også antydningvis en mere afgrænset fordeling af forureningen, se Figur 27.



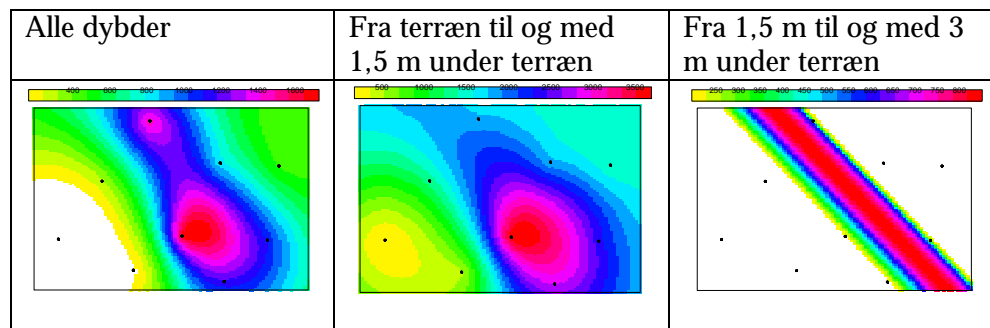
Figur 27

Fordeling af mg sum af kulbrinter/kg på hele den forurenede byggegrund på Sjælland og alene vurderet ud fra hot spot, alle dybder.

Eksemplet viser, at en omhyggelig opdeling i prøvetagningsfelter med samme kilde inden geostatistisk vurdering giver den mest pålidelige vurdering.

3.5.3 Valg af prøvetagningsdybde

I Figur 28 er vist sandsynligheden for overholdelse af 400 mg Pb/kg for alle prøvetagningsdybder, for dybder ned til og med 1,5 m og for dybder fra 1,5 m og ned.



Figur 28

Kontur for overholdelse af 400 mg Pb/kg med 95% sandsynlighed for den finske industrigrund, forskellige prøvetagningsdybder.

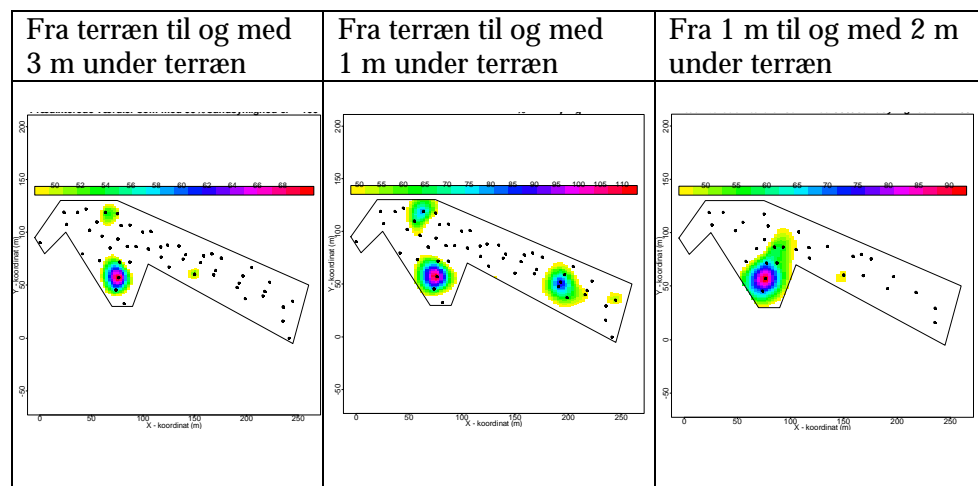
Mens billedet med alle dybder viser en del af området, som med 95% vil være under kriteriet på 400 mg Pb/kg, vil hele området blive betragtet som forurenet med kun prøver fra de øverste 1,5 m inddraget.

Inddrages kun de dybere prøver, er alene et diagonalt område at betragte som forurenet, svarende til den centrale del af slaggedeponiet. Plottet af forureningsfordelingen og sandsynlighedskontur svarer ikke til et billede, som man intuitivt ville forvente med tilfældige afgrænsninger. Udelukkes to prøvetagningspunkter i dybden 1,5 m, tillader det geostatistiske værktøj ikke beregningerne. Tilliden til fordelingen i de dybere lag bør altså være begrænset.

Det samlede billede med udbredt overfladeforurening og mere afgrænset forurening i dybder svarer til det, der kan forventes for et område med en slaggedeponering som beskrevet.

Eksemplet viser, at en udvælgelse af dybder til vurdering, der ud fra forureningshistorie forventes at have sammenhæng, giver den mest meningsfulde fortolkning af forureningen.

I Figur 29 er for byggegrunden på Sjælland vist sandsynligheden for overholdelse af 100 mg sum af kulbrinter/kg for prøvetagningsdybder ned til og med 3 m, for dybder ned til og med 1 m og for dybder fra 1 m til og med 2 m.



Figur 29

Kontur for overholdelse af 100 mg sum af kulbrinter/kg med 95% sandsynlighed for byggegrunden på Sjælland, forskellige prøvetagningsdybder.

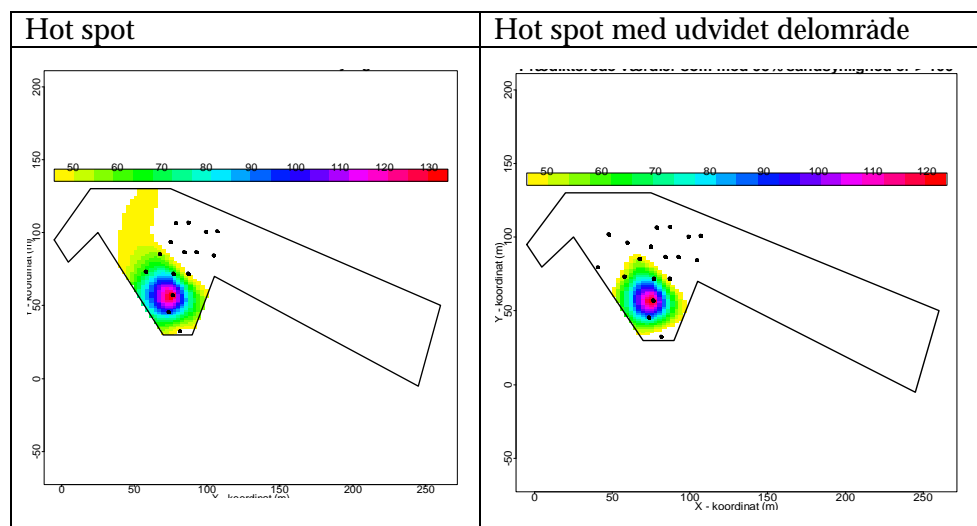
For prøvetagningsdybder 2 til 3 m under terræn tillader det geostatistiske værktøj ikke, at der beregnes forureningsfordeling for grunden, formodentlig fordi antallet af datapunkter i dette interval er for lille.

Det samlede billede er et område med tre forurenede delområder, hvoraf de to primært er i den øverste m, mens det sidste er mest omfattende i 1-2 m under terræn. Dette billede svarer til, hvad der kunne forventes for et område med en overfladeforurening med olie i de to delområder, samt et dybere lag med højt indhold af organisk stof og derfor høje koncentrationer af biogene kulbrinter i det sidste delområde, se også /44/.

Eksemplet viser, at en omhyggelig geostatistisk vurdering opdelt på dybder kan give information til forureningsafgrænsning og om mulige forureningsveje eller -kilder.

3.5.4 Udvidelse af undersøgelsesområde

Konturen for overholdelse af 100 mg sum af kulbrinter/kg for den centrale hot spot på byggegrunden på Sjælland viste, se det gule delområde på Figur 30, at et delområde udenfor hot spot ikke med 95% sikkerhed kunne betragtes som ikke forurenat. Der var ikke medtaget data for delområdet. I denne situation ville man vælge at inddrage prøvetagningspunkter fra dette delområde for at forbedre afgrænsningen. I Figur 30 er inddraget yderligere tre prøvetagningspositioner med i alt ni prøvetagningspunkter, én til seks dybder per position. Inddragelsen af de tre punkter giver en bedre afgrænsning med et mindre område vurderet som forurenat.



Figur 30

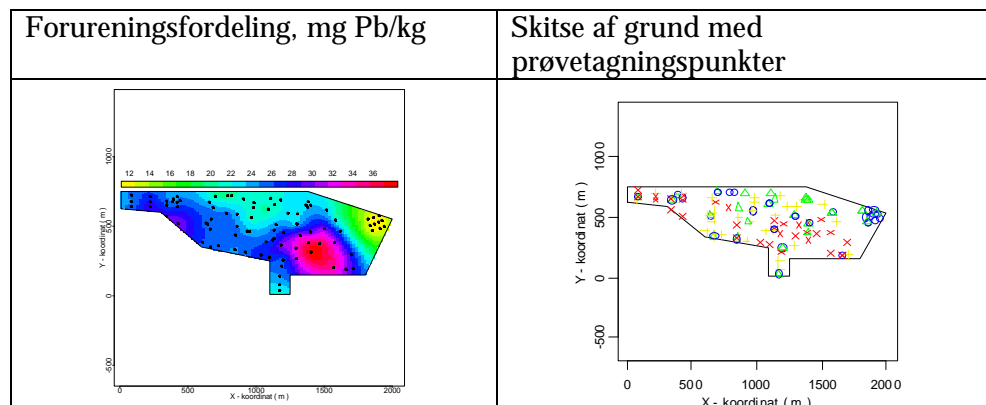
Kontur for overholdelse af 100 mg sum af kulbrinter/kg med 95% sandsynlighed for byggegrunden på Sjælland, hot spot og hot spot med udvidet delområde.

Eksemplet viser, at en begrænset udvidelse af delområdet baseret på den geostatistiske analyse kan give en forbedring af afgrænsning.

3.5.5 Valg af supplerende prøvetagningspunkter

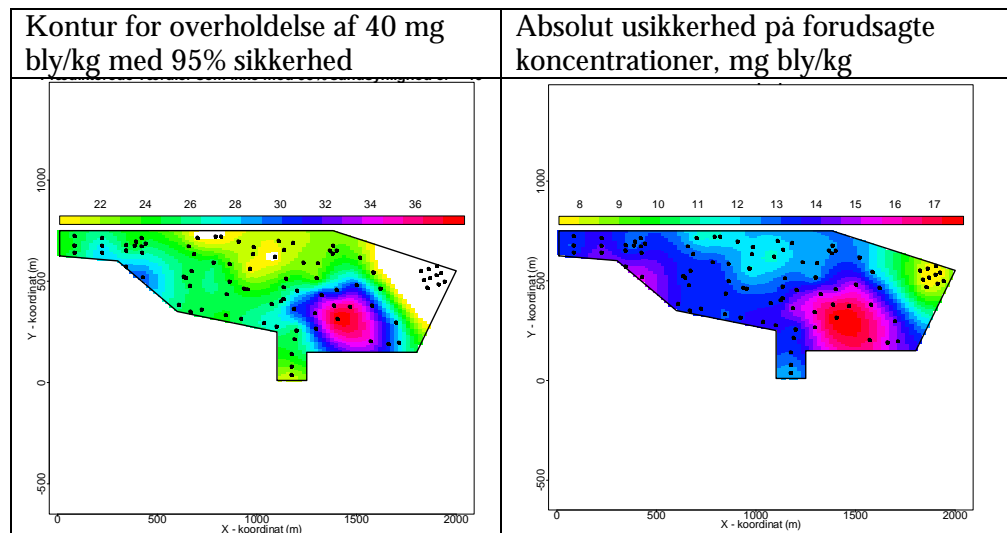
I Figur 31 er vist den forudsagte forureningsfordeling for grunden med skydebanen på Sjælland, hvor alle dybder er inddraget. På skitse af grunden med prøvetagningspunkter er punkter anført med forskellige symboler, som viser, hvilken fraktile af punkternes fordeling de hver især tilhører (for eksempel øverste 25%).

Ønskes en 95% sikkerhed for delområder med <40 mg bly/kg, bliver næsten hele grunden vurderet som forurenet, se Figur 32. Figuren viser også, at store områder markeret med lyst grønt i konturplottet forudsiges væsentligt under 40 mg bly/kg, men har en stor usikkerhed på forudsigelsen (mørkt blåt på usikkerhedsplottet). Vurderingen tyder altså på, at der kan vindes i afgrænsning af forureningen ved at inddrage flere prøvetagningspunkter.



Figur 31

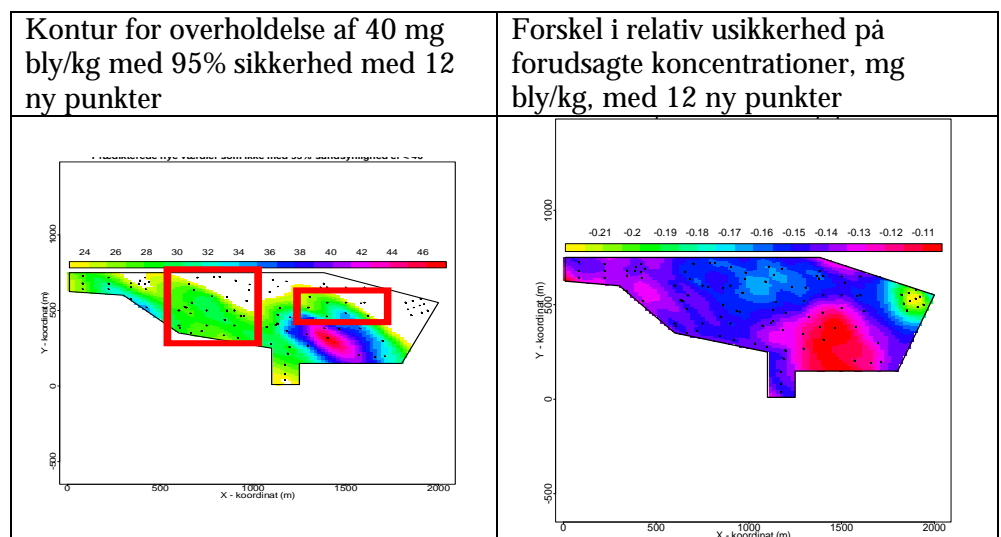
Fordeling af blykoncentrationer samt prøvetagningspunkter for grunden med skydebane på Sjælland.



Figur 32
Kontur for overholdelse af 40 mg bly/kg med 95% sikkerhed og absolut usikkerhed på forudsagte koncentrationer for grunden med skydebane på Sjælland.

Benyttes den geostatistiske analyse til at forudsige blykoncentrationen i 12 punkter, fordelt i et net med seks punkter i hver af de to rødt markerede områder, forbedres afgrænsningen betydelig, således at et større område forudsiges uforurenet, Figur 33. Den relative usikkerhed på forudsigelsen reduceres ligeledes betydeligt, særligt i det område, hvor de supplerende prøvetagningspunkter er lagt (det blå område).

Eksemplet viser, hvordan det geostatistiske værktøj kan benyttes til at planlægge supplerende prøvetagning på en måde, så man kan forvente en bedre afgrænsning af forureningen.

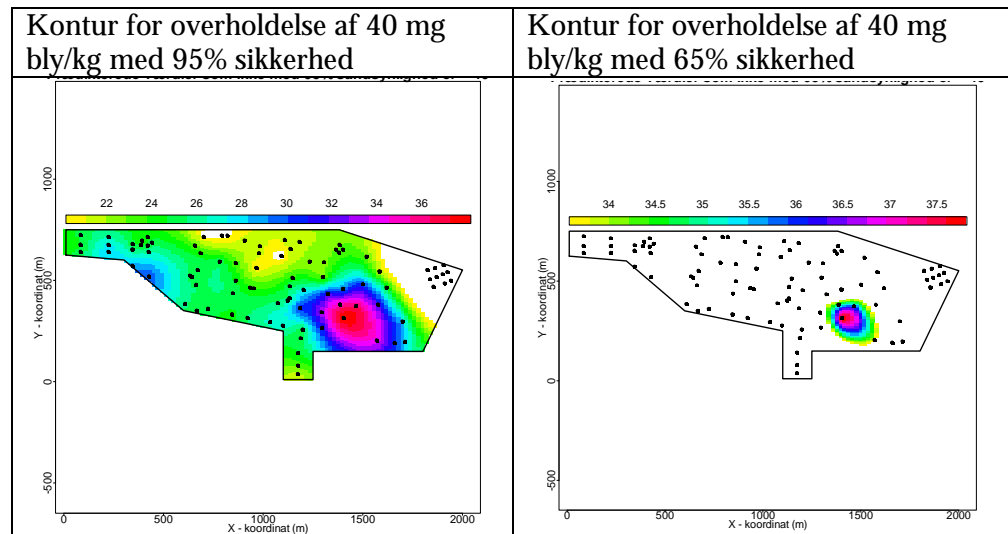


Figur 33
Kontur for overholdelse af 40 mg bly/kg med 95% sikkerhed og forskel i relativ usikkerhed på forudsagte koncentrationer, begge 12 ny datapunkter på grunden med skydebane på Sjælland.

3.5.6 Accept af reduceret beslutningssikkerhed

For beslutning om ikke følsom arealanvendelse og en grund, hvor grundvandsforurening ikke et relevant spørgsmål, er i Figur 34 vist kontur for

overholdelse af 40 mg bly/kg med 95% sikkerhed sammen med den tilsvarende kontur for 65% sikkerhed.



Figur 34

Kontur for overholdelse af 40 mg bly/kg med 95% og 65% sikkerhed for grund med skydebane på Sjælland.

Eksemplet viser, at kan en lavere beslutningssikkerhed accepteres, da kan i dette tilfælde fås, at et mindre område bliver vurderet som forurenet.

4 Grundvand

Med hensyn til risiko for grundvandet er projektets fokus på afgrænsende undersøgelser, altså typisk undersøgelser af grunde, der tidligere er kortlagt på vidensniveau 2 og inden en beslutning om oprydning foretages. Denne type undersøgelser kaldes normalt "videregående undersøgelser" eller "supplerende undersøgelser".

4.1 Rammer for undersøgelser af grundvandsforurening

Selvom fokus er omfang for og usikkerhed af afgrænsning af grundvandets forurening, er det indledningsvist nyttigt at gøre sig klart, i hvilken sammenhæng denne del af undersøgelserne indgår. Undersøgelser af en forurenede grund kan have forskelligt formål og foregår typisk i separate delundersøgelser:

- Af- eller bekræftelse af risiko for grundvandet, indledende undersøgelser
- Afgrænsning af grundvandets forurening, supplerende undersøgelser
- Monitering af forureningens udvikling, efterkontrol

Delundersøgelserne forgår normalt i den angivne rækkefølge, men for nogle typer af forurening forsøges første og andet formål kombineret til én delundersøgelse.

Mens et kritisk element i undersøgelser af jordforurening er sikkerheden for identifikation og afgrænsning af et begrænset forurenede område, er det tilsvarende kritiske element for en undersøgelse af forurenede grundvand, om en eventuel forureningsfane identificeres og afgrænses.

4.1.1 Risiko for grundvandet, indledende undersøgelser

Undersøgelser inden kortlægning af en forurenede grund på vidensniveau 2 skal fastslå, om der er tale om en forurening med skadelig virkning for mennesker og miljø svarende til de tidligere udførte registreringsundersøgelser /7/. Der er, som tidligere nævnt, normalt inden undersøgelsen af grunden foretaget en indsamling af viden "fra skrivebordet", der beskriver forureningens årsager og udbredelse, kortlægning på vidensniveau 1.

Hovedvægten i de indledende undersøgelser er på at konstatere jordforurening og vurdere risikoen herfra, idet samme kvalitetskriterier og risikovurderingsmetoder som ved undersøgelser inden oprydning /1/ benyttes. Risikoen for grundvand og indeklima skal i princippet inddrages. Erfaringen med de tidligere registreringsundersøgelser var, at der kun i få tilfælde blev udtaget og analyseret grundvandsprøver /31/. For indledende undersøgelser anbefales, at eventuelle grundvandsprøver udtages umiddelbart nedstrøms for forureningskilden med henblik på fastlæggelse af kildestyrke til risikovurdering /1/.

Undersøgelserstrategien ved kortlægningsundersøgelse til vidensniveau 2 og indledende undersøgelser inden oprydning vil altså typisk omfatte karakterisering af jordprøver, eventuelt suppleret med terrænnære

grundvandsprøver umiddelbart nedstrøms for forureningskilden med henblik på af- eller bekræftelse af forureningsrisiko for grundvandet, samt fastlæggelse af eventuel kildestyrke herfor.

Risikoen for grundvandet vurderes normalt ved beregning af risiko for overskridelse af grundvandskriterier 1 års grundvandstransport nedstrøms for grunden, dog højst 100 m fra grunden. Beregningerne er i én dimension og foretages som foreskrevet i /1/, for eksempel ved hjælp af et regnearkbaseret værktøj, JAGG (jord, afdampning, gas, grundvand) /10/. Beregning af forureningens udbredelse efter disse principper er valgt som konservativ, det vil sige at forureningens udbredelse typisk overvurderes /1/.

4.1.2 Afgrænsning af grundvandets forurening, supplerende undersøgelser

Inden beslutning om oprydning/afværge gennemføres supplerende undersøgelser, der skal beskrive og afgrænse forureningen af jorden og grundvandet, herunder skal risikoen for forurening af primært grundvand vurderes /1/. En række branchevejledninger foreskriver, at der, hvis der er terrænnært grundvand, udtages prøver heraf fra mindst én boring, se for eksempel: /2/, mens der for risikovurdering med inddragelse af naturlig nedbrydning er krav om mindst tre grundvandsboringer på en strømlinje nedstrøms forureningskilden, hvortil kommer boringer til fastlæggelse af forureningens omfang /1/.

Til afgrænsning af grundvandsforurening ved fyld- og lossepladser er tidligere opstillet forslag til afgrænsningsstrategi /45/, der kræver målinger i mindst tre korte boringer indenfor forureningsfanen og mindst tre korte boringer udenfor fanen. Forslaget kræver både horisontal og vertikal afgrænsning, samt foreskriver at fokusere afgrænsningen på mobile og persistente stoffer.

Undersøgellesstrategien ved supplerende undersøgelser vil altså typisk omfatte et antal grundvandsboringer, der afhænger af forholdene på den forurenede grund. De største krav til sikkerhed i afgrænsningen stilles ved inddragelse af forureningsstofferne naturlige nedbrydning i risikovurdering og beslutning om oprydning og afværge. I princippet skal forureningen af grundvandet kunne afgrænses éntydigt ud fra undersøgelsens resultater.

Efter beskrivelse og afgrænsning af grundvandsforureningen kan der være behov for at justere risikovurderingen foretaget som led i de indledende undersøgelser.

4.1.3 Monitorering af forureningens udvikling, efterkontrol

Efterlades forurening af grundvandet, kræves monitorering som beskrevet ovenfor mindst to gange om året i tre år /1/, hvor tilrettelæggelse af monitoringsstrategien forudsætter en forudgående afgrænsning af grundvandsforureningen sideværts og nedstrøms. Formålet med denne strategi er dels at sikre imod spredning af forureningen, dels at eftervise forureningsreduktion ved naturlige nedbrydningsprocesser /46/.

Kontrol af forureningsspredning er også en del af kontrollen med fyld- og lossepladser, hvor der tidligere er opstillet forslag til monitoringsstrategi med en række boringer filtersat over hele det påvirkede grundvandsmagasin og orienteret på tværs af strømningsretningen i en afstand på 50-300 m fra forureningskilden og en højeste afstand imellem boringerne på 50 m /47/. Denne monitoringsstrategi er mest velegnet, hvis kilden og grundvandsforureningen ikke er undersøgt og afgrænset. I en variant af

strategien placeres borerne på tværs af strømningsretningen nedstrøms for lossepladsen med mindst indbyrdes afstand, hvor risikoen for udsivning er størst /48/. Hvis grundvandsforureningen er afgrænset foreslås benyttet en monitoringsstrategi med en opstrøms boring, en eller flere borer henholdsvis i udkanten af forureningsfanen og nedstrøms for forureningsfanen med henblik på at sikre, at fanens udbredelse ikke øges eller endda indskrænkes /48/.

4.2 Forureningsafgrænsning for grundvand

Som beskrevet tidligere er der to hovedformål med denne del af grundvandsundersøgelsen (herefter kaldet afgrænsningsundersøgelsen):

- Anslå forureningskoncentrationen i en fane
- Afgrænse fanen og beskrive forureningskoncentrationen i fanen

Disse hovedformål i afgrænsningsundersøgelsen lægges til grund i det følgende. Det første formål forfølges ved at beskrive forurenings sammensætning og styrke i kildeområdet (kildestyrke), samt at beregne udbredelse. Det andet formål forfølges ved at gøre grænsen til uforurenat grundvand kendt. Der kan endvidere være behov for yderligere beskrivelse af forureningsfordeling indenfor den forurenede del for nogle formål med undersøgelsen (påvisning af naturlig nedbrydning, beregning af total forureningsmængde).

4.2.1 Fuldstændig forureningsafgrænsning

En grundvandsforurening er fuldstændigt afgrænset i forhold til uforurenat grundvand, hvis der i en boring opstrøms kilden, samt i tilstrækkeligt mange borer nedstrøms og sideværts for kilden ikke findes forurening. I praksis vil det ofte ikke være muligt at foretage en sådan fuldstændig afgrænsning.

Hvis borerne placeres langt fra kilden, skal de samtidig ligge tæt for ikke at give risiko for passage af fanen imellem borer. Samtidig vil afgrænsningsboringer langt fra kilden give et meget stort volumen af grundvand som forurenat. Man kan sige, at afgrænsningen er omfattende og med lille sikkerhed.

Hvis borerne placeres tæt på kilden, vil risikoen for forureningsforekomst være stor, således at der skal suppleres med flere borer i større afstand. Man kan dermed få en mere præcis afgrænsning med stor sikkerhed, men også med store omkostninger.

Afgrænsningen vil typisk blive beskrevet i form af isokoncentrationskurver, der tegnes baseret på en visuel vurdering. For eksempel vil en isokurve for 10 µg/L ethylbenzen blive tegnet, således at den adskiller alle prøvetagningspunkter med højere koncentrationer fra alle med lavere koncentrationer, "med blød hånd" og eventuelt under hensyntagen til grundvandets strømningsretning og hydrauliske gradient.

Ved hjælp af almindelige geostatistiske værktøjer vil man kunne beregne en forureningskontur og en tilhørende usikkerhed, men denne usikkerhed vil blive meget stor, fordi viden om kildeplacering, udbredelsesretning og -hastighed ikke inddrages i vurderingen.

4.2.2 Beregning af forureningskoncentration

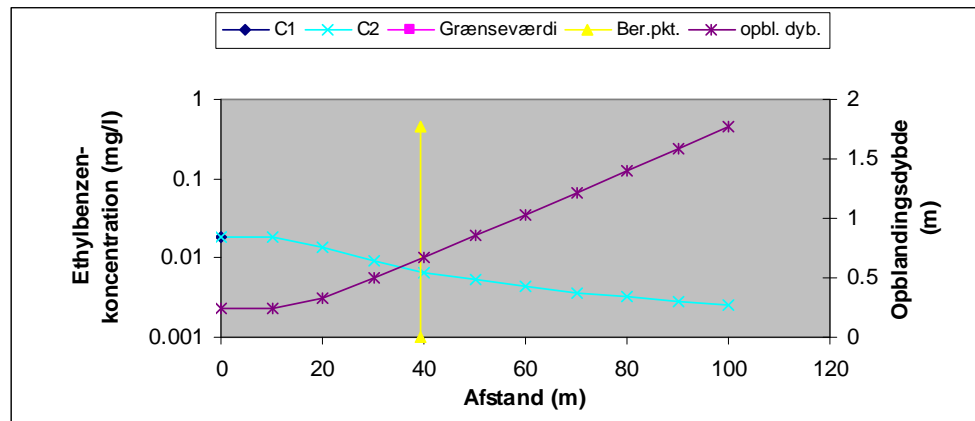
Beregning af forureningskoncentration foretages normalt i forbindelse med risikovurderingen i de indledende undersøgelser ved hjælp af JAGG beregningsredskabet baseret på udbredelse i strømningsretning og opblanding i dybden. I Tabel 6 er vist parametre for et grundvandsmagasin i mellemkornet sand, hvor en 4 m bred kilde til forurening med ethylbenzen er identificeret.

Tabel 6

Parameterværdier for kildestyrke, geologi og hydrogeologi benyttet som for et forurennet grundvandsmagasin, modificeret fra /1/.

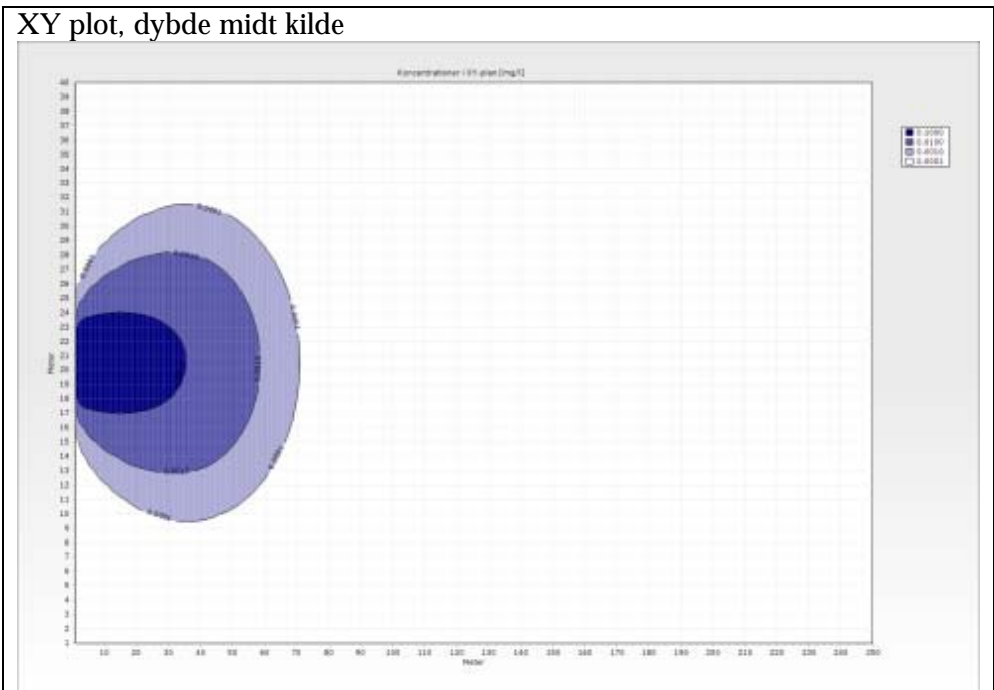
Parameter	Værdi	Kommentarer
Kildebredde (m)	4	Ingen
Kildehøjde (m)	0,5	Ingen
Forureningsstof	Ethylbenzen	Ingen
Kildestyrke (mg/L)	0,090	Ingen
		Ingen
Bredde filter (m)	0,5	Ingen
Midte filter (m)	0,25	Ingen
Længde magasin (m)	250/100	Brugt ved analytiske beregninger/brugt ved sandsynlighedsberegninger
Bredde magasin (m)	40	Ingen
Dybde magasin (m)	10	Ingen
Hydraulisk ledningsevne (m/s)	$5 \cdot 10^{-5}$	Værdi for mellemkornet sand
Gradient (-)	$5 \cdot 10^{-3}$	Ingen
Dispersivitet (x, langs strømlinie, m)	4	Beregnet som 10% af udbredelseslængde for tærskelværdi i JAGG
Dispersivitet (y, på tværs af strømlinie, m)	0,4	Beregnet som 10% af dispersivitet i x retning
Dispersivitet (z, dybde, m)	0,04	Beregnet som 10% af dispersivitet i z retning.
Nedbrydningsrate (dag ⁻¹)	0,002	Laveste anaerobe nedbrydnings-hastighed
Volumenrumvægt, ρ_b (kg/L)	1,46	Værdi for sand
Organisk stofindhold (-)	0,001	Værdi for sand
Porøsitet (-)	0,45	Værdi for sand
Effektiv porøsitet (-)	0,2	Værdi for sand
Ethylbenzen fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$ (-)	3,2	Ingen
Indhold af organisk stof, f_{oc} (-)	0,001	Ingen
Tilbageholdelsesfaktor (-)	2,0	Beregnet ud fra parametrene

Beregning med JAGG15 angiver en årlig transport på 40 m, uden nedbrydning og tilbageholdelse, med en beregnet koncentration i denne afstand på 0,0068 mg ethylbenzen/L og opblanding indenfor 0,7 m af magasinet, se Figur 35. Inddrages tilbageholdelse og nedbrydning også, reduceres den beregnede koncentration i afstand 1 års transport til 0,0016 mg ethylbenzen/L.

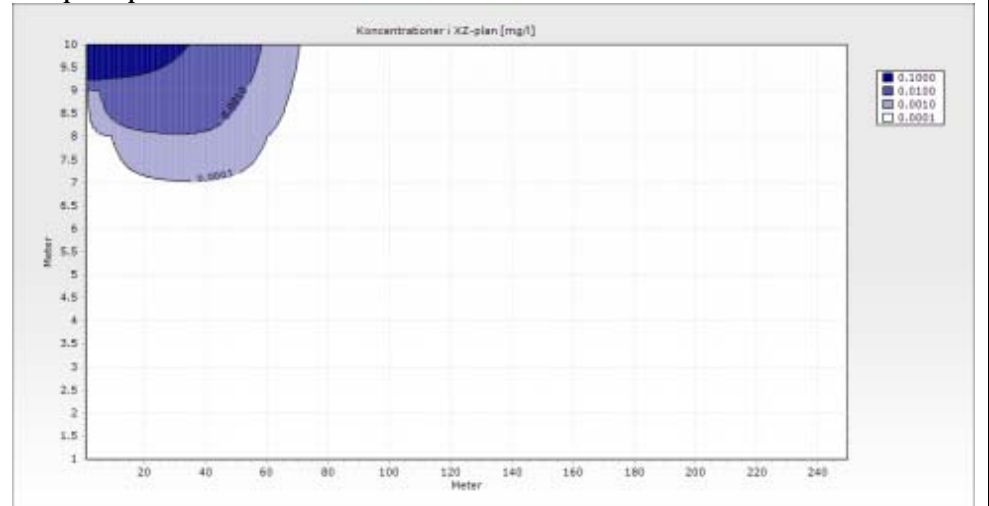


Figur 35
 Afbildning af JAGG15 beregnede koncentrationer og opblanding for forurenset grundvandsmagasin, data som i Tabel 6.

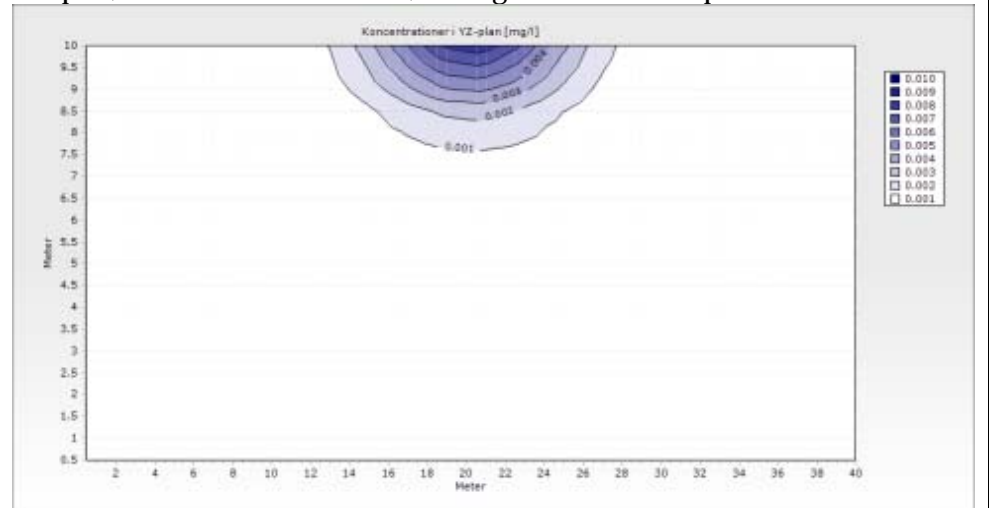
Beregningen i JAGG er baseret på transport i én dimension, hvor dog opblandingen i dybden inddrages. Benyttes nu en beregning baseret på modellering i tre dimensioner med det udviklede 3D-værktøj fås en udbredelse som vist i Figur 36.



XZ plot, position midt kilde



YZ plot, tværsnit 40 m fra kilde, 1 års grundvandstransport



Figur 36

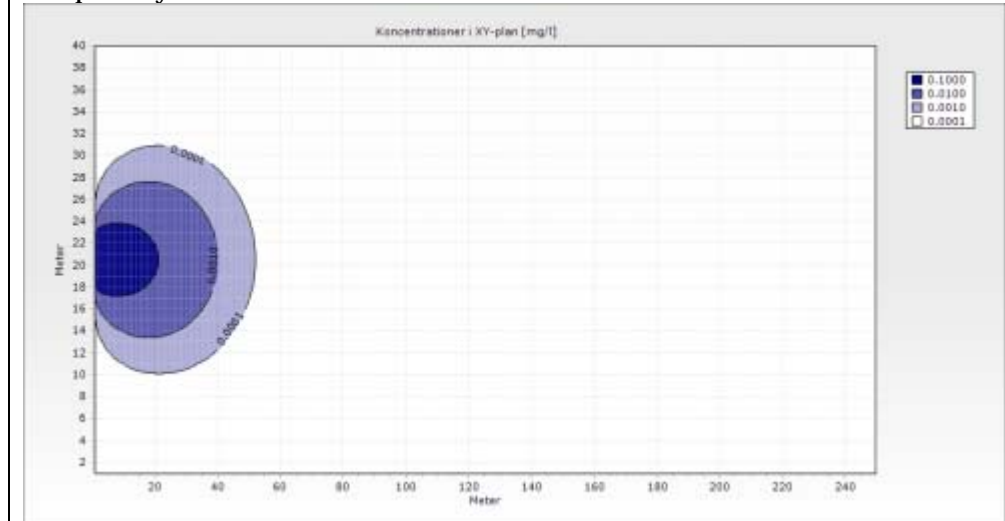
Afbildning af 3D-beregnete koncentrationer for forurenset grundvandsmagasin, data som i Tabel 6.

Beregningerne giver en koncentration på 0,005-0,008 mg ethylbenzen/L i de øverste m af magasinet, altså indenfor samme interval som beregnet med JAGG15.

4.2.3 Beregning af forureningskoncentration med tilbageholdelse

Inddrages tilbageholdelsen i beregningerne fås den forventede reduktion i fanekoncentrationer og -størrelse, både i og på tværs af strømningsretningen, Figur 37.

XY plot, dybde midt kilde



Figur 37

Afbildning af 3D-beregnete koncentrationer for forurenset grundvandsmagasin med tilbageholdelse, data som i Tabel 6.

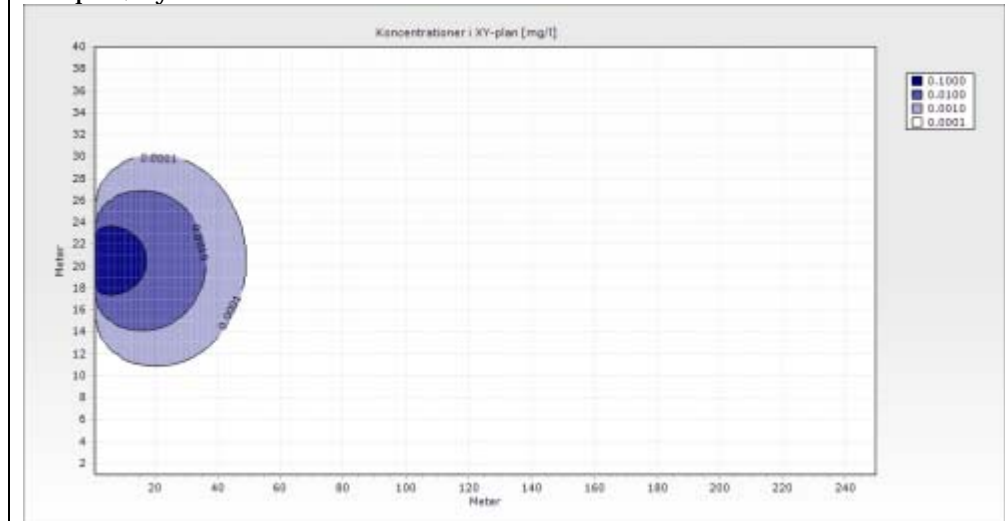
4.2.4 Beregning af forureningskoncentration med nedbrydning

Inddrages også nedbrydning i beregningerne, fås den forventede yderligere, men relativt begrænsede (den benyttede nedbrydningsrate er lav) reduktion i fane koncentrationer og -størrelse, både i og på tværs af strømningsretningen, Figur 38.

Beregningerne af grundvandskoncentrationer og faneudbredelse er som vist alene baseret på generelt accepterede parameterværdier kombineret med stedspecifikke oplysninger om kildekonzentrationen og generelt tilgængelige oplysninger om geologi og hydrogeologi. Kildekoncentrationen er her målt, men kunne også være beregnet ud fra jordkoncentrationer. Der er altså tale om beregninger, der typisk kan udføres som sidste del af indledende undersøgelser med risikovurdering.

Fremgangsmåden tillader ikke at inddrage separat forureningsfase, hverken tung eller let. Områder med separat fase må derfor behandles som en del af forureningskilden.

XY plot, dybde midt kilde



Figur 38

Afbildning af 3D-beregnete koncentrationer for forurenede grundvandsmagasin med tilbageholdelse og nedbrydning, data som i Tabel 6.

4.2.5 Trinvis, usikkerhedsbaseret forureningsafgrænsning

I forureningsafgrænsningen under supplerende undersøgelser vil der kunne opnås supplerende oplysninger om geologi, hydrogeologi og forureningskoncentrationer ud fra geologiske beskrivelser af boreprøver, pejling og eventuelt testning af boringer, samt kemisk analyse af vandprøver. De supplerende oplysninger er behæftet med usikkerhed, som beskrevet i Kapitel 2, og som nævnt i Afsnit 4.2.1 vil en fuldstændig forureningsafgrænsning reelt ikke være mulig. Derfor beskrives videre frem forureningsafgrænsning baseret på en beslutning om overholdelse af et kriterium med fastlagt sikkerhed. Afgrænsningen foretages ved at optegne kurver, som grundvandsforureningen med en given sikkerhed, for eksempel 65% eller 95%, ikke når ud over.

Konkret benyttes for ethylbenzen i eksemplet beskrevet i Tabel 6 en tærskelværdi på 0,001 mg ethylbenzen/L. Der er ikke formuleret et grundvandskvalitetskriterium for ethylbenzen, men kriteriet for de beslægtede alkylbenzener er 0,001 mg/L /11/, som derfor benyttes.

Usikkerhedsanalysen i 3D-værktøjet giver mulighed for at inddrage flere grupper af parametre, se Tabel 7.

De geologiske og hydrogeologiske parametre har typisk været anslået ud fra regionale og generelle oplysninger i de indledende undersøgelser, men vil normalt blive revurderet baseret på de supplerende undersøgelser.

Kildeparametrene har typisk været indsamlet i forbindelse med de indledende undersøgelser, men særligt beskrivelsen af kildekonzentrationen vil ofte blive forbedret under de supplerende undersøgelser.

Beregningsparametrene vil som hovedregel ikke blive målt, men blive udledt fra for eksempel numerisk modellering i de tilfælde, hvor en sådan indgår i de supplerende undersøgelser. Analyse af sedimentprøver til forbedret beregning af tilbageholdelse og nedbrydningstest til forbedret beregning af nedbrydningshastighed kan udføres, men dette sker kun sjældent.

Tabel 7

Parametergrupper omfattet af 3D-værktøjets usikkerhedsanalyse.

Parametergruppe	Parameter	Typisk under-søgelsesfase	Typisk under-søgelsesmetode
Geologiske/hydro-geologiske parametre	Hydraulisk ledningsevne	Supplerende	Prøvepumpning eller slug test
	Hydraulisk gradient		Pejling
	Udbredelsesretning		Pejling
Kildeparametre	Kildekonzentration	Indledende	Prøvetagning og analyse
	Tid siden forureningsstart		Indsamling af historiske oplysninger
Beregnings-parametre	Dispersiviteter, X, Y og Z	Supplerende	Modellering
	Nedbrydningshastighed		Modellering
	Tilbageholdelse		Beregning eller modellering

Der er tillige mulighed for at inddrage usikkerheden på den effektive porøsitet, hvis denne kan vurderes.

Usikkerheden fra hver af de tre parametergrupper er kort illustreret i de følgende afsnit.

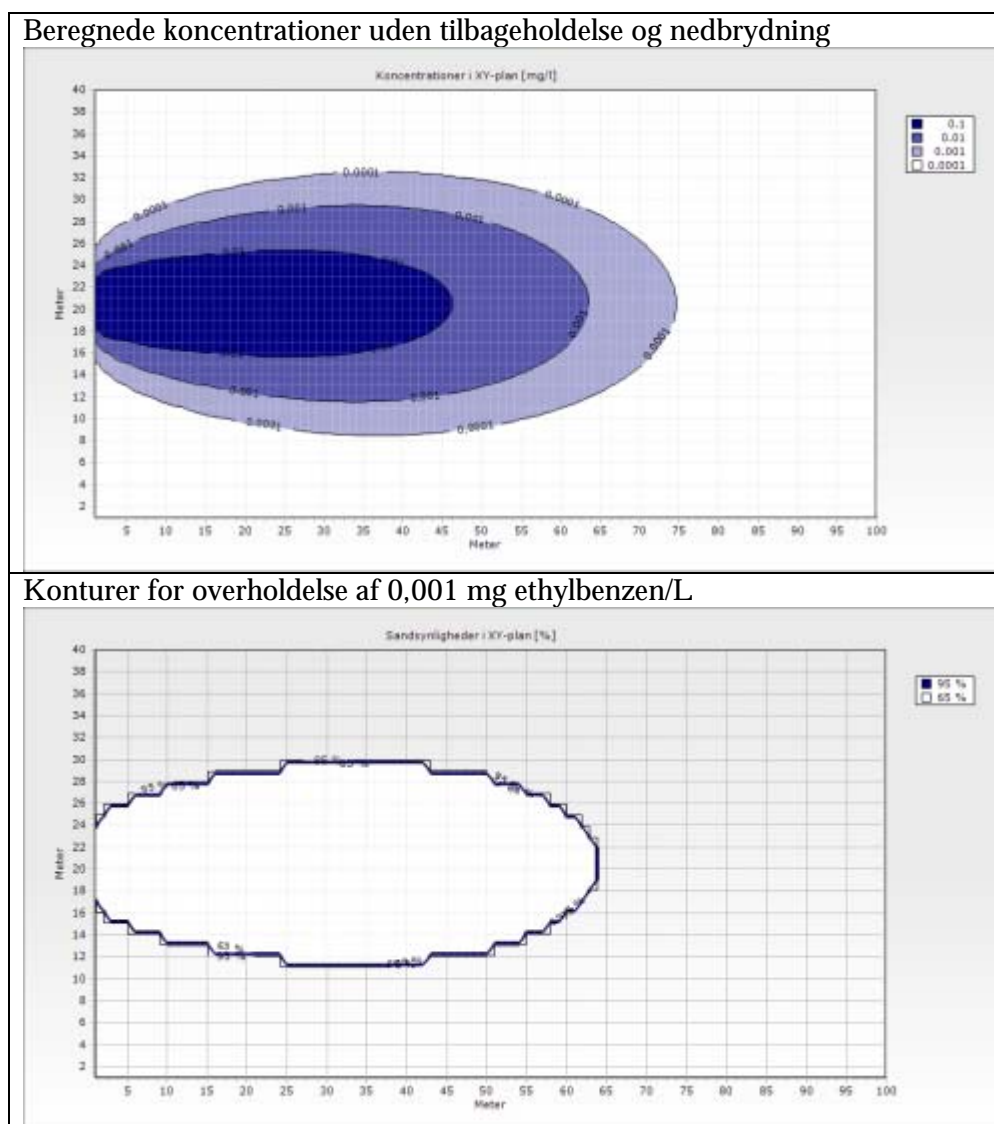
4.2.6 "Usikkerhedskontur" uden usikkerhed

Indledningsvis er i

Figur 39 optegnet en "usikkerhedskontur" sammen med forureningsfane og -koncentrationer, hvor usikkerheden på alle parametre er sat til 0. "Usikkerhedskonturen" afgrænser det område, der med henholdsvis 65% og 95% sikkerhed har koncentrationer under tærskelværdien, som beregnet ud fra de indlagte oplysninger.

Optegningen viser en afgrænsning med både 65% og 95% sikkerhed, der falder sammen med den beregnede fane isokoncentrationskurve for 0,001 mg ethylbenzen/L.

Dette svarer til det forventelige for en "usikkerhedskontur" uden usikre parametre.



Figur 39

Afbildning af 3D-beregnete koncentrationer for forurenede grundvandsmagasin med 3D-beregnet kontur for overholdelse af kriterium med forskellig sikkerhed, usikkerhed medregnet for geologiske/hydrogeologiske parametre, data fra Tabel 6.

4.2.7 Geologisk/hydrogeologisk baseret usikkerhed

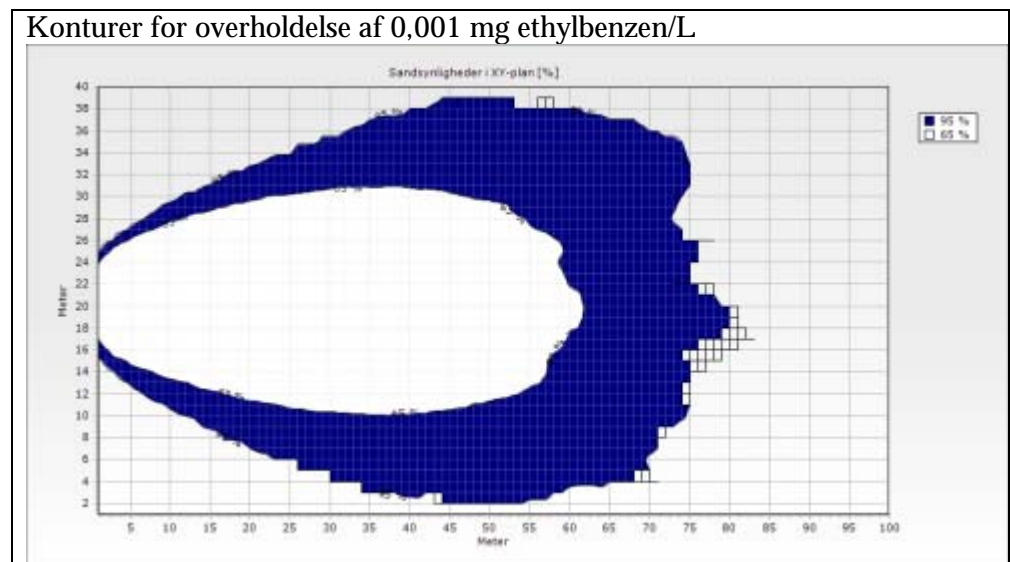
I Figur 40 er vist kontur for 65% og 95% sikker afgrænsning af fanen med 0,001 mg ethylbenzen som tærskelværdi med geologisk/hydrogeologisk usikkerhed medtaget. De benyttede parameterusikkerheder er vist i Tabel 8. Optegningen viser en betydeligt udvidet forureningsafgrænsning, særligt for 95% beslutningssikkerhed og særligt i form af en tværgående udbredelse af det sandsynligt forurenede område. Den udbredelse skyldes først og fremmest usikkerheden på udbredelsesretningen.

Tabel 8

Parameterusikkerhed benyttet i 3D-værktøjets usikkerhedsanalyse, geologiske/hydrogeologiske parametre.

Parameter	Usikkerhed
Hydraulisk ledningsevne	Faktor 2
Hydraulisk gradient	$\pm 10\%$
Udbredelsesretning	$\pm 20^\circ$

Der kan med andre ord vindes betydeligt i forureningsafgrænsning sideværts, hvis der i en tidlig fase afsættes ressourcer til en grundig fastlæggelse af grundvandets strømningsretning, det vil sige til pejleboringer, pejlinger og vurdering af strømningsretning.



Figur 40

3D-beregnet kontur for overholdelse af kriterium med forskellig sikkerhed, usikkerhed medregnet for geologiske/hydrogeologiske parametre, data fra Tabel 6 og Tabel 8.

Effekten af usikkerhed på hydraulisk ledningsevne og gradient er her mindre, men det skal bemærkes, at en større usikkerhed end faktor 2 på hydraulisk ledningsevne ikke er usædvanlig. En sådan større usikkerhed vil bidrage til en længere forureningsafgrænsning.

4.2.8 Kildebaseret usikkerhed

I Figur 41 er vist kontur for 65% og 95% sikker afgrænsning af fanen med 0,001 mg ethylbenzen som tærskelværdi med kildebaseret usikkerhed medtaget. De benyttede parameterusikkerheder er vist i Tabel 9.

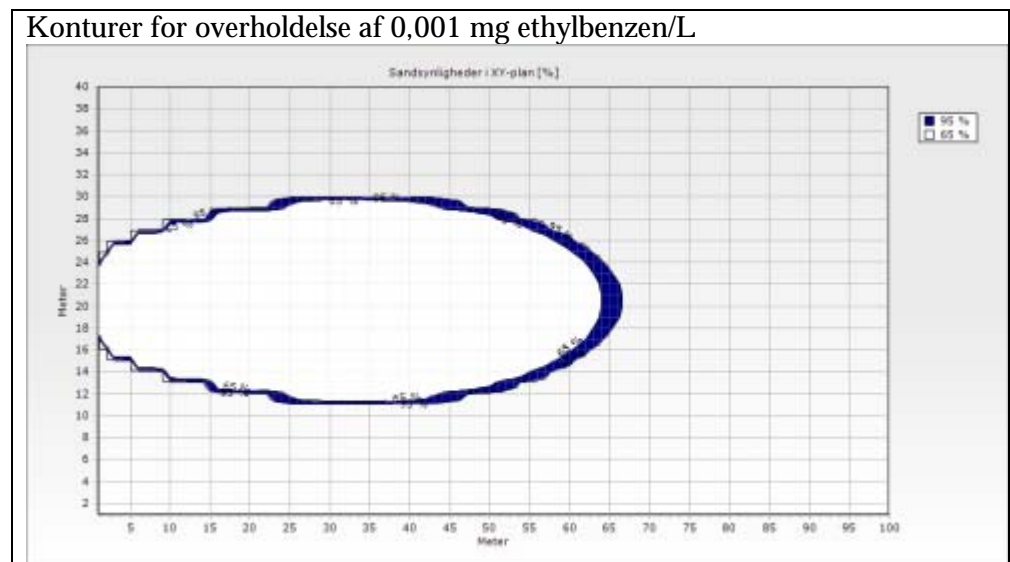
Tabel 9

Parameterusikkerhed benyttet i 3D-værktøjets usikkerhedsanalyse, kildeparametre.

Parameter	Usikkerhed
Kildekoncentration	±25%
Tid siden forureningsstart	±10%

Usikkerhed på kildeparametrene viser ikke stor effekt på den samlede afgrænsning, sammenlign også med

Figur 39. Den benyttede størrelsesorden af usikkerhed for kildeparametrene er ikke urealistisk.



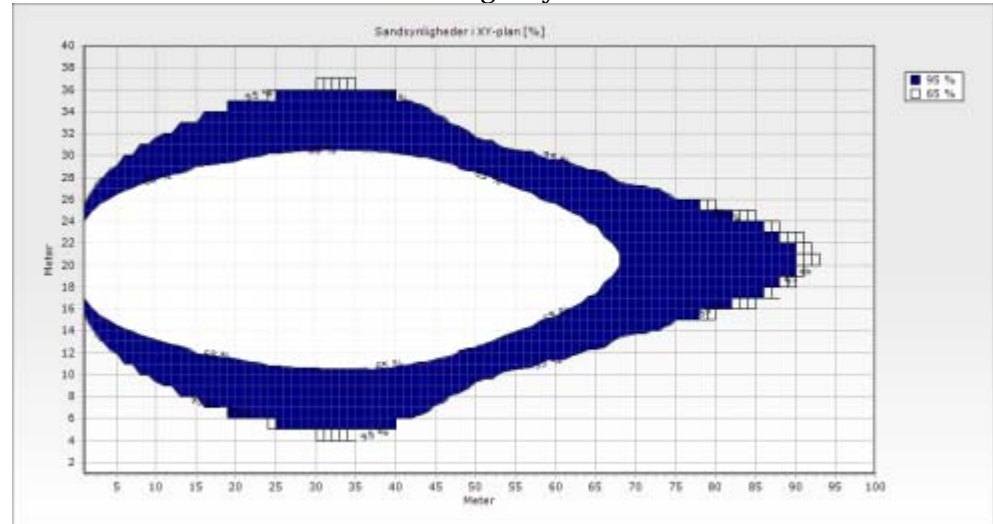
Figur 41

3D-beregnet kontur for overholdelse af kriterium med forskellig sikkerhed, usikkerhed medregnet for kildeparametre, data fra Tabel 6 og Tabel 8.

4.2.9 Beregningsbaseret usikkerhed

I Figur 42 er vist kontur for 65% og 95% sikker afgrænsning af fanen med 0,001 mg ethylbenzen tærskelværdi med dispersivitetsbaseret usikkerhed medtaget. De benyttede parameterusikkerheder er vist i Tabel 10.

Konturer for overholdelse af 0,001 mg ethylbenzen/L



Figur 42
3D-beregnet kontur for overholdelse af kriterium med forskellig sikkerhed, usikkerhed medregnet for dispersivitet, data fra Tabel 6 og Tabel 10.

Tabel 10

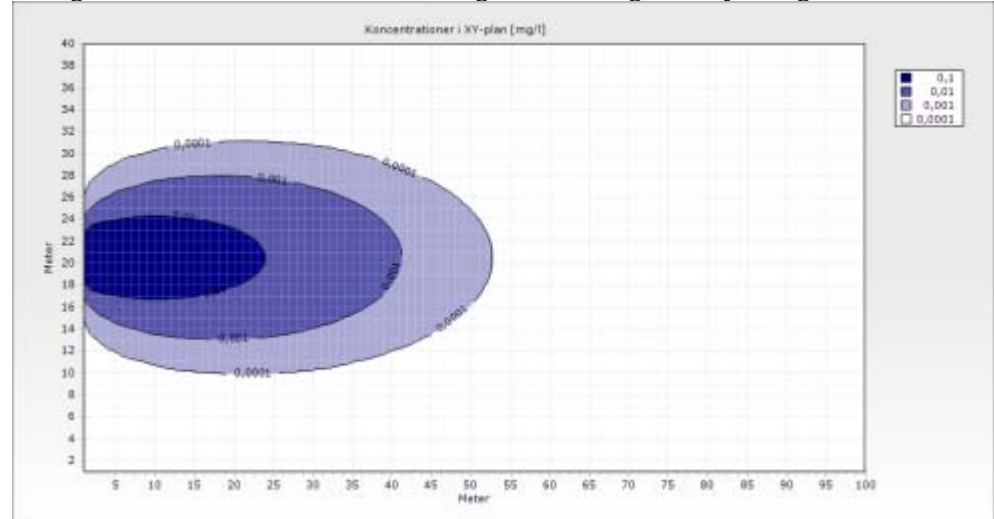
Parameterusikkerhed benyttet i 3D-værktøjets usikkerhedsanalyse, geologiske/hydrogeologiske parametre.

Parameter	Usikkerhed
Dispersiviteter, X, Y og Z	Faktor 10 på hver
Nedbrydningshastighed	±25%
Tilbageholdelse	±10%

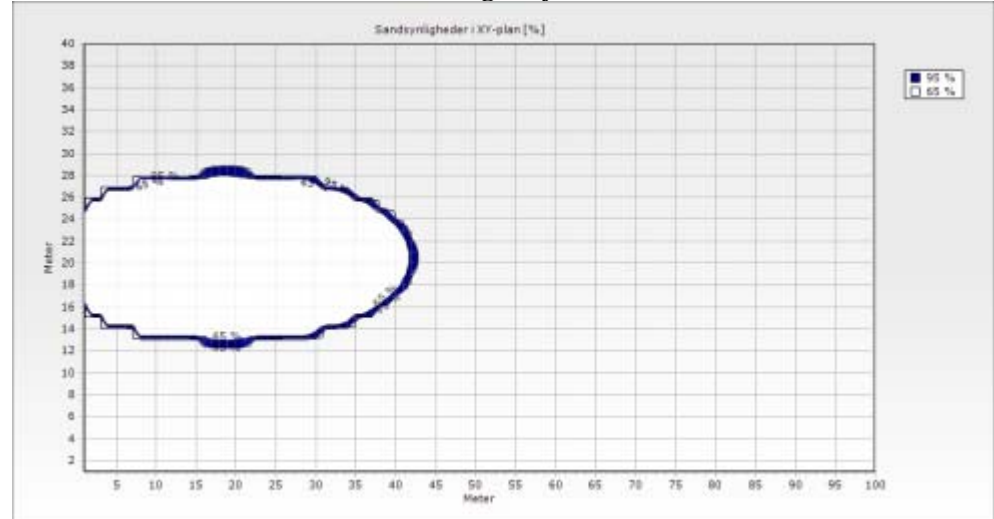
Usikkerheden for dispersivitetskoefficienterne medfører en betydelig udbredning af forureningsafgrænsningen både sideværts og langsgående. Uheldigvis lader dispersivitet sig ikke simpelt bestemme, da det er en beregningsmæssig størrelse, som typisk opnås i forbindelse med numerisk modellering. For mindre forurenede grunde, hvor den her fremlagte usikkerhedsbaserede undersøgelsesstrategi og 3D-værktøjet er tænkt anvendt, vil numerisk modellering i reglen ikke blive anvendt.

I Figur 43 er vist kontur for 65% og 95% sikker afgrænsning af fanen med 0,001 mg ethylbenzen tærskelværdi med usikkerhed på nedbrydning og tilbageholdelse medtaget. De benyttede parameterusikkerheder er vist i Tabel 10. Til sammenligning er vist koncentrationskonturen med nedbrydning og tilbageholdelse.

Beregnete koncentrationer med tilbageholdelse og nedbrydning



Konturer for overholdelse af 0,001 mg ethylbenzen/L



Figur 43

Afbildning af 3D-beregnete koncentrationer for forurenset grundvandsmagasin med nedbrydning og tilbageholdelse og 3D-beregnet kontur for overholdelse af kriterium med forskellig sikkerhed, usikkerhed medregnet for nedbrydning og tilbageholdelse, data fra Tabel 6 og Tabel 10.

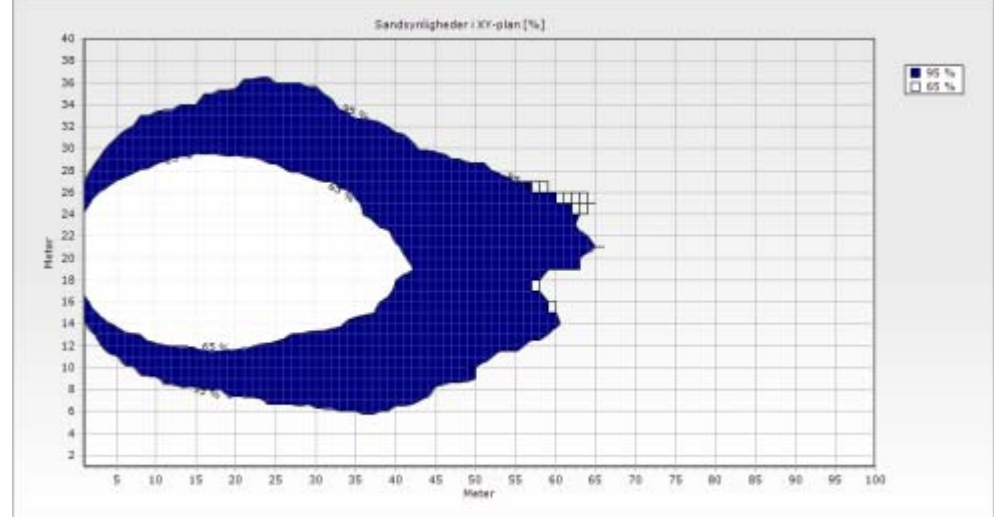
Forureningsfanens længde reduceres væsentligt med inddragelse af nedbrydning og tilbageholdelse, mens usikkerheden ved disse parametre med de angivne størrelser er begrænset. Det skal dog bemærkes, at usikkerheden på nedbrydningshastigheden kan være større end det her illustrerede. Såvel nedbrydning som tilbageholdelse kan anslås ud fra test i laboratoriet eller i felt, men parametrene uddrages i praksis ofte af numerisk modellering.

4.2.10 Kombineret usikkerhed

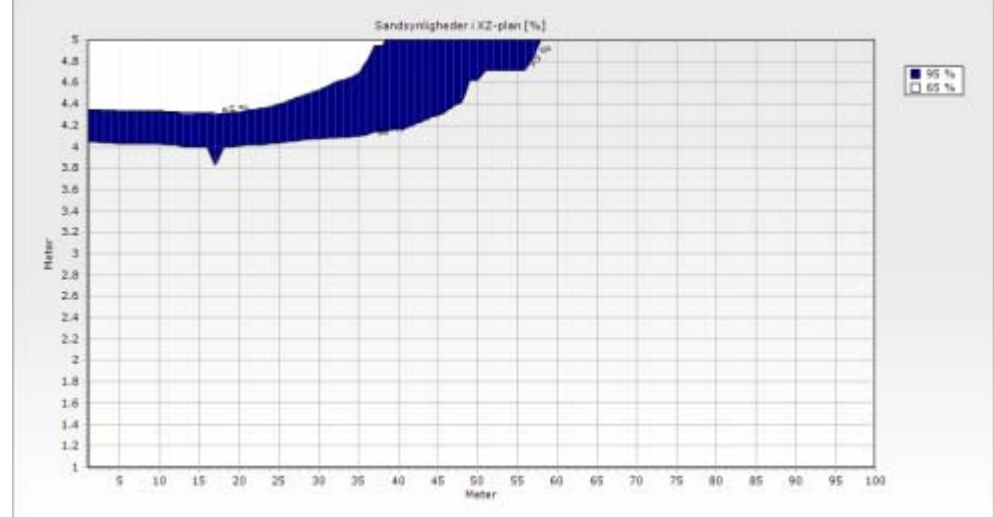
I Figur 44 er vist kontur for 65% og 95% sikker afgrænsning af fanen med 0,001 mg ethylbenzen tærskelværdi med alle usikkerheder medtaget. De benyttede parameterusikkerheder er vist i Tabel 8, Tabel 9 og Tabel 10.

Optegningen viser en relativ bred og lang afgrænsning af grundvand, der med 95% sikkerhed overholder kriteriet, samt en væsentlig mindre fane ved 65% beslutningssikkerhed.

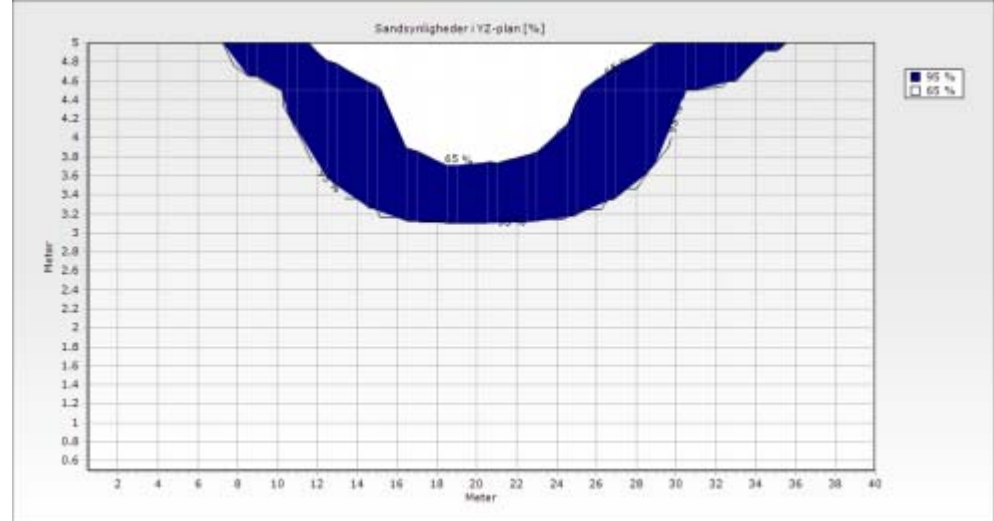
Konturer for overholdelse af 0,001 mg ethylbenzen/L, XY plan



Konturer for overholdelse af 0,001 mg ethylbenzen/L, XZ plan, lagt i strømningens retning



Konturer for overholdelse af 0,001 mg ethylbenzen/L, YZ plan, 1 års transport fra kilden (20 m)



Figur 44
3D-beregnet kontur for overholdelse af kriterium med forskellig sikkerhed, usikkerhed medregnet for alle parametre, nedbrydning og tilbageholdelse medtaget, data fra Tabel 6, Tabel 8, Tabel 9 og Tabel 10.

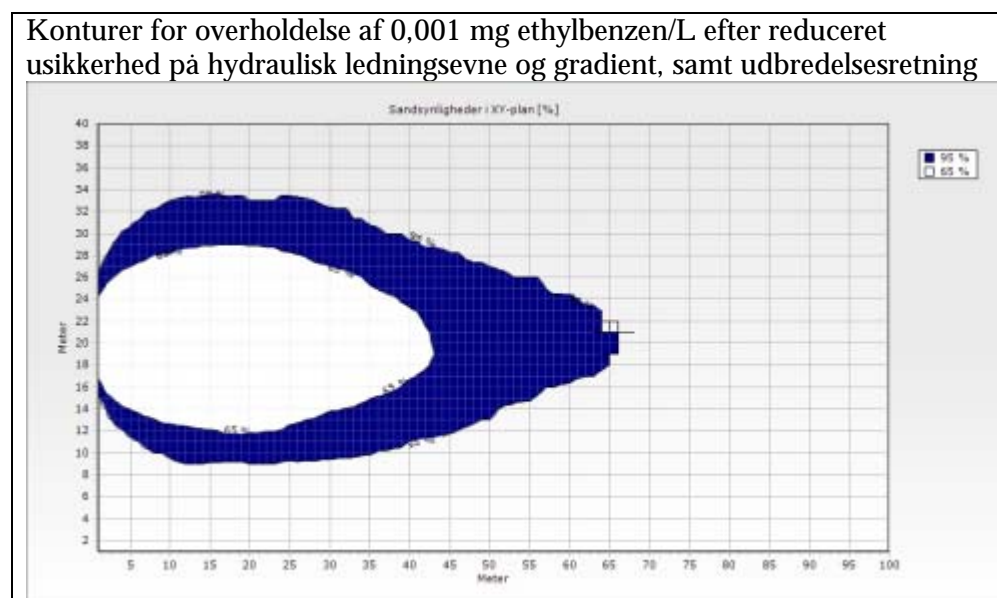
De to plot med dybden inddraget afspejler, at infiltration ikke medtages i transportberegningerne. Det betyder, at fanens ”dykning” undervurderes, særligt for grundvandsmagasiner med frit vandspejl.

4.2.11 Usikkerhedsbegrænsning ved supplerende måling af hydrogeologiske/geologiske parametre

Beregningerne er indtil nu alene baserede på oplysninger tilgængelige fra de indledende undersøgelser. I Figur 45 er vist kontur for kriterieoverholdelse efter gennemførelse af supplerende undersøgelse med fire supplerende borer, hvor sikkerheden for fastlæggelse af de hydrogeologiske/geologiske parametre er øget.

Figur 45 viser kontur for 65% og 95% sikker afgrænsning af fanen med 0,001 mg ethylbenzen tærskelværdi med hydrogeologiske/geologiske oplysninger fra de fire supplerende målinger medtaget. De benyttede supplerende data er vist i Tabel 12.

Først og fremmest den reducerede usikkerhed på udbredelses-/transportretningen giver en smallere fane, sammenlign med Figur 44.



Figur 45
3D-beregnet kontur for overholdelse af kriterium med forskellig sikkerhed, usikkerhed medregnet for alle parametre, reduceret usikkerhed på hydrogeologiske/geologiske parametre, data fra Tabel 6 og Tabel 11.

Tabel 11

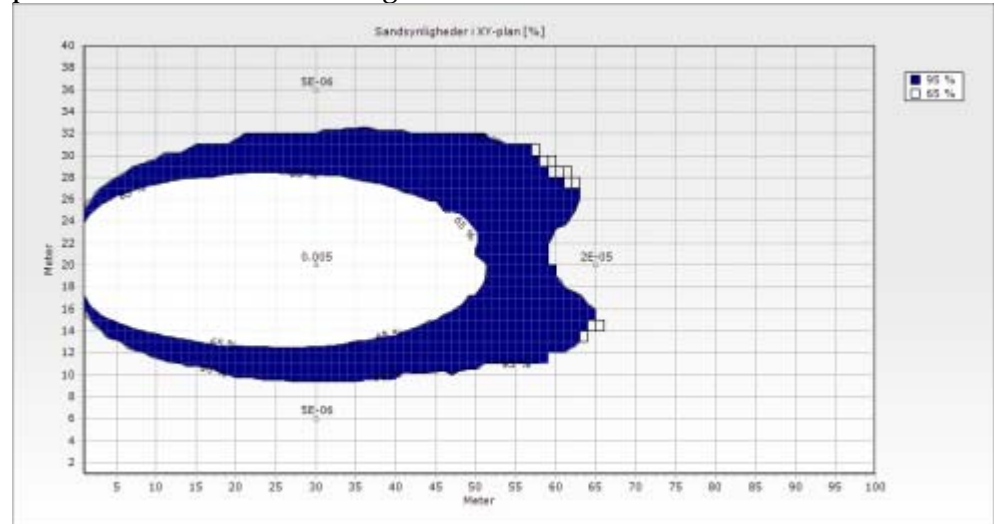
Data for fire supplerende målinger.

Parameter	Oprindelig usikkerhed	Reduceret usikkerhed
Hydraulisk ledningsevne	Faktor 2	Faktor 1,5
Hydraulisk gradient	±10%	±5%
Udbredelsesretning	± 20°	± 10°

4.2.12 Usikkerhedsbegrænsning ved supplerende prøvetagning

Figur 49 viser kontur for 65% og 95% sikker afgrænsning af fanen med 0,001 mg ethylbenzen tærskelværdi med koncentrationer fra de fire supplerende målinger medtaget. De benyttede supplerende data er vist i Tabel 12.

Konturer for overholdelse af 0,001 mg ethylbenzen/L efter fire supplerende prøver, koncentration vist i mg/L



Figur 46

3D-beregnet kontur for overholdelse af kriterium med forskellig sikkerhed, usikkerhed medregnet for alle parametre, fire supplerende målinger medtaget, data fra Tabel 6 og Tabel 12.

Tabel 12

Data for fire supplerende målinger.

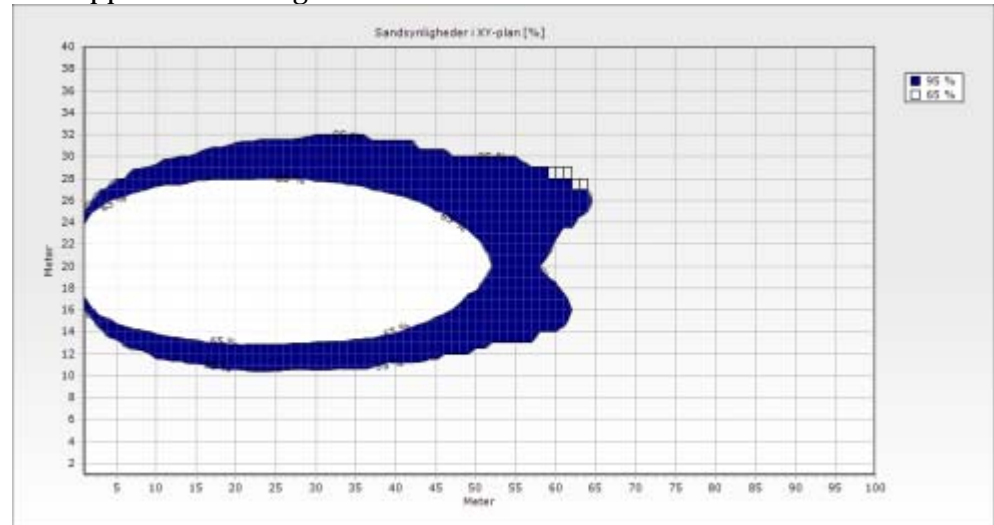
X (m)	Y (m)	Filterlængde (m)	Tid (dage)	Forurenings- koncentration (mg/L)
30	6	1	365	0,000005 ⁶
30	20	1	365	0,005
30	36	1	365	0,000005
65	20	1	365	0,00002

De supplerende målinger giver først og fremmest en mindre sideværts udbredelse, affødt af målinger under detektionsgrænsen i 95% konturens sideværts afgrænsninger. Opdelingen i to sandsynlige delfaner skyldes den lave måling i 95% konturens nedstrøms afgrænsning, og dette kunne for eksempel afhjælpes af en reduceret usikkerhed på udbredelses-/transportretningen, se Figur 47.

I dette tilfælde er den samlede forbedring af afgrænsningen dog begrænset med hensyn til faneopdeling, omend en reduktion i både bredde og længde kan ses.

⁶ Værdien svarer til ½ gange den forventede analysedetektionsgrænse.

Konturer for overholdelse af 0,001 mg ethylbenzen/L efter reduceret usikkerhed på hydraulisk ledningsevne og gradient, udbredelsesretning samt fire supplerende målinger



Figur 47

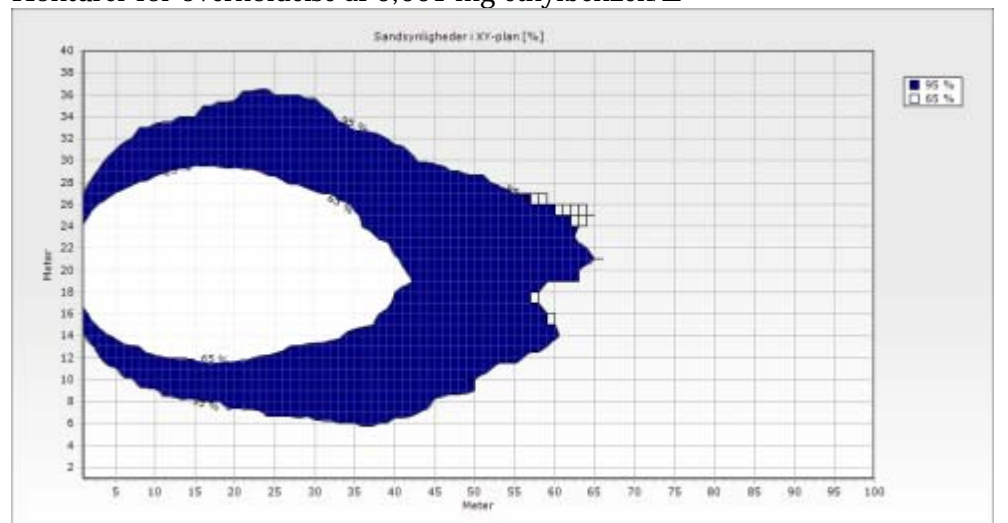
3D-beregnet kontur for overholdelse af kriterium med forskellig sikkerhed, usikkerhed medregnet for alle parametre, reduceret usikkerhed på hydrogeologiske/geologiske parametre og fire supplerende målinger, data fra Tabel 6, Tabel 11 og Tabel 12.

4.2.13 Supplerende afgrænsning ved brug af flere tærskelværdier

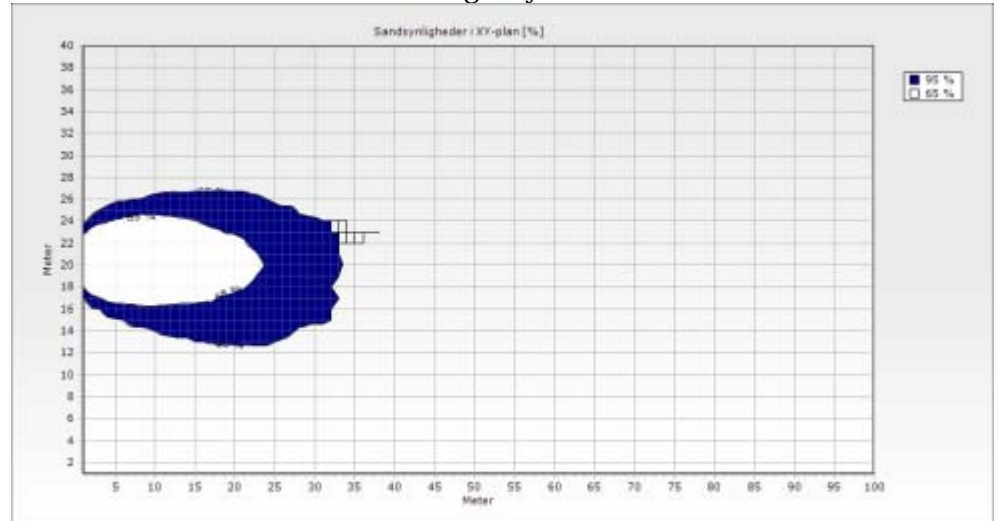
Sandsynlighedsbaseret beskrivelse af forureningskoncentrationerne inde i fanen kan opnås ved successivt at gennemføre 3D usikkerhedsberegningerne med stigende tærskelværdier, se Figur 48.

Denne fremgangsmåde giver mulighed for at anslå forurennet volumen grundvand med fastlagt sikkerhed, for eksempel med henblik på dimensionering af afværge. Samme fremgangsmåde kan benyttes i XZ og YZ plan, altså inddragende fordelingen i dybden.

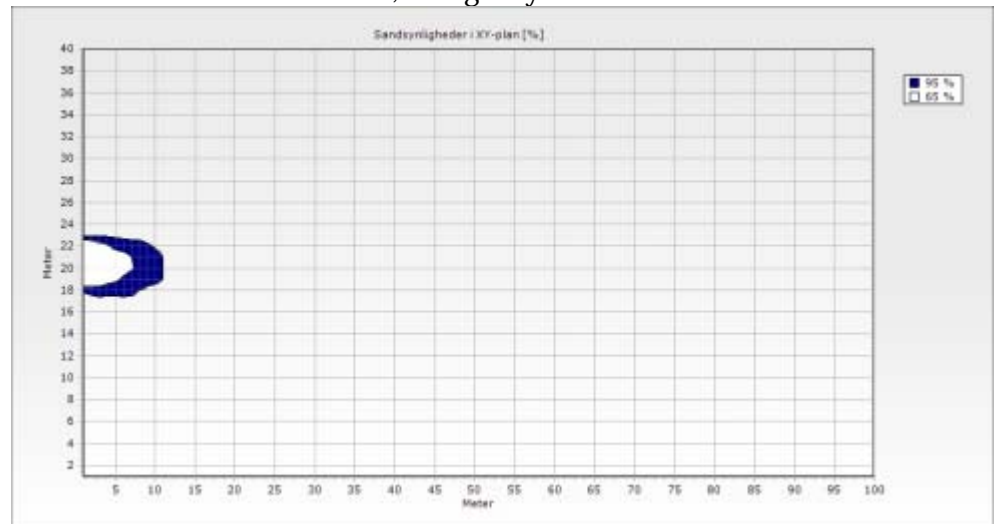
Konturer for overholdelse af 0,001 mg ethylbenzen/L



Konturer for overholdelse af 0,01 mg ethylbenzen/L



Konturer for overholdelse af 0,01 mg ethylbenzen/L



Figur 48

3D-beregnet kontur for overholdelse af kriterium med forskellig sikkerhed, usikkerhed medregnet for alle parametre, varierende tærskelværdi, data fra Tabel 6, Tabel 8, Tabel 9 og Tabel 10.

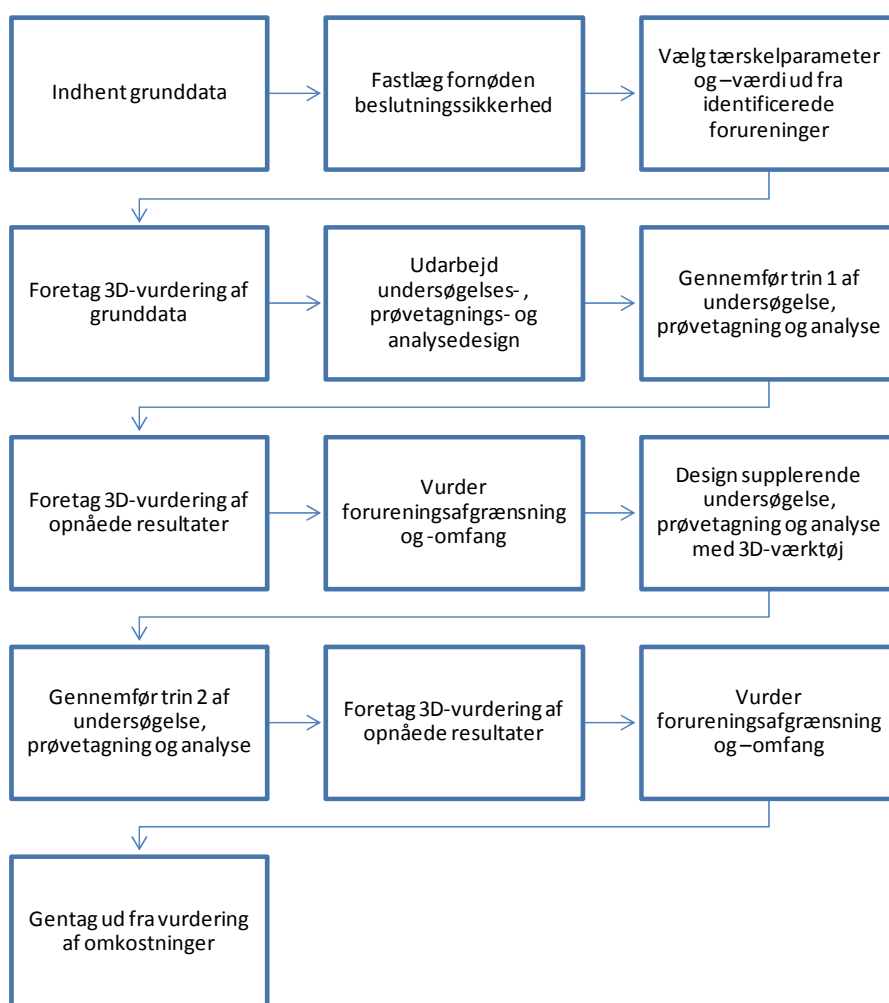
4.3 Strategi for beskrivelse og afgrænsning af grundvandsforurening

I Figur 49 er vist et forslag til sandsynlighedsbaseret undersøgelsesstrategi, der inddrager 3D-værktøjet og er baseret på den modificerede data quality objectives proces, Figur 9.

Den her foreslåede strategi for afgrænsningsundersøgelsen er baseret på en fortolkning af oplysninger fra den indledende undersøgelse og anden forhåndsviden, hvor fortolkningen udbygges under afgrænsningsundersøgelsen.

Fortolkningen kan etableres ved hjælp af det i projektet udviklede 3D-værktøj, ved hjælp af egentlige, numeriske grundvandsmodeller, eller ved hjælp af beregninger med lommeregner og manuel optegning. 3D-værktøjet giver mulighed for en integreret vurdering af forhåndsviden, herunder oplysninger

fra den indledende undersøgelse og resultaterne fra afgrænsningsundersøgelsen.



Figur 49
Forslag til sandsynlighedsbaseret undersøgelsesstrategi, grundvand.

4.3.1 Indhent grunddata

Inden igangsættelse af afgrænsningsundersøgelsen er forureningsstoffer identificeret, og kildestyrken er kendt (koncentration i øverste 25 cm af grundvandsmagasinet målt) eller anslået (beregnet ud fra karakterisering af jordforureningen). Derudover kan der forventes et overordnet kendskab til geologi (lagfølge og -tykkelse, typisk hydraulisk ledningsevne, porøsitet, dispersivitet), hydrogeologi (grundvandets vandspejl, strømningshastighed og -retning) og hydrologi (nettoinfiltration). En del af disse størrelser vil alene være kendt som generiske værdier (for eksempel hydraulisk ledningsevne eller porøsitet), se for eksempel: /1/, mens andre vil være kendt på større skala fra regionale kort (for eksempel grundvandets strømningsretning og -hastighed). Endelig vil man for de fleste stoffer kunne finde forslag til nedbrydningshastighed og tilbageholdelseskonstant, se for eksempel: /1/.

Desuden er normalt foretaget en beregning (JAGG eller tilsvarende) af forureningskoncentrationen i 1 års eller 100 m's nedstrøms afstand fra grunden /10/. Den afstand, hvortil forureningen højst kan være nået, kan aflæses på en figur, der optegnes i JAGG, se Figur 35.

Det skal bemærkes, at forureningen normalt vil have en større beregnet udbredelse end 1 års eller 100 m's transport nedstrøms, idet en mindre beregnet udbredelse normalt ikke ville have ført til afgrænsningsundersøgelse for grundvandsforurening.

Det forudsættes, at der i forbindelse med de indledende undersøgelser er taget og analyseret prøver af grundvandet opstrøms for den forurenede grund, og at der ikke er fundet tegn på opstrøms forureningskilder.

4.3.2 Fastlæg fornøden beslutningssikkerhed

Ud fra kortlægning af områder med drikkevandsinteresser /39;40/ afgøres det, hvorvidt området er udlagt med særlige drikkevandsinteresser. På den baggrund besluttes den nødvendige beslutningssikkerhed, for eksempel 95% i områder med særlige drikkevandsinteresser og 65% udenfor disse områder.

4.3.3 Vælg tærskelparametre og -tærskelværdi

I forbindelse med afgrænsningen af grundvandsforureningen vil man som udgangspunkt ønske at inddrage alle de forureningsstoffer, der er identificerede i kilden. I praksis vil der være enkelte stoffer, der vil fastlægge afgrænsningen, først og fremmest bestemt af:

- Kildekoncentration
- Giftighed (og dermed kriterium)
- Nedbrydelighed
- Tilbageholdelse

Det bestemmende stof, tærskelparameteren, vil være det stof, der overskrider sit kriterium længst væk fra kilden. For blandingsforureninger er det ikke altid simpelt at forudsige, hvilket stof det vil være. Som udgangspunkt kan benyttes en trinvis fremgangsmåde, hvor stofferne successivt rangordnes efter relativ koncentration, nedbrydelighed og tilbageholdelse.

Beregn for hvert stof den relative overskridelse, O_r , ud fra kriteriet K , kildekonzentrationen C_k og baggrundskonzentrationen C_b som:

$$O_r = \frac{C_k - C_b}{K}$$

Rangorden stofferne efter deres relative overskridelse i kilden.

Find for stoffer med stor relativ overskridelse deres nedbrydelighed, k_1 , som 1. ordens nedbrydningskonstant i dag⁻¹ under aerobe eller anaerobe forhold ud fra forventningerne til forholdene i grundvandsmagasinet. Hvis der ikke er klare forventninger til forholdene i magasinet, kan man vælge de mest forsigtige nedbrydningsbetingelser: aerobe for klorerede opløsningsmidler og beslægtede stoffer, anaerobe for andre stoffer. Rangorden stofferne efter relativ nedbrydelighed, N_r , i forhold til det mindst nedbrydelige stof:

$$N_r = \frac{k_1}{k_{1, \text{mindst}}}$$

Hvis der findes ét eller få stoffer med klart højest relativ overskridelse, mens forskellen i relativ nedbrydelighed er lille, kan man umiddelbart vælge disse som tærskelparametre.

Supplerende kan inddrages den relative tilbageholdelse, R_r , anslået ud fra den relative fordelingskoefficient oktanol til vand, $\log(K_{ow})$, beregnet som:

$$R_r = \frac{\log(K_{ow})}{\log(K_{ow,mit})}$$

En høj relativ tilbageholdelse for et stof peger på, at stoffet vil være mindre relevant som tærskelparameter.

Omfatter forureningen mange stoffer med høj relativ koncentration, lav nedbrydelighed og begrænset tilbageholdelse, kan en indledende 3D-vurdering for hvert af de mest sandsynlige stoffer, se Afsnit 4.3.4, hjælpe til at afklare det endelige valg af tærskelparameter. Her kan umiddelbart ses og sammenlignes den integrerede effekt af de tre betydende faktorer på forventede koncentrationer i magasinet.

Der udpeges afslutningsvis én tærskelparameter, der kan benyttes som styreparameter i den videre undersøgelse. Tærskelværdien sættes til det kriterium, der har været anvendt under udpegning af tærskelparameter og indledende risikovurdering, typisk grundvandskvalitetskriteriet, eventuelt drikkevandskvalitetskriteriet.

4.3.4 Foretag 3D-vurdering af grunddata

Indledningsvist benyttes 3D-værktøjet til at optegne forureningsfanen og sandsynlighedskonturen for forureningen. Den tilgængelige forhåndsviden benyttes i 3D-værktøjet. Som nævnt ovenfor kan separate kørsler for forskellige kandidater til tærskelparameter benyttes i den endelige udvælgelse af tærskelparameter.

4.3.5 Udarbejd undersøgelsesdesign

I den første undersøgelsesrunde ønskes forbedret afgrænsning baseret på to punkter:

- Supplerende målinger af forureningskoncentrationer i fanen for tærskelparameteren
- Supplerende bestemmelse af hydrogeologiske/geologiske parametre: hydraulisk gradient og ledningsevne, samt udbredelses- eller transportretning

Disse to punkter belyses ved etablering af supplerende filtersatte boringer, prøvetagning, analyse, nivellering, pejling og prøvepumpning.

I første undersøgelsesrunde fokuseres primært på horisontal afgrænsning. Det forudsættes som nævnt, at der i forbindelse med de indledende undersøgelser er foretaget en boring opstrøms for grunden, således at opstrøms kilder til forurening er udelukket.

Der planlægges en undersøgelse med fire boringer: en boring i den forventede strømlinie nedstrøms for pladsen og i en afstand svarende til 95% konturen for overskridelse af den valgte tærskelværdi, og tre boringer på tværs af den forventede strømlinie og cirka halvvejs fra den længst beregnede afstand til 95% sandsynlighed for overskridelse af den valgte tærskelværdi. Den midterste af de tre boringer på tværlinien placeres i den forventede strømlinie. De to

perifere boringer på tværlinien placeres i en afstand fra midterboringen, der svarer til 95% konturen for overskridelse af den valgte tærskelværdi.

Dybde af boringerne udvælges svarende til den forventede mest forurenede dybde, udvalgt med hjælp fra XZ og YZ plot fra 3D-værktøjet, men med hensyntagen til den manglende medregning af infiltration over transportområdet, se Afsnit 4.2.10. Der kan med fordel vælges korte filtre (1 m) med boringer af begrænset dimension (2-3") og mikroforpumpning, se /34/, idet dette giver fuld information om forureningens fordeling i magasinet. Er der usikkerhed om forureningens fordeling i dybden, kan det anbefales at tage prøver i flere dybder ved etablering af filtre ned igennem magasinet. Benyttes en boring med ét bredt filter og volumenforpumpning, skal det tages i regning, at de målte forureningskoncentrationer forventeligt reduceres på grund af fortynding. En nærmere gennemgang af forskellige designs for grundvandsundersøgelser kan for eksempel findes i /42/.

4.3.6 Gennemfør Trin 1 af prøvetagning og analyse

Med udgangspunkt i det fastlagte prøvetagningsdesign gennemføres første trin af prøvetagning og analyse. Der henvises til for eksempel /1;12;34/ for metoder for prøvetagning og analyser.

Det skal her særligt bemærkes, at en løbende vurdering af opnåede resultater under prøvetagning og analyse giver mulighed for at opnå en bedre sikkerhed i forureningsbeskrivelsen. Den mest effektive fremgangsmåde er her at benytte resultater af feltmålinger til løbende justering af fanens udstrækning som beskrevet i den såkaldte "triade approach" af den amerikanske miljøstyrelse /43/. For grundvandsprøver kan mange forureninger dog være vanskelige at måle retvisende i felten. Det kan her være godt at gennemføre hasteanalyser i laboratoriet, således at undersøgelsesdesignet løbende kan tilpasses resultaterne.

4.3.7 Foretag 3D-vurdering af opnåede resultater

Med 3D-værktøjet udarbejdes som beskrevet i Afsnit 3.2 et nyt sæt konturer (XY, YZ, XZ) for overholdelse af kriterium for tærskelparameter, idet opnåede værdier indføres for:

- Hydraulisk gradient
- Hydraulisk ledningsevne
- Strømnings-/udbredelsesretning
- Målte forureningskoncentrationer

Samtidig justeres usikkerheden på disse parametre skønsmæssigt.

4.3.8 Vurder forureningsafgrænsning og -omfang

Der vurderes, om der er opnået en forureningsbeskrivelse og -afgrænsning svarende til det forventede. Eksempler på afgrænsning og manglende afgrænsning er nærmere beskrevet i Afsnit 4.3.9.

Afgrænsningen vurderes i særdeleshed i forhold til:

- Trussel imod drikkevandsinteresser og recipienter (er forureningen på vej imod kritiske punkter)

- Volumen vand til oprensning ved afværge (kan den benyttes til dimensionering)
- Udbredelse ved naturlig rensning (kan den benyttes som start afgrænsning)
- Langtidsovervågning (kan boringer udvælges til monitoring)

Hvis beskrivelse og afgrænsning ikke vurderes at være tilfredsstillende, fortsættes i supplerende undersøgelse.

4.3.9 Design af supplerende undersøgelse

Resultaterne af den første undersøgelsesrunde vurderes efter tre typiske situationer.

Grundvandsforureningen er afgrænset, hvis første runde har givet alle boringer udenfor 95% konturen uden forurening over tærskelværdien, samt den midterste boring med forurening over tærskelværdien. Hvis denne afgrænsning er tilfredsstillende i forhold til beslutningerne om grundens fremtid, kan forureningsafgrænsningen afsluttes her.

Hvis der er behov for en **nærmere beskrivelse eller tættere afgrænsning af en afgrænset grundvandsforurening**, kan man ved hjælp af strategiværktøjet beregne usikkerheden på afgrænsningen med tærskelværdien. Man kan endvidere vælge andre værdier, for eksempel 10 og 100 gange tærskelværdien, og beregne usikkerheden på disse afgrænsninger. Supplerende sæt af tre boringer i linie på tværs af strømningsretningen kan så placeres, hvor der er længst imellem usikkerhedslinierne. Igen placeres den midterste boring på strømlinien, og de to perifere boringer nu i en afstand svarende til 95% konturen.

Grundvandsforureninger er ikke afgrænset, hvis én boring udenfor 95% konturen viser forurening over tærskelværdien.

Grundvandsforureningen er ikke afgrænset og retningen formodentlig forkert, hvis én sideværts boring udenfor den forventede rand viser forurening over tærskelværdien. Årsagen vil normalt være, at den hydrogeologiske fortolkning har været ukorrekt, enten med hensyn til strømningsretning eller med hensyn til tværgående dispersivitet. Hvis der er behov for yderligere afgrænsning af grundvandsforureningen, justeres den forventede strømningsretning, gradienten genberegnes om nødvendigt ud fra grundvandsspejlet i boringer på den justerede strømlinie, og en ny fortolkning af grundvandsforureningens udbredelse, se ovenfor, etableres. Konturen for 95% sandsynlighed for overholdelse af tærskelværdien benyttes til at vise, hvor boringen til den manglende sideværts afgrænsning kan placeres. Hvis denne boring viser forurening under tærskelværdien, og den resulterende afgrænsning er tilfredsstillende i forhold til beslutningerne om grundens fremtid, kan forureningsafgrænsningen afsluttes her.

Forureningen er ikke afgrænset og udbredeshastighed eller kildekarakterisering formodentlig forkert, hvis kun boringen udenfor randen i strømningsretningen viser forurening over tærskelværdien. Årsagen kan være større lineær grundvandshastighed end beregnet, større kildestyrke, længere forureningsperiode, mindre tilbageholdelse eller langsommere nedbrydning, men en afklaring af årsagen (-erne) er ikke nødvendig for at nå en afgrænsning af grundvandsforureningen. Hvis der er behov for yderligere afgrænsning af grundvandsforureningen, beregnes og optegnes ved hjælp af strategiværktøjet et nyt plot af usikkerheden på afgrænsning af tærskelværdien

efter indtastning af de opnåede data fra den første runde og eventuelt efter justering af gradienten beregnet ud fra grundvandspejlet i borerer på strømlinien. Kurven, der angiver 95% sikkerhed for overholdelse af tærskelværdien, benyttes som ny fortolkning af grundvandsforureningens største udbredelse, og i den længste afstand langs strømlinien placeres den manglende afgrænsningsboring. Hvis denne boring viser forurening under tærskelværdien, og den resulterende afgrænsning er tilfredsstillende i forhold til beslutningerne om grundens fremtid, kan forureningsafgrænsningen afsluttes her.

Overensstemmelse imellem forureningsfordeling i dybden og XZ og YZ sandsynlighedsplot er i mange tilfælde ikke af afgørende betydning. Vurdering af den vertikale fordeling indgår her primært med det formål at muliggøre retvisende filtersætning af undersøgelsesboringer. Hvis det for eksempel af hensyn til dimensionering af afværgeforanstaltninger eller filtersætning af monitoringsboringer er afgørende at opnå en retvisende vertikal beskrivelse, gøres dette efter samme retningslinier som angivet for den horisontale afgrænsning.

4.3.10 Gennemfør, analyser og vurder Trin 2

Trin 2 gennemføres som beskrevet ovenfor.

4.3.11 Gentag ud fra vurdering af omkostninger

Såfremt forureningsafgrænsningen efter Trin 2 stadig har uacceptable konsekvenser for eksempel til dimensionering af afværgeforanstaltninger eller filtersætning af monitoringsboringer, kan processen gentages.

Som for undersøgelse af forurenede jord gælder det, at hvis en undersøgelse naturligt kan gennemføres i en serie mindre trin, for eksempel ved brug af feltanalyser, kan vurdering af hvert trin og planlægning af det næste med fordel foretages som her beskrevet. I den situation kan det være en fordel at benytte adskillige trin af begrænset omfang, snarere end måske to mere omfattende, idet viden opnået i de enkelte trin derved kan nyttiggøres i planlægningen af de næste.

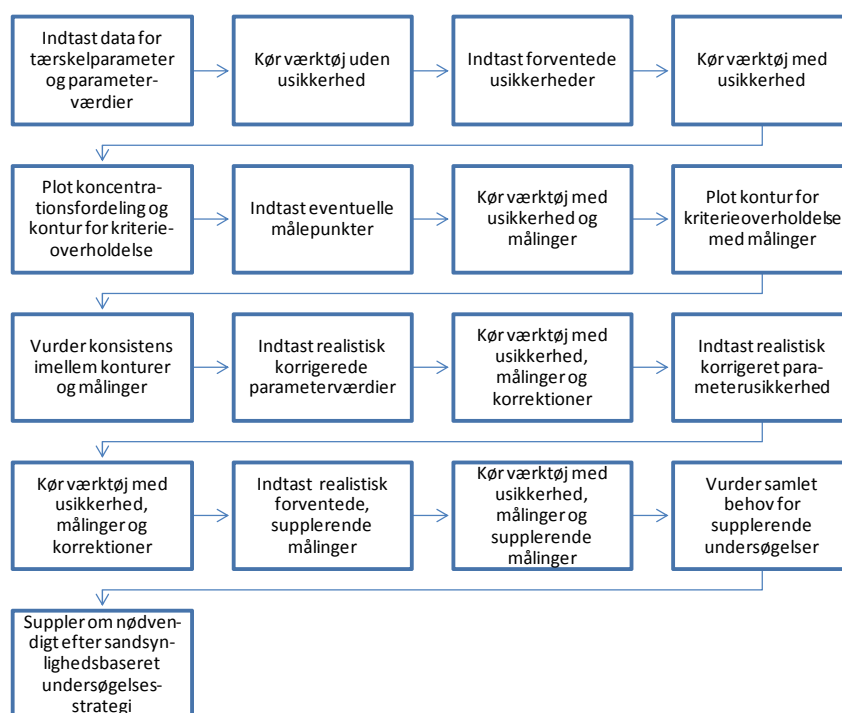
4.4 Beskrivelse af 3D-værktøjet

En analytisk 3-dimensionel model for forureningsudbredelse er udviklet for at give et simpelt redskab til at samle og visualisere vor viden om forureningsudbredelsen inden igangsættelse af afgrænsningsundersøgelsen (startbeskrivelse). Modellen er endvidere udviklet til successivt at kunne inddrage oplysninger fra afgrænsningsundersøgelsen, således at man løbende kan beregne usikkerheden i forureningsafgrænsningen og dermed visualisere afgrænsningen. Modellen er altså tænkt som et strategiværktøj i planlægning og i fortolkning/visualisering af en afgrænsningsundersøgelse.

Formålet med udviklingen af programmet har været at skabe et værktøj, der med en relativ lille indsats og på et begrænset datagrundlag kan beregne udbredelsen af en forureningsfane og den sikkerhed, hvormed fanen er afgrænset. Sådanne beregninger er ikke trivielle, og det er derfor forsøgt at lette adgangen til nogle relativt avancerede beregningsrutiner ved at pakke dem ind i en let tilgængelig Excel brugerflade. Beregningen af forureningsudbredelsen er baseret på en analytisk løsning af den tredimensionale stoftransportligning. De anvendte beregningsrutiner er

udviklet af United States Geological Survey (USGS). Til vurdering af usikkerheden på forureningsudbredelsen er udviklet en Monte Carlo simulering, hvor det er muligt at tilknytte en usikkerhed på forskellige input parametre. Regnearket er udviklet i Excel 1997-2003 installeret på en Microsoft Windows XP platform med international decimal komma notation. Regnearket er efterfølgende afprøvet uden problemer i Excel 2007, på Microsoft Vista platform og med dansk decimal komma notation. Installation og anvendelse af værktøjet, samt forudsætninger og metoder er nærmere beskrevet i en vejledning.

3D-værktøjet anvendes til trinnene "Foretag 3D-vurdering af grunddata" og "Foretag 3D-vurdering af opnåede resultater" i Figur 49 med deltrin som beskrevet i Figur 50.



Figur 50
Flow i 3D-vurdering af grundvandsforurening.

De forskellige deltrin er illustreret med eksempler i Afsnit 4.5.

4.5 Eksempler på anvendelse af 3D-værktøjet

For at illustrere anvendelsen af 3D-værktøjet er det benyttet på model data fra to forurenede grundvandsmagasiner: et forurenede magasin på Lolland og et injektionsfelt i Jylland.

Det forurenede magasin på Lolland er et sekundært magasin med morænesand og smeltevandssand under moræneler i en kompliceret geologi med lavpermeable områder. Forureningen udbreder sig primært i den øverste del af sandmagasinet lige under morænelersdækket. Der er forurening med benzinkomponenter, hvor det er valgt at følge ethylbenzen som repræsentant for de BTEXN og øvrige alkylbenzener, der findes i højeste koncentrationer i forureningen.

Injektionsfeltet i Jylland er i et magasin i smeltevandssand med frit vandspejl. Der er foretaget injektion med klorid, som er simuleret her.

4.5.1 Beskrivelse af forureningsafgrænsning ud fra modellering

For at beskrive forureningsafgrænsningen er der gennemført avanceret numerisk modellering af geologi, hydrogeologi og forureningsudbredelse for de to grundvandsmagasiner.

På baggrund af lithologien i undersøgelsesboringer er opstillet en geostatistisk model for geologiens rumlige struktur. Ved hjælp af programmet TPROGS er genereret 100 realisationer af den geologiske opbygning, som er konditioneret til undersøgelsesboringerne. For hver realisation er fundet en strømningsløsning med grundvandsmodellen MODFLOW, samt en transportløsning med transportmodellen MT3DMS. Transportmodellen inkluderer tilbageholdelse og første ordens nedbrydning for de parametre, hvor det er relevant. Parametrene til transportmodellen er baserede på tidligere modelstudier af forureningsudbredelsen i magasinerne.

Baseret på de 100 strømnings- og transportløsninger er beregnet de nødvendige hydrogeologiske parametre til 3D-værktøjet (middel bulk hydraulisk ledningsevne, middel horisontal gradient fra kilde til 100 m nedstrøms denne, middel horisontal strømningsretning fra kilde til 100 m nedstrøms denne, og middel horisontal langsgående, horisontal tværgående, vertikal tværgående dispersiviteter). Der er beregnet usikkerheder på de nævnte parametre. Desuden er parametrene nedbrydningshastighed, tilbageholdelse, samt kildegeometri, -styrke og alder benyttet i 3D-værktøjet.

Forureningsudbredelsen er optegnet ud fra målte koncentrationer, og usikkerheden på forureningsafgrænsningen er beregnet med den numeriske model som konfidenskurver for overskridelse af valgt tærskelværdi.

4.5.2 Afbildning af koncentrationer for forurenede grundvand

I Tabel 13 er for det forurenede magasin på Lolland vist parametre fra den numeriske modellering, og i Figur 51 er vist modellens beskrivelse af middelfanens horisontale udbredelse efter 20 års simulering (stationær tilstand) i dybden med den maksimale horisontale udbredelse af forureningen, samt tilsvarende den vertikale fordeling af ethylbenzen. Det optegnede felt er 120 m bredt og 210 m langt.

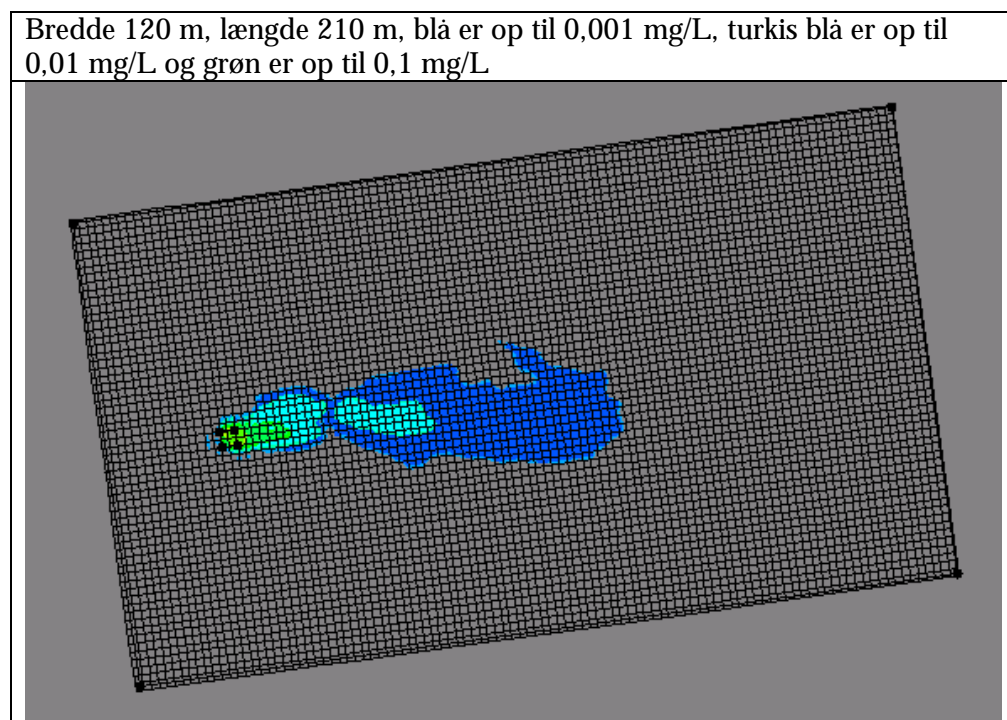
Tabel 13

Parameterværdier for kildestyrke, geologi og hydrogeologi benyttet som for det forurenede magasin på Lolland, modeldata og modificeret fra /1/.

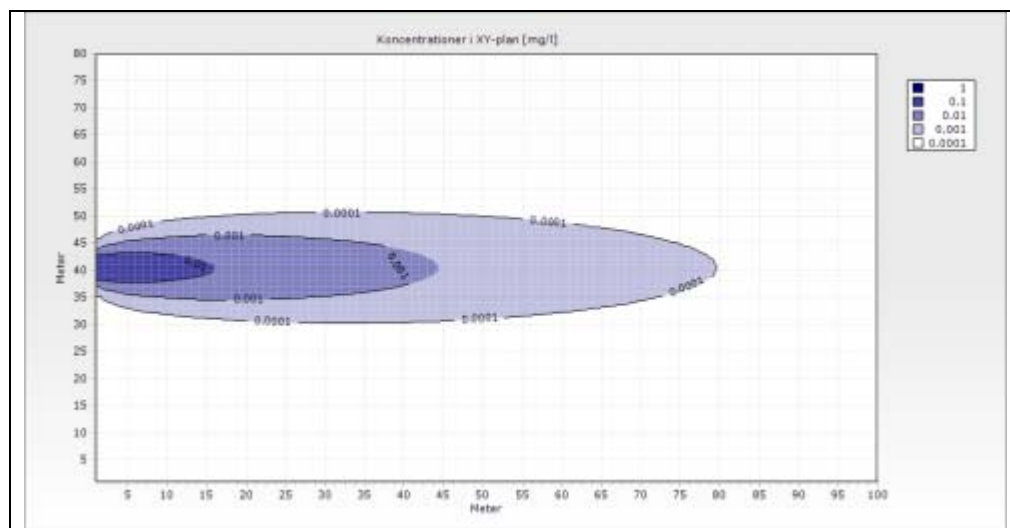
Parameter	Værdi	Usikkerhed	Kommentarer
Kildebredde (m)	4	-	Ingen
Kildehøjde (m)	0,5	-	Ingen
Forureningsstof	Ethylbenzen	-	Ingen
Kildestyrke (mg/L)	0,06	0%	Ingen
Tid siden forurening (dage)	7300	0%	Ingen
Bredde filter (m)	0,5	-	Ingen
Midte filter (m)	0,25	-	Ingen
Længde magasin (m)	100	-	Ingen
Bredde magasin (m)	80	-	Ingen
Dybde magasin (m)	10	-	Ingen
Hydraulisk ledningsevne (m/s)	$2,69 \cdot 10^{-3}$	Faktor 1,065	Ingen
Hydraulisk gradient (-)	$4,56 \cdot 10^{-3}$	10%	Ingen
Udbredelsesretning	0	5°	Ingen
Dispersivitet (x, langs strømlinie, m)	6,2	Faktor 1,63	Ingen
Dispersivitet (y, på tværs af strømlinie, m)	0,41	Faktor 1,39	Ingen

Parameter	Værdi	Usikkerhed	Kommentarer
Dispersivitet (z, dybde, m)	0,017	Faktor 1,82	Ingen
Nedbrydningsrate (dag ⁻¹)	0,0009	65%	Anslået ud fra middel og mindste værdi
Volumenrumvægt (kg/L)	1,46	-	Værdi for sand
Organisk stofindhold (-)	0,001	-	Værdi for sand
Porøsitet (-)	0,45	-	Værdi for sand
Effektiv porøsitet (-)	0,2	-	Værdi for sand
Ethylbenzen fordelingskoefficient, log K _{ow} (-)	3,2	-	Ingen
Indhold af organisk stof, f _{oc} (-)	0,002	-	Justeret for at nå modelværdi for tilbageholdelse
Tilbageholdelsesfaktor (-)	3,0	40%	Anslået ud fra middel og mindste værdi

I Figur 52 er vist udbredelsen af fanen beregnet med 3D-værktøjet. Fra den numeriske modellering var den langsgående udbredelse af 0,01 mg ethylbenzen/L 23 m, af 0,001 mg ethylbenzen/L 56 m og af 0,0001 mg ethylbenzen/L 109 m.



Figur 51
Forureningsudbredelse i numerisk model for ethylbenzen horisontalt i dybde med størst udbredelse beregnet efter 20 år.

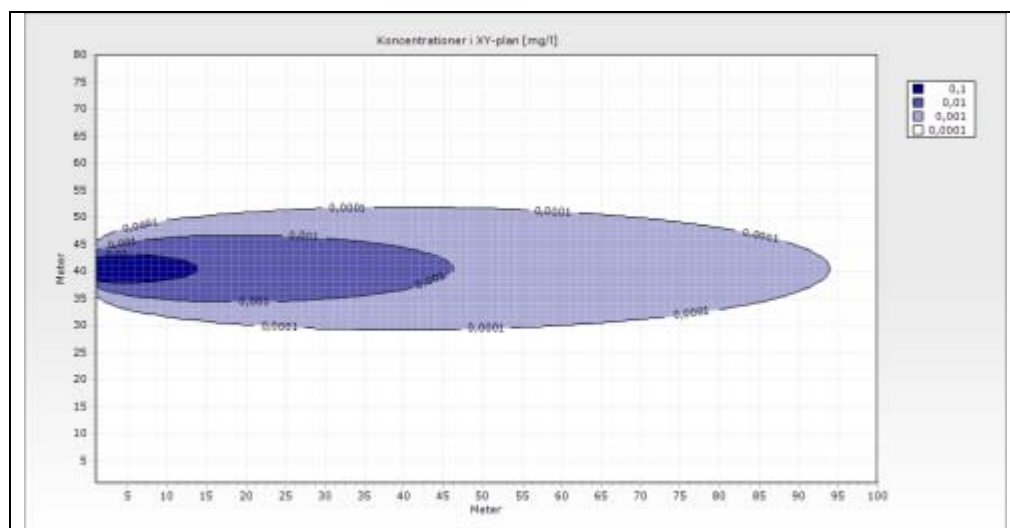


Figur 52
 Afbildning af 3D-beregnete koncentrationer for ethylbenzen i grundvandsmagasinet på Lolland, data fra Tabel 13.

3D-værktøjet giver altså forudsagt udbredelse af samme størrelsesorden med samme parametre, men med en mindre udbredelse langsgående. Bredden af fanen (0,001 mg ethylbenzen/L) var efter den numeriske modellering omkring 25 m og med 3D-værktøjet nogenlunde det samme.

I den sandsynlighedsbaserede undersøgelsesstrategi ville normalt være benyttet standardværdier for 3D-værktøjets parametre. Resultatet heraf er vist i Figur 53.

Benyttes standardparametre i 3D-værktøjet, fås altså en sandsynlighedskontur, som i lidt højere grad svarer til resultaterne fra den numeriske modellering.



Figur 53
 Afbildning af 3D-beregnete koncentrationer for ethylbenzen i grundvandsmagasinet på Lolland, standardparametre for 3D-værktøjet.

Eksemplet viser, hvordan 3D-værktøjet kan benyttes til at beskrive koncentrationsfordelingen i en fane baseret på standardparametre og med stedspecifikke parametre, men uden målinger af forureningskoncentrationen i magasinet.

4.5.3 Afbildning af sandsynlighedskonturer for forureninger i et magasin

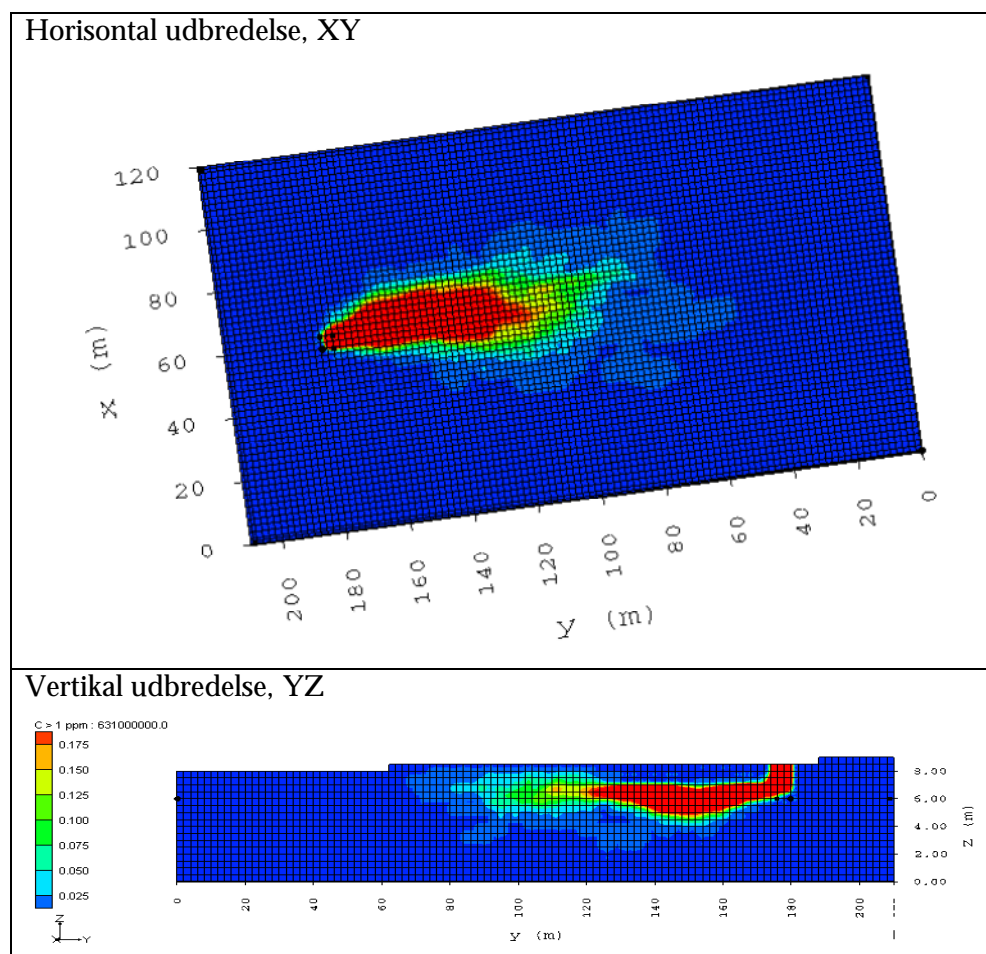
I Figur 54 er vist horisontalt og vertikalt plot af sandsynligheden for, at koncentrationen af ethylbenzen overskrider $1 \mu\text{g/L}$ ($0,001 \text{ mg/L}$), som opnået ved numerisk modellering for grundvandsmagasinet på Lolland.

Det ses, at der er 95% sandsynlighed for, at forureningen overskrider kriteriet indenfor 120 m fra kilden og indenfor en bredde på 40 m.

I Figur 55 er vist konturer for 65% og 95% sikker afgrænsning af fanen med $0,001 \text{ mg ethylbenzen/L}$ som kriterium for fanen i grundvandsmagasinet på Lolland.

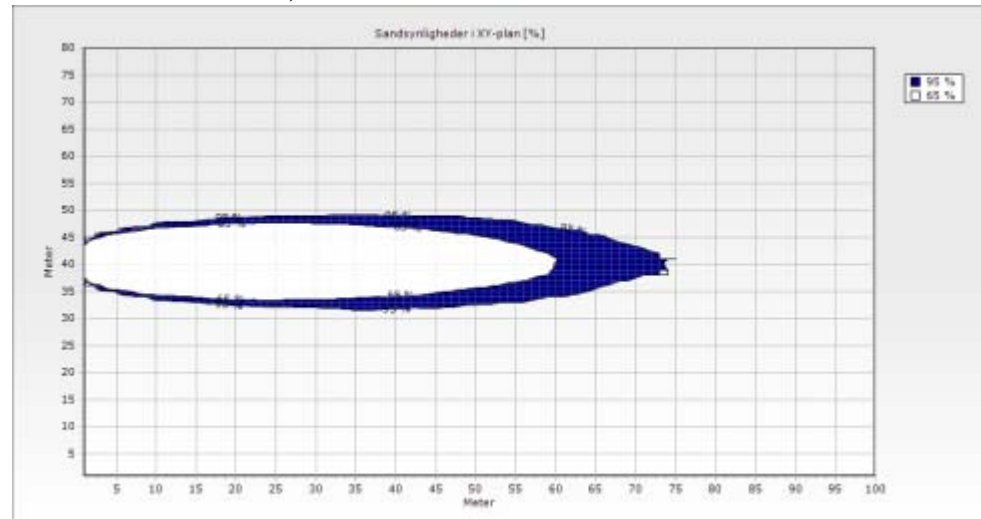
Konturen for 95% overholdelse af kriteriet er altså mindre omfattende med 3D-værktøjet (70-75 m lang, 20 m bred) end ved den avancerede numeriske modellering.

Eksemplet viser, hvordan 3D-værktøjet kan benyttes til at beregne kontur for overholdelse af kriterium i en fane baseret på standardparametre og med stedspecifikke parametre, men uden målinger af forureningskoncentrationen i magasinet. Eksemplet viser også, at uden inddragelse af koncentrationsmålinger, kan faneafgrænsningen blive for begrænset.

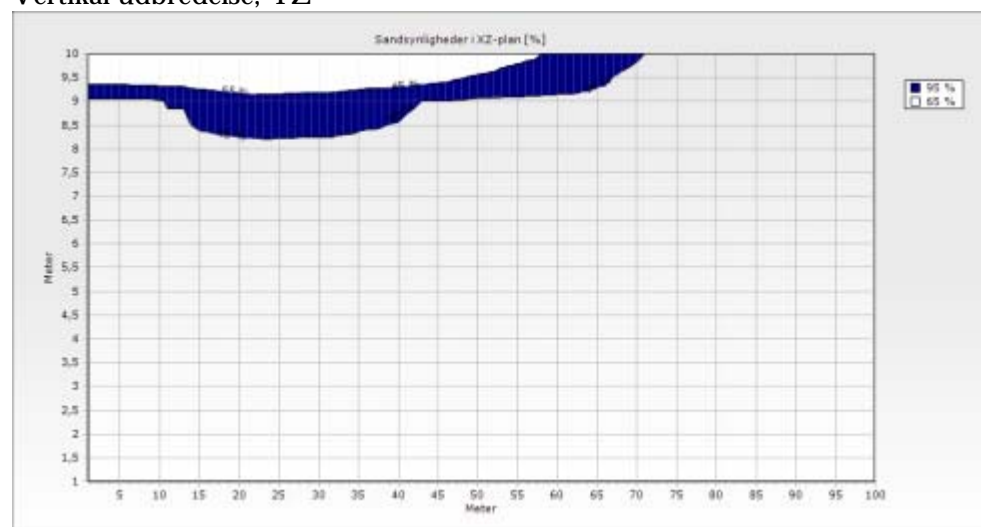


Figur 54
Kontur for risiko for overskridelse af kriterium på $0,001 \text{ mg ethylbenzen/L}$ opnået ved numerisk modellering.

Horisontal udbredelse, XY



Vertikal udbredelse, YZ



Figur 55

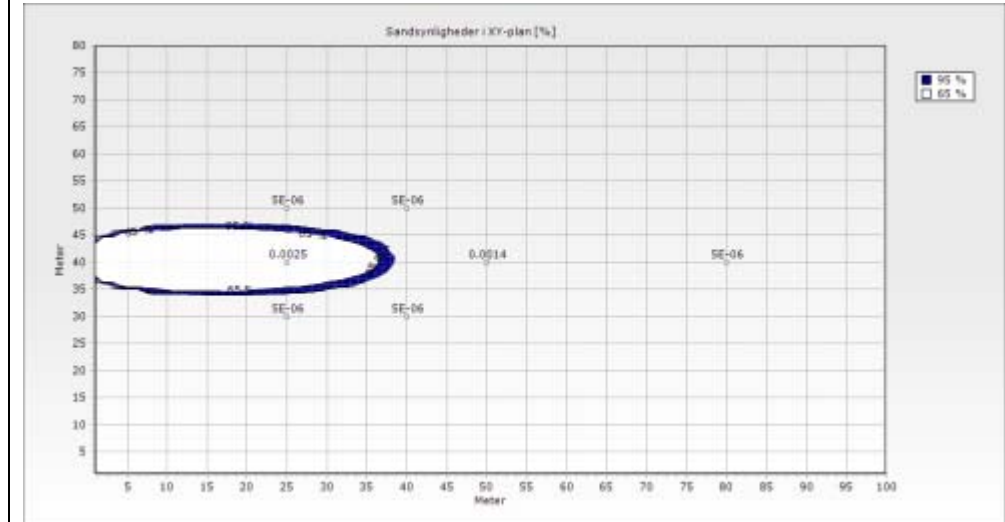
3D-beregnet kontur for overholdelse af kriterium på 0,001 mg ethylbenzen/L i magasinet på Lolland med forskellig sikkerhed, data fra Tabel 13.

4.5.4 Effekt af supplerende undersøgelser

For at vise beskrivelsen med 3D-værktøjet med målinger er for den numeriske modellering af magasinet på Lolland valgt én af de ovenfor beskrevne TPROGS realisationer. Forureningsbeskrivelsen fra denne realisation betragtes som en "facitliste". Realisationen er altså benyttet som en "målt" fane, hvis udbredelse blot kendes med stor nøjagtighed. Der er derefter placeret syv boringer, hvor koncentrationen er aflæst fra "facitlisten". Der er ligeledes gennemført en "pejlerunde" i boringerne, således at den hydrauliske gradient har kunnet justeres.

I Figur 56 er vist konturer for overholdelse af kriteriet på 0,001 mg ethylbenzen/L sammen med de indlagte supplerende målinger.

Horisontal udbredelse, XY



Figur 56

3D-beregnet kontur for overholdelse af kriterium i magasinet på Lolland med forskellig sikkerhed, syv supplerende målinger og justering af hydraulisk gradient medtaget, data i øvrigt fra Tabel 13.

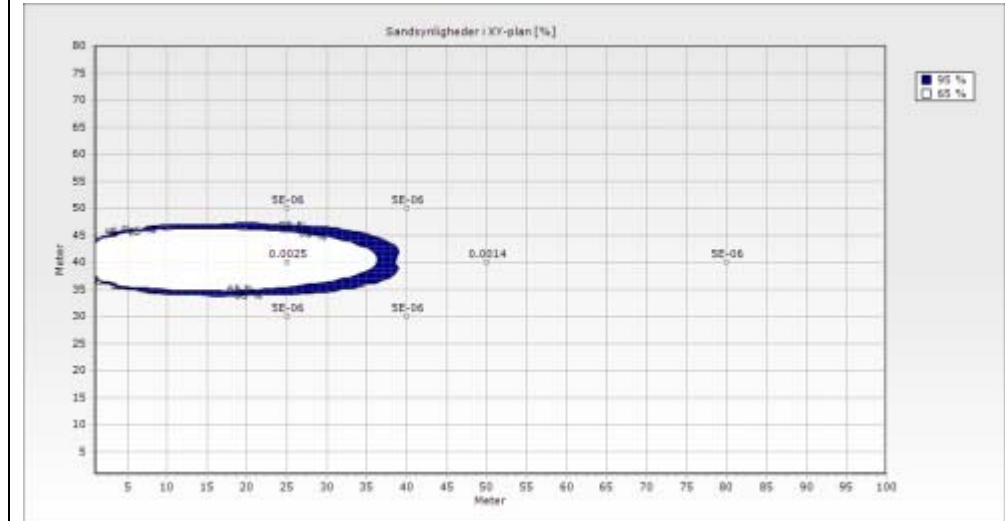
Sammenholdes konturen med målinger med konturen uden målinger, Figur 55, ses en klar indsnævring af afgrænsningen for det forurenede magasin. Det ses også, at en måling på 0,0014 mg ethylbenzen/L ikke ligger indenfor konturen for 95% sikker overholdelse af kriteriet 0,001 mg ethylbenzen/L. Dette skyldes, at 3D-værktøjet beregner en kontur, der minimerer afvigelser fra parametre og målinger, men tillader optegning af konturer, der ikke respekterer alle målinger. Et billede som i Figur 56 tyder på anvendelse af ukorrekte parameterverdier, urealistisk lave parameterusikkerheder eller for få borer med måleresultater.

Eksemplet viser, hvordan målinger af forureningskoncentrationen i magasinet giver en bedre afgrænsning, men også at 3D-værktøjet kan indikere manglende korrektioner eller data til beregningerne.

4.5.5 Effekt af parameterkorrektion

I Figur 57 er vist konturer for overholdelse af kriteriet på 0,001 mg ethylbenzen/L sammen med de indlagte supplerende målinger, men nu med en forudsat kildekonzentration justeret fra 0,06 til 0,09 mg ethylbenzen/L, svarende til en måling fra "facitlisten".

Horisontal udbredelse, XY



Figur 57

3D-beregnet kontur for overholdelse af kriterium i magasinet på Lolland med forskellig sikkerhed, syv supplerende målinger, justering af hydraulisk gradient og korrektion af kildekonzentration medtaget, data i øvrigt fra Tabel 13.

Denne korrektion af parameteren kildestyrke gav ikke umiddelbart en forbedret overensstemmelse imellem kontur for overholdelse og målte koncentrationer.

Eksemplet viser, at ikke alle korrektioner af parametre giver konsistens imellem beregnede konturer og målinger.

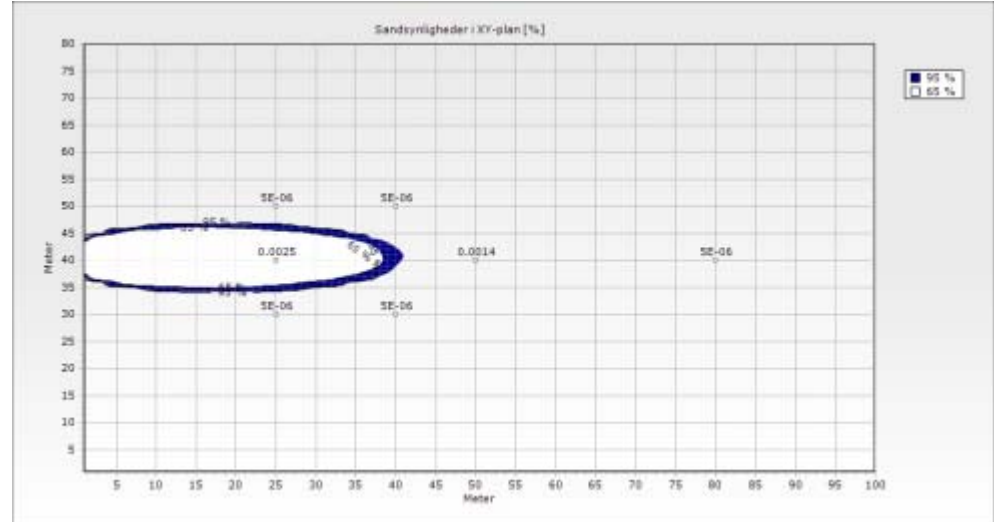
4.5.6 Effekt af korrektion af parameterusikkerhed

I Figur 58 er vist konturer for overholdelse af kriteriet på 0,001 mg ethylbenzen/L sammen med de indlagte supplerende målinger, men nu med en usikkerhed på kildekonzentrationen på 50%, som indikeret af den tidligere omtalte måling fra "facitlisten".

Den korrektion af parameterusikkerheden gav en 95% sikker overholdelse af 0,001 mg ethylbenzen/L kontur tættere på observationen 0,0014 mg, men ikke omfattende denne.

Eksemplet viser også, at ikke alle korrektioner af parametre giver konsistens imellem beregnede konturer og målinger.

Horisontal udbredelse, XY



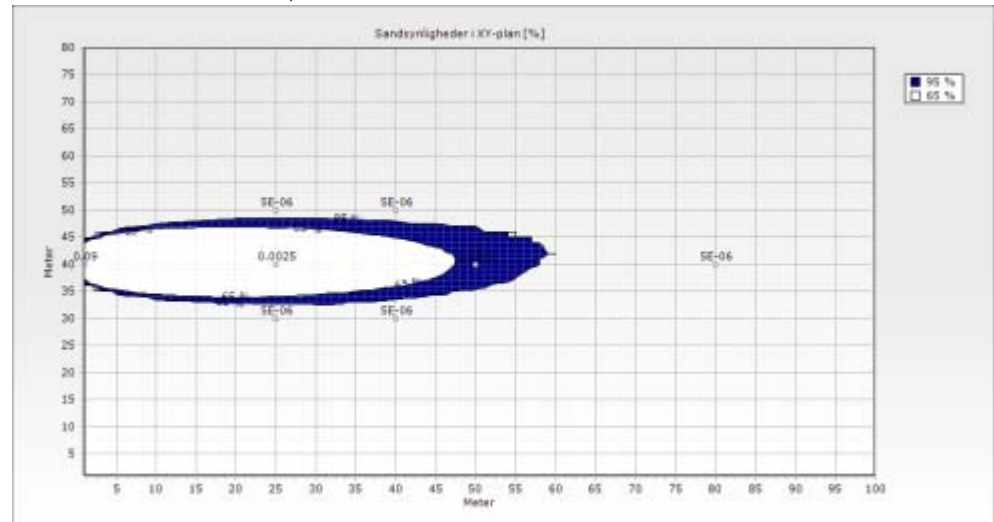
Figur 58

3D-beregnet kontur for overholdelse af kriterium i magasinet på Lolland med forskellig sikkerhed, syv supplerende målinger, justering af hydraulisk gradient medtaget og korrektion af usikkerhed på kildekonzentration, data i øvrigt fra Tabel 13.

4.5.7 Effekt af ekstra målepunkt

I Figur 59 er vist konturer for overholdelse af kriteriet på 0,001 mg ethylbenzen/L sammen med de indlagte supplerende målinger, men nu med en ekstra måling på 0,09 mg ethylbenzen/L tæt på kilden, som aflæst i "facitlisten".

Horisontal udbredelse, XY



Figur 59

3D-beregnet kontur for overholdelse af kriterium i magasinet på Lolland med forskellig sikkerhed, syv supplerende målinger, justering af hydraulisk gradient medtaget og ekstra boring med måleresultat lige nedstrøms kilde, data i øvrigt fra Tabel 13.

Den korrektion af parameterusikkerheden gav en 95% sikker overholdelse af 0,001 mg ethylbenzen/L kontur, som omslutter observationen 0,0014 mg.

De tre sidste eksempler viser samlet, hvordan kontinuert indarbejdning af mere retvisende parameterværdier og supplerende målinger giver mere retvisende sammenhæng imellem beregnede konturer for kriterieoverholdelse og målinger.

4.5.8 Effekt af stedspecifikke hydrogeologiske/geologiske parameterværdier

For injektionsfeltet i Jylland er illustreret effekten af at benytte generelle parameterværdier og specifikke værdier, her opnået ved numerisk modellering. Der er benyttet et arbitrært kriterium på 40 mg klorid/L, fordi dette gav den optimale illustration af effekten. Der er benyttet parameterværdier og -usikkerheder som opnået ved den numeriske modellering, se Tabel 14, men også benyttet standardparametre som angivet i /1/.

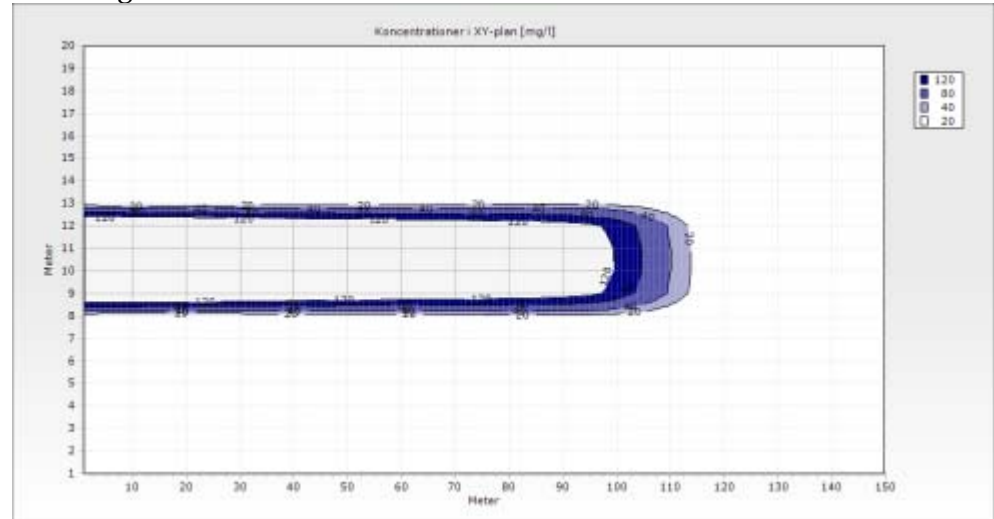
Tabel 14

Parameterværdier for kildestyrke, geologi og hydrogeologi som benyttet som for injektionsfeltet i Jylland, modeldata og standard værdier modificeret fra /1/.

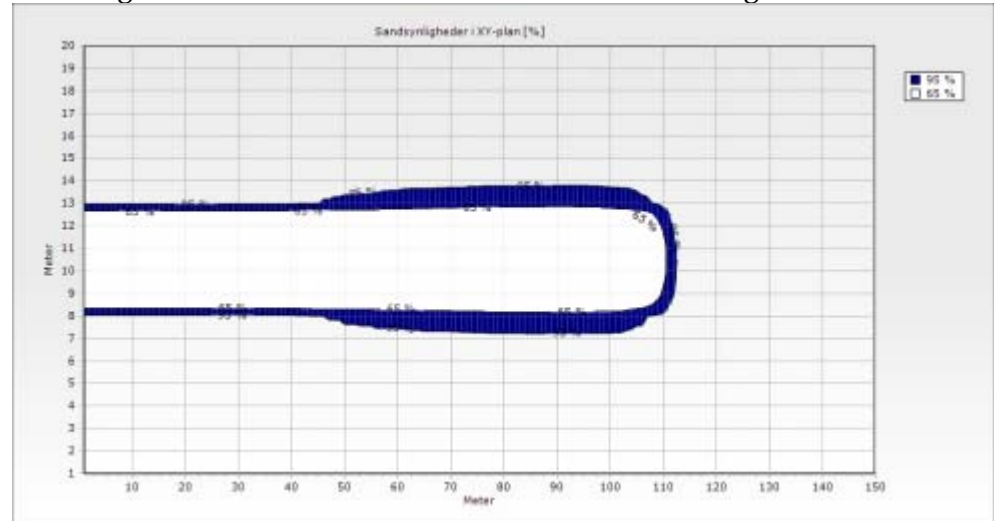
Parameter	Standard		Stedspecifikke	
	Værdi	Usikkerhed	Værdi	Usikkerhed
Kildebredde (m)	4	-		
Kildehøjde (m)	0,5	-		
Forureningsstof	Klorid	-		
Kildestyrke (mg/L)	200	-		
Tid siden forurening (dage)	365	-		
Bredde filter (m)	0,5	-		
Midte filter (m)	0,25	-		
Længde magasin (m)	150	-		
Bredde magasin (m)	20	-		
Dybde magasin (m)	5	-		
Hydraulisk ledningsevne (m/s)	$2 \cdot 10^{-4}$	Faktor 2	$7,45 \cdot 10^{-4}$	Faktor 1,035
Hydraulisk gradient (-)	$5 \cdot 10^{-3}$	10%	$4,35 \cdot 10^{-3}$	1,0%
Udbredelsesretning	0 °	20°	0°	0,59°
Dispersivitet (x, langs strømlinie, m)	13	Faktor 10	0,60	Faktor 1,1
Dispersivitet (y, på tværs af strømlinie, m)	1,3	Faktor 10	0,0016	Faktor 1,1
Dispersivitet (z, dybde, m)	0,13	Faktor 10	0,0009	Faktor 1,2
Effektiv porøsitet (-)	0,25	-	0,35	

I Figur 60 er vist 3D-beregnete koncentrationer og konturer for overholdelse af kriterium med standardparameterværdier og med stedspecifikke parameterværdier. Parametre for nedbrydning og tilbageholdelse er ikke inddraget, idet disse ikke er relevante for et konservativt stof som klorid.

3D-beregnete koncentrationer



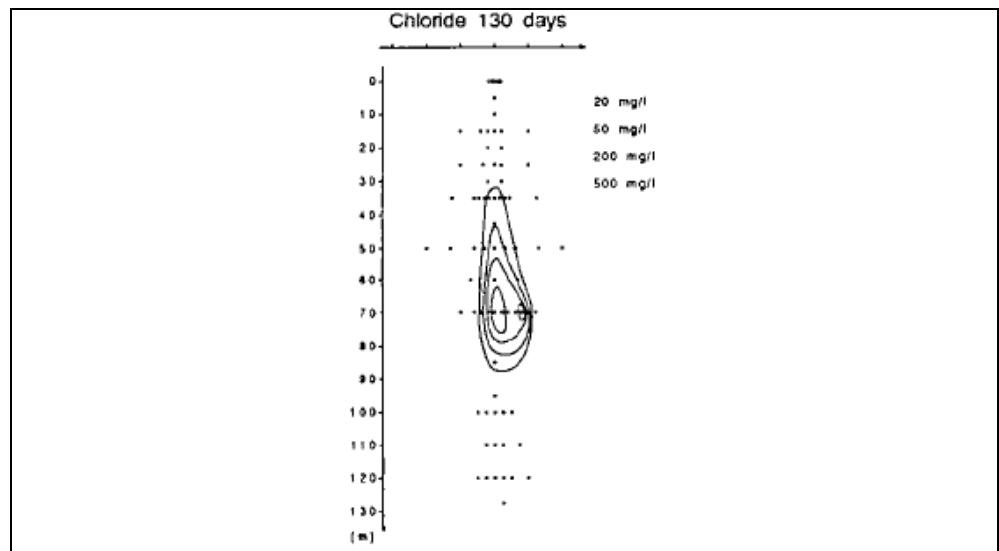
3D-beregnete konturer for overholdelse af kriterium 40 mg klorid/L



Figur 60

3D-beregnete koncentrationer og konturer for overholdelse af kriterium med stedspecifikke parameterværdier, værdier fra Tabel 14.

Til sammenligning er vist kloridfanen som målt i injektionseksperimentet /49/. Det skal bemærkes, at parametrene ikke er helt sammenlignelige, blandt andet benytter 3D-værktøjet en kontinuert kilde, hvor injektionseksperimentet er en midlertidig kilde.

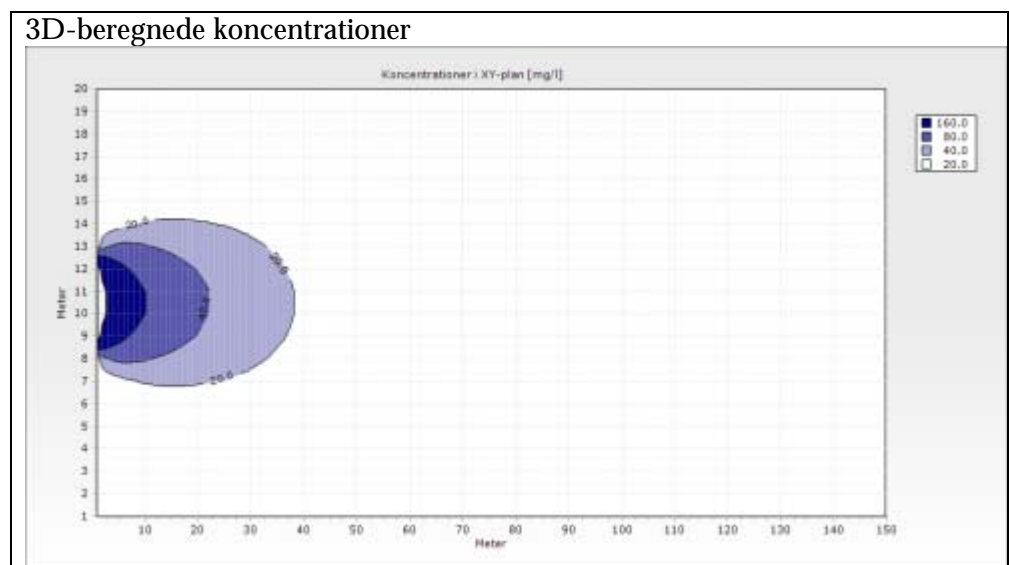


Figur 61
Kloridfane efter 130 dage i injektionseksperimentet i Jylland /49/.

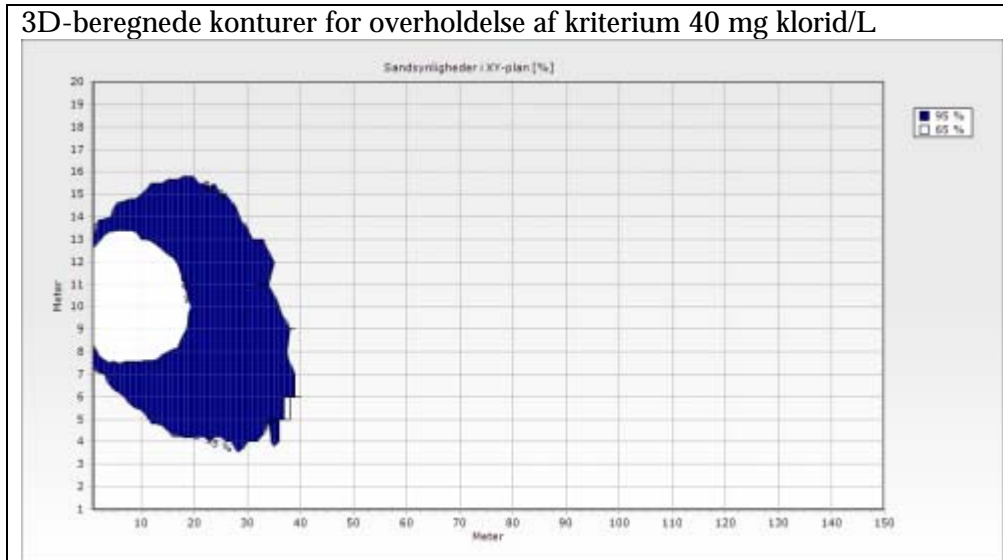
3D-værktøjet forudsiger med stedspecifikke parametre en godt 110 m lang og 7 m bred fane, hvor feltmålingerne viste en næsten 90 m lang og cirka 15 m bred fane.

Benyttes i stedet standardparametre for grovkornet sand, en forudsætning om langsgående dispersivitet på 1/10 af den forventede faneudbredelse, samt tværgående og vertikale dispersiviteter på henholdsvis 1/10 og 1/100 af den langsgående, fås udbredelse som vist i Figur 62.

3D-værktøjet beskriver med standardparametre en kortere og bredere fane end målt i felten. Den forskellige koncentrationsbeskrivelse og kontur opnået med 3D-værktøjet for standardparametre og stedspecifikke parametre skyldes en højere hydraulisk ledningsevne og mindre dispersiviteter i det stedspecifikke parametersæt, der jo er baseret på numerisk modellering af data.



3D-beregnete konturer for overholdelse af kriterium 40 mg klorid/L



Figur 62

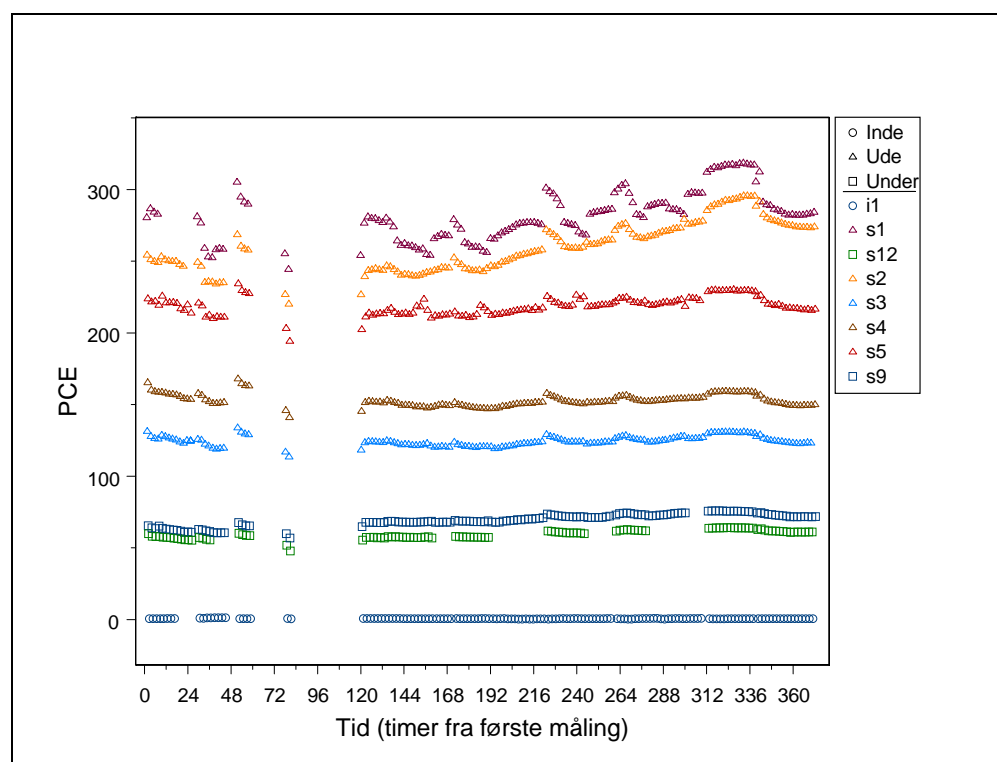
3D-beregnete koncentrationer og konturer for overholdelse af kriterium med standardparameterværdier, værdier fra Tabel 14.

Eksemplet viser betydningen af en så retvisende fastlæggelse af stedspecifikke parameterværdier som muligt.

5 Poreluft

Anvendelsen af geostatistik til beskrivelse af forureningsfordeling hviler på den forudsætning, at sammenhængen imellem koncentrationen i ét punkt og et andet punkt afhænger af afstanden imellem dem. For poreluft er den tidlige variation typisk indenfor en kortere tid end tiden for en undersøgelse med målinger af forureningskoncentrationer i poreluften, se også Afsnit 2.1.4. Derfor er indledningsvist foretaget en afprøvning af forudsætningen om sammenhæng imellem koncentrationer og afstande.

Afprøvningen er baseret på data fra intensive måleresultater for tetraklorethen på en forurenet grund betegnet "sandet lokalitet" i rapporten over målingerne /50/.



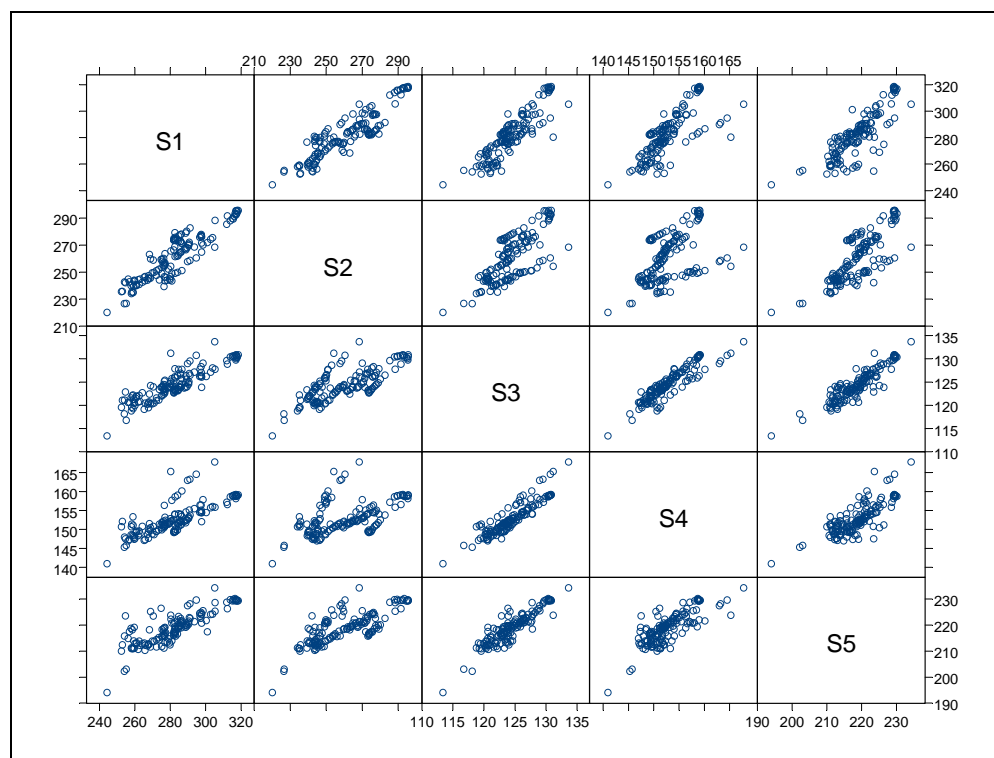
Figur 63

Poreluftmålinger for tetraklorethen (mg/m^3) fra sandet lokalitet /50/ udenfor bebyggelse, indeluft og under gulv.

Målingerne viser en tydelig sammenhæng i tid, det vil sige målinger taget tæt på hinanden ligner hinanden, men også tydelige spring i koncentration. Et kritisk punkt for anvendelsen af geostatistik bliver så, om koncentrationer varierer på samme måde over tid for hvert sæt af borer, således at forudsætningen om variation styret af afstanden imellem målepunkterne holder. Dette er illustreret i Figur 64, hvor målinger til et bestemt tidspunkt er afbildet for hvert par af de fem udeluft målepunkter.

For S1 og S2, samt for S3 og S4 er der tæt på lineær sammenhæng imellem koncentrationerne i de to målepunkter til forskellige tider, det vil sige at forudsætningen om afstandsbetiget variation formodentlig er overholdt. For de øvrige par er der langt fra lineær sammenhæng. Det vil sige, at variationen i

poreluftkoncentrationer imellem par af boringer snarere varierer med tid imellem målingerne end med afstand imellem målepunkterne. Da den tidlige variation samtidig foregår på en skala svarende til tiden imellem to målinger, vil det ikke være muligt at gennemføre en undersøgelsesserie, hvor antagelsen om afstandsbetiget variation er opfyldt.



Figur 64

Sammenhængen imellem poreluftmålinger for tetraklorethen (mg/m^3) i par af målepunkter til udeluft, data fra /50/.

Figur 63 viser, at dette vil gælde i endnu højere grad, hvis poreluftmålinger i udenfor bebyggelse søges kombineret med poreluft under bebyggelse eller endda med indeluft.

Dette eksempel viser, at den tidlige variation i poreluftmålinger kan være så stor i forhold til variationen betinget af afstand, at en geostatistisk metode ikke giver mening.

Af Tabel 15 ses, at poreluftmålingerne for hver tidsserie for målepunkterne udenfor bebyggelse viser relativ lille gennemsnitlig usikkerhed, men også at enkeltmålinger for samme målepunkt kan variere betydeligt.

Tabel 15

Gennemsnit og variation for poreluftmålinger (mg tetraklorethen/ m^3) for målepunkter udenfor bebyggelse.

Boring	S1	S2	S3	S4	S5
Gennemsnit	282	260	120	153	219
Standardafvigelse	17	17	3,4	4,2	6,2
Variationskoefficient	6,0%	6,5%	2,7%	2,7%	2,8%
Mindste værdi	240	220	110	140	190
Største værdi	320	300	130	170	230

Ud fra sandsynlighedsplot kan det ses, at de her benyttede poreluftmålinger er normalfordelte eller tæt på normalfordelte (plot ikke vist) for hvert målepunkt. Under forudsætning af, at de enkelte målinger er uafhængige, kan derfor man

tage beslutningen forurennet eller ikke forurennet for et enkelt målepunkt med valgt sikkerhed som beskrevet i Afsnit 2.1.8 ud fra gennemsnit, standardafvigelse, kriterium og antal målinger.

Imidlertid fremgår det af Figur 63, at målingerne ikke er uafhængige, idet målinger tæt på hinanden i tid også ligner hinanden i koncentration. Derfor skal en beslutning baseres på målinger adskilt i tid med varierende tidsintervaller mellem målingerne. En statistisk analyse (ikke vist) angiver, at for disse målinger vil en tid på ikke mindre end ét døgn imellem gentagne målinger være nødvendigt for at reducere den tidslige afhængighed til ikke over 20%.

Beslutningen forurennet eller ikke forurennet kan i stedet træffes for prøvetagningsfelter med flere målepunkter baseret på gennemsnit, standardafvigelse, kriterium og antal målinger i prøvetagningsfeltet som beskrevet i Afsnit 2.1.8. Her kan den tidslige variation indebære en risiko for en forkert beslutning, hvis målingerne udføres i en periode med særligt lave eller høje koncentrationer, sammenlign mindste og største værdier for målepunkterne i Tabel 15.

Den optimale beslutning vil derfor være baseret på gentagne målinger i hvert prøvetagningspunkt med, ud fra målingerne i dette eksempel, ikke mindre end 24 timer imellem hver måling. Beslutningen kan tages for hvert målepunkt, eller for prøvetagningsfelter med flere målepunkter.

For beslutning for hvert enkelt målepunkt vil dette kræve:

$$\bar{x}_t + \frac{s_t \times t_{0.95}}{\sqrt{n_t}} < K, 95\% \text{ sikkerhed}$$

I formlen er s_t den samlede standardafvigelse på poreluftmålinger i ét målepunkt over tid, n_t er antallet af målinger over tid i målepunktet, \bar{x}_t er deres gennemsnit, og $t_{0.95}$ er en statistisk faktor, der kan findes ved tabelopslag.

For beslutning for et prøvetagningsfelt med flere målepunkter vil dette kræve:

$$\bar{x}_{mp} + \frac{s_{mp} \times t_{0.95}}{\sqrt{n_{mp} \times n_t}} < K, 95\% \text{ sikkerhed}$$

I formlen er s_{mp} standardafvigelsen på gennemsnitlige poreluftmålinger i ét prøvetagningsfelt, n_{mp} er antallet af målepunkter i feltet, \bar{x}_{mp} er gennemsnit af de gennemsnitlige målinger i hvert målepunkt, og $t_{0.95}$ er en statistisk faktor, der kan findes ved tabelopslag.

I formlen for beslutning for prøvetagningsfelt vil usikkerhedsleddet falde med antal målinger over tid per målepunkt og med antal målepunkter per prøvetagningsfelt. En højere gennemsnitlig koncentration kan altså accepteres med fastholdt, for eksempel 95% sikkerhed, for, at poreluften i prøvetagningsfeltet ikke er forurennet, hvis der udføres flere målinger fordelt over tid og prøvetagningsfelt.

6 Måling af undersøgelses- usikkerhed

I de udviklede værktøjer (geostatistik værktøj til jord og 3D-værktøj til grundvand) indgår usikkerheden på den samlede beskrivelse af forureningsudbredelsen som beregnet med værktøjerne. Det kan også være nyttigt at måle den gennemsnitlige usikkerhed på resultaterne for et område, der, som beskrevet i Afsnit 2.1.3, omfatter usikkerhedskomponenterne analyseusikkerhed, prøvetagningsusikkerhed og variation. Den mest praktiske metode til bestemmelse af gennemsnitlig usikkerhed og usikkerhedskomponenter er gentagelsesmetoden med split, som detaljeret beskrevet i /20/ og /14/ med et gennemarbejdet eksempel for grundvand præsenteret i /15/. I Tabel 16 er vist to eksempler på usikkerhedskomponenter målt ved denne metode for undersøgelser af henholdsvis jord og grundvand.

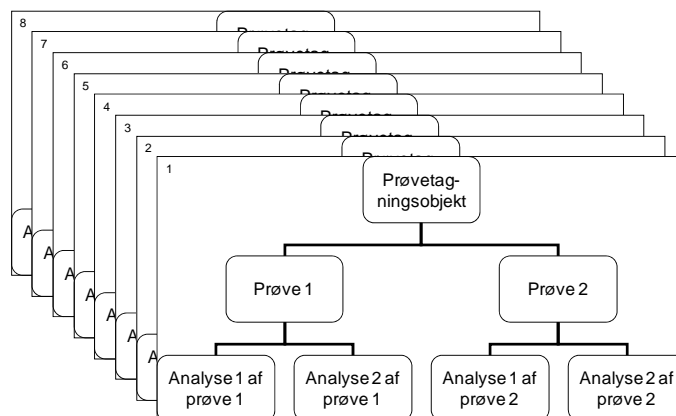
Tabel 16

Usikkerhedskomponenter ved undersøgelse af bly i jord /14/ og jern i grundvand /15/.

	Usikkerhedskomponenter			Samlet usikkerhed	Gennemsnit
	Analyse	Prøvetagning	Variation		
Bly i jord	3,7%	41%	60%	73%	300 mg bly/kg jord
Jern i grundvand	1,1%	5,2%	35%	35%	1,7 mg jern/L grundvand

Havde vi for undersøgelsen beskrevet i Figur 15 opnået en relativ usikkerhed på undersøgelsen i intervallet 40-55% omkring undersøgelsespunkterne, se Figur 20, ville en gennemsnitlig usikkerhed på målingerne – som her for bly i jord på 73% – tyde på, at undersøgelsens usikkerhed nu var tæt på det opnåelige. Dog ville en forbedret undersøgelsesusikkerhed stadig kunne opnås for eksempel ved, alt andet lige, at øge antallet af undersøgelsespunkter, se Afsnit 2.1.5.

Fremgangsmåden i usikkerhedsanalyse ved gentagelsesmetoden med split er simpelthen på et antal positioner under en undersøgelse at udtage dobbeltprøver under anvendelse af den fulde prøvetagningsmetode. Hver af disse dobbeltprøver opdeles i to delprøver, som hver for sig analyseres. Princippet er vist i Figur 65.



Figur 65
Fremgangsmåden i usikkerhedsanalyse ved gentagelsesmetoden med split.

Usikkerheden på hvert niveau udregnes fra den gennemsnitlige forskel på resultaterne. Forskellen, R_i , på to samhørende resultater, x_{i1} og x_{i2} , fra gentagelse nummer i beregnes som:

$$R_i = |x_{i1} - x_{i2}|$$

Gennemsnittet, x_i , beregnes som:

$$x_i = \frac{x_{i1} + x_{i2}}{2}$$

Den relative forskel, r_i , beregnes som:

$$r_i = \frac{R_i}{x_i}$$

Den gennemsnitlige relative forskel beregnes som:

$$r = \frac{\sum r_i}{n}$$

Derefter kan den relative standardafvigelse, CV , beregnes som:

$$CV = \frac{r * 100}{1.128} \%$$

De enkelte usikkerhedskomponenter kan derefter beregnes ud fra sammenhængen imellem disse og den samlede usikkerhed, se Afsnit 2.1.3. Et eksempel på beregningerne er vist i Tabel 17.

Tabel 17

Eksempel på beregning af samlet usikkerhed ved undersøgelse af krom i jord, fra /51/.

<p><i>En grund i et gammelt industri- og boligkvarter har igennem 50 år frem til 1980 været benyttet til galvaniseringsanstalt. Derefter er bygningerne brugt i 20 år til småindustri, bilværksteder og anden blandet virksomhed. Betondæk, veje, kloakering og andre typer af infrastruktur er forfaldet under disse sidste 20 år. Nu ønskes grunden bebygget med boliger og børneinstitution, alle bygninger er revet ned, og beton, asfalt mv. er fjernet. Der er ikke fundet tegn på nedgravede tanke på grunden. Der er taget en lang række jordprøver på grunden med karteringsspyd i 5-15 cm's dybde, og herunder er udtaget 10 feltdobbelprøver til analyse for total krom. Alle tal er i mg total Cr/kg TS, hvor andet ikke er anført.</i></p>				
x_{i1}	x_{i2}	$R_i = x_{i1} - x_{i2} $	$\bar{x}_i = (x_{i1} + x_{i2})/2$	$r_i = R_i / \bar{x}_i$ (ubenævnt)
20	2	18	11	1,64
223	157	66	190	0,35
312	150	162	231	0,70
816	432	384	624	0,62
55	125	70	90	0,78
54	224	170	139	1,22
442	325	117	384	0,31
765	755	10	760	0,01
32	516	484	274	1,77
650	15	635	333	1,91
$\bar{r} = \Sigma r_i/n = 0,93$ (ubenævnt)		$CV = \bar{r} * 100/1,128\% = 82\%$		$\bar{X} = \Sigma \bar{x}_i/n = 304$
<p><i>For denne grund og den benyttede prøvetagningsmetode er den totale usikkerhed for målt kromindhold altså cirka 80% beregnet som relativ standardafvigelse. For en forureningssituation som beskrevet her vil denne usikkerhed ikke blive vurderet som en indikation af problematisk prøvetagningsteknik.</i></p>				

Måling af undersøgelsesusikkerheden er særlig nyttig, hvis tilpasning af prøvetagningsstrategi, for eksempel ved udtagning af ekstra prøver eller ved forbedret opdeling i prøvetagningsfelter, ikke kan nedbringe undersøgelsesusikkerheden tilstrækkeligt. En høj analyse- eller prøvetagningsusikkerhed kan så indikere, at forbedring af metoderne her vil kunne nedbringe den samlede undersøgelsesusikkerhed. Modsat kan en variation af samme størrelsesorden som den samlede undersøgelsesusikkerhed indikere, at supplerende prøvetagning er den eneste farbare vej til reduktion af den samlede undersøgelsesusikkerhed.

Måling af undersøgelsesusikkerheden skal udføres som en del af den samlede undersøgelse og dermed planlægges tidligt i undersøgelsesforløbet.

7 Rapportering af resultater og risikovurdering med usikkerhed

Akkrediterede analyseresultater skal normalt opgives med tilhørende usikkerhed. Dansk Akkreditering angiver i udkast til Teknisk Forskrift /52/ i høring, at:

Oplysning om måleusikkerhed i rapporter skal altid opgives, når denne oplysning er relevant for anvendelsen af måleresultaterne, når oplysningen er et krav fra kunden, eller når usikkerheden har indflydelse på overholdelse af en specifikationsgrænse (overensstemmelseserklæring).

Hvis måleusikkerheden for prøvetagningen eller andet relevant bidrag ikke er medtaget i usikkerhedsangivelsen, skal dette fremgå af rapporten,

Usikkerheden skal angives som den ekspanderede måleusikkerhed U svarende til et sandsynlighedsinterval på 95%. Dette svarer principielt til det, der er beskrevet i Afsnit 2.1.1 af denne rapport. Dog anviser den tekniske forskrift brugen af en faktor på 2, fordi der ikke på forhånd er taget stilling til udgangspunktet for vurderingen af spørgsmålet forurenet eller ikke forurenet (der benyttes en tosidet test, hvor der i Afsnit 2.1.1 benyttes en énsidet test).

Rapporteringen kunne dermed se ud som vist i Tabel 18.

Tabel 18

Eksempler på rapportering af analyseresultater med usikkerhed, efter /52/.

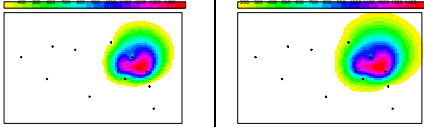
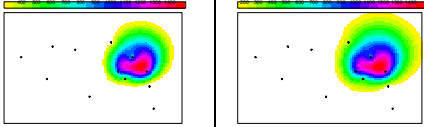
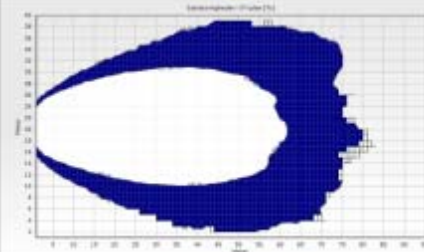
Prøvenavn	Resultat	Usikkerhed
Integreret rapportering	50±5 mg/kg	-
Separat med absolut usikkerhed	50 mg/kg	5 mg/kg
Separat med relativ usikkerhed	50 mg/kg	10%

Med henblik på at understøtte beslutninger forurenet eller ikke forurenet for et materiale forventet uforurenet, kan derfor benyttes en rapportering som vist i Tabel 19. Rapporteringsforslagene er delt op efter datagrundlaget fra den rapporterede undersøgelse. Der henvises til rapportens beskrivelser i tidligere afsnit for beskrivelse og underbygning af forslagene.

Tabel 19

Forslag til rapportering af undersøgelsesresultater med usikkerhed.

Datagrundlag	Resultat	Beslutningssikkerhed		Kommentar
		65%	95%	
Ét analyseresultat				Sandsynligheds baseret beslutning er ikke mulig
Flere resultater for et materiale, tidslig variation lille	\bar{x}	$\frac{s \times t_{0,65}}{\sqrt{n}}$	$\frac{s \times t_{0,95}}{\sqrt{n}}$	Kan for eksempel benyttes for på forhånd fastlagt prøvetagningsfelt på forurenet grund

Flere resultater for et materiale, tidslig variation stor	\bar{x}_{imp}	$\frac{S_{imp} \times C_{0,EB}}{\sqrt{S_{imp} \times N_T}}$	$\frac{S_{imp} \times C_{0,EB}}{\sqrt{S_{imp} \times N_T}}$	Kan for eksempel benyttes for et antal målepunkter for poreluft på forurennet grund
Flere resultater for et område, immobilt materiale				Kan for eksempel benyttes for jorden på en forurennet grund
Flere resultater for et område, mobilt materiale				Kan for eksempel benyttes for grundvandet på en forurennet grund

Den foreslåede rapporteringsform giver mulighed for at inddrage sikkerhed i beslutning svarende til det, som er besluttet med hensyn til nødvendig beslutningssikkerhed, samt til det, som er muligt og relevant ud fra datagrundlaget.

8 Referencer

1. Miljøstyrelsen. Oprydning på forurenede lokaliteter. Miljøstyrelsens Vejledninger nr. 6 og 7 1998. 1998.
2. Miljøstyrelsen. Branchevejledning for olie- og benzinformurenede grunde. Vejledning fra Miljøstyrelsen nr. 11 1998. 1998.
3. Miljøstyrelsen. Branchevejledning for forurenede garverigrunde. Vejledning fra Miljøstyrelsen nr. 9 1998. 1998.
4. Miljøstyrelsen. Branchevejledning for forurenede træimprægneringsgrunde. Vejledning fra Miljøstyrelsen nr. 8 1998. 1998.
5. Miljøstyrelsen. Branchevejledning for forurenede tjære-/asfaltgrunde. Vejledning fra Miljøstyrelsen nr. 10 1998. 1998.
6. Miljøstyrelsen. Rådgivning af beboere i lettere forurenede områder. 2000.
7. Miljøstyrelsen. Kortlægning af forurenede arealer. 2000.
8. Miljøstyrelsen. Prøvetagning og analyse af jord. 13. 1998. København, Miljøstyrelsen. Vejledninger.
9. Miljøstyrelsen. Vejledning om områdeklassificering. Vejledning fra Miljøstyrelsen Nr. 3. 2007.
10. Holm, J. and Kjærgaard, M. Manual for program til risikovurderinger - JAGG (Jord, Afdampning, Gas, Grundvand). Miljøprojekt no. 520. 2000. Miljøstyrelsen.
11. Miljøstyrelsen. Liste over kvalitetskriterier i relation til forurenede jord. 1-12-2005.
12. Miljøministeriet. Bekendtgørelse om kvalitetskrav til miljømålinger udført af akkrediterede laboratorier, certificerede personer m.v. Bekendtgørelse 1353. 2006.
13. EU Kommissionen. Commission directive laying down, pursuant to Directive 2000/60/EC of the European Parliament and of the Council, technical specifications for chemical analysis and monitoring of water status. Draft. 2008.
14. Eurachem, EUROLAB, CITAC, and Nordtest. Measurement uncertainty arising from sampling - A guide to methods and approaches. 2007.
15. Grøn, C, Wium, M: Validering og kvalitetskontrol af grundvandsundersøgelser. *Vand og Jord* 15:32-34, 2008.
16. ISO. Guidance on sampling of groundwaters. 5667-11. 1993.

17. Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelse. Teknisk anvisning for Grundvandsovervågning. 2004.
18. Grøn,C: Kvalitetsstyring af grundvandsundersøgelser. *Vand og Jord* 15:29-31, 2008.
19. Hansen,B, Thorling,L: Interkalibrering af grundvandsprøvetagere. *Vand og Jord* 15:35-37, 2008.
20. Grøn, C., Hansen, J B, Magnusson, B., Nordbotten, A., Krysell, M., and Lund, U. Uncertainty from sampling - A Nordtest Handbook for Sampling Planners on Sampling Quality Assurance and Uncertainty Estimation. 2007. Nordtest.
21. Eurachem and CITAC. Use of uncertainty information in compliance assessment. 2007.
22. International Standardization Organisation. Statistiske metoder - Retningslinier for vurdering af overensstemmelse med specificerede krav - Del 1: Almene principper. ISO 10576-1. 2003.
23. FAO and WHO. Codex Alimentarius - General Guidelines on Sampling. 2004.
24. US EPA and US. Data Quality Objectives Process for Hazardous Waste Site Investigations. EPA/600/R-00/007. 2000.
25. Dansk Standard. Afløbskontrol, Statistisk kontrolberegning af afløbsdata. DS 2399. 1999.
26. Miljø- og Energiministeriet. Bekendtgørelse om spildevandstilladelser m.v. efter miljøbeskyttelseslovens kapitel 3 og 4. Bekendtgørelse 693. 1999.
27. Miljø- og Energiministeriet. Vejledning til bekendtgørelse om spildevandstilladelser m.v. efter miljøbeskyttelseslovens kapitel 3 og 4. Bekendtgørelse 693. 1999.
28. Dansk Standard. Statistisk grundlag for revision af Dansk Ingeniørforenings anvisning for vandforureningskontrol, NP-150-R. DS/INF 126. 1999.
29. Holst, H. Statistisk 3-D beregning af sandsynligheden for at finde en jordforurening. 1999. Miljøstyrelsen. Miljøprojekt nr. 449.
30. Starzec, P. Inventering av strategiverktyg för provtagning av jord. 2005.
31. Amternes Videncenter for Jordforurening. Erfaringsopsamling på amternes registreringsundersøgelser. Teknik & Administration nr. 3 1997. 1997.
32. Miljøkontrollen Københavns Kommune. Arbejder du med jord i Københavns Kommune. 2003.
33. Miljøstyrelsen. Bekendtgørelse om anmeldelse og dokumentation i forbindelse med flytning af jord. Bekendtgørelse 1479. 2007.

34. Grøn, C., Falkenberg, J., and Weber, K. Håndbog i prøvetagning af jord og grundvand. 2003. København, Denmark, Amternes Videncenter for Jordforurening.
35. Kjeldsen, P., Holst, H., Kaalund, L., Simonsen, Y., and Vendelboe, N. Jordprøvetagning på forurenede grunde. Udredningsrapport U8. 1991. Lossepladsprojektet.
36. Falkenberg, J. A. and Falk. Information om praksis vedrørende bortgravningskontrol. 2004.
37. Rambøll. Branchebeskrivelse for farve- og lakindustrien. 2 2004. 2004. Amternes Videncenter for Jordforurening. Teknik og Administration.
38. Amternes Videncenter for Jordforurening. Samling af stofdatablade fra branchebeskrivelser. 7 2002. 2002.
39. Miljøstyrelsen. Udpegning af områder med særlige drikkevandsinteresser. Vejledning fra Miljøstyrelsen 4 1995. 1995.
40. Danmarks Miljøportal. Områder med særlige drikkevandsinteresser. 19-3-2009.
41. US EPA. Guidance on Choosing a Sampling Design for Environmental Data Collection for Use in Developing a Quality Assurance Project Plan. EPA QA/G-5S. 2002.
42. Engelke, F., Norrman, J., Starzec, P., Andersen, L., Grøn, C., Overgaard, J., and Refsgaard, A. Inventering av provtagningsstrategier för jord, grundvatten och porgas. 5894-4. 2009. Naturvårdsverket.
43. US EPA. Using the Triad Approach to Streamline Brownfields Site Assessment and Cleanuo - Brownfields Technology Primer Series. 2003. US EPA.
44. Grøn, C., Boerling, P., Andersen, L., Cohr, K-H., Hansen, J B, Oberender, A., Nissen, S. V., Lund, U. O., and Falkenberg, J. Olie i jord - forslag til analysemetode og justering af jordkvalitetskriterier, samt grundlag for afskæringskriterier. 1225. 2008. Miljøstyrelsen. Miljøprojekt.
45. Ejlskov, P., Bjerg, P. L., and Kjeldsen, P. Grundvandsundersøgelser ved fyld- og lossepladser. Nr. 3 1998. 1998. Amternes Videncenter for Jordforurening. Teknik & Administration.
46. Kjærgaard, M, Ringsted, J. P., Albrechtsen, H.-J., and Bjerg, P. L. Naturlig nedbrydning af miljøfremmede stoffer i jord og grundvand. Miljøprojekt nr. 408 1998. 1998.
47. Christensen TH, Kjeldsen P, Christensen S, Hjelmar O, Jansen JIC, Kirkegaard C, Madsen B, Olsen N, Refsgaard JC, Toudal JK: Grundvandskontrol ved kontrollerede affaldsdeponier. DAKOFA, 1985,
48. Bjerg, P. L. and Kjeldsen, P. Grundvandsmonitoring ved ukontrollerede fyld- og lossepladser. Teknik & Administration nr. 8 1999. 1999. Amternes Videncenter for jordforurening.

49. Bjerg, P. L., Christensen, T. H., Ammentorp, H. C., Refstrup, M., and Skov, B. Vejen Injektionsfelt: Uorganisk Stoftransport. 1992.
50. Jørgensen, T. H., Glensvig, D., Buck, C., Bøte, T. V., Nilausen, L., Mortensen, P., and Skou, H. Poreluftprojekt - Styrende parametre for tidslige variationer af indholdet af klorerede opløsningsmidler i sand- og lerjorde. 1094. 2009. Miljøstyrelsen. Miljøprojekt.
51. Hansen, J. B and Grøn, C. Prøvetagning af affald og jord. Miljøstyrelsen. 2006.
52. DANAK. Estimering og rapportering af måleusikkerhed ved kvantitativ kemisk og mikrobiologisk prøvning samt medicinsk undersøgelse. Teknisk Forskrift - Udkast. 4-2-2009.

Data fra eksempler benyttet med geostatistisk værktøj, jordforurening

Data fra forurennet industrigrund i Finland

Område afgrænsning		Målepunkt koordinater				Variable					
Xkoord	Ykoord	Xkoord	Ykoord	Zkoord	id	Pb	Var2	Var3	Var4	Var5	Var6
8960.00	5370.00	8965.32	5391.203	1	1	5.97					
8960.00	5420.00	8965.32	5391.203	1.75	2	2.00					
9020.00	5420.00	8965.32	5391.203	2.25	3	2.00					
9020.00	5370.00	8965.32	5391.203	2.75	4	2.00					
8960.00	5370.00	8974.95	5403.92	0.75	5	1275.00					
		8974.95	5403.92	1.5	6	682.00					
		8974.95	5403.92	2.15	7	6.80					
		8974.95	5403.92	2.75	8	4.87					
		8985.28	5417.182	0.5	9	845.00					
		8985.28	5417.182	1.5	10	1750.00					
		8985.28	5417.182	2.45	11	624.50					
		8981.72	5384.327	0.6	12	902.50					
		8981.72	5384.327	1.35	13	16.00					
		8981.72	5384.327	1.75	14	2.00					
		8981.72	5384.327	2.25	15	2.00					
		8992.35	5391.876	0.25	16	2775.00					
		8992.35	5391.876	0.9	17	2410.00					
		8992.35	5391.876	1.4	18	2505.00					
		8992.35	5391.876	1.65	19	#####					
		8992.35	5391.876	2.05	20	74.95					
		8992.35	5391.876	2.4	21	65.25					
		9000.73	5407.988	0.4	22	2075.00					
		9000.73	5407.988	0.95	23	146.00					
		9000.73	5407.988	1.4	24	2120.00					
		9000.73	5407.988	1.95	25	17.15					
		9000.73	5407.988	2.35	26	9.48					
		9001.6	5381.884	0.5	27	1755.00					
		9001.6	5381.884	1.25	28	3085.00					
		9001.6	5381.884	1.85	29	2625.00					
		9001.6	5381.884	2.45	30	21.75					
		9001.6	5381.884	2.85	31	9.58					
		9011.12	5390.952	0.6	32	2340.00					
		9011.12	5390.952	1.4	33	2005.00					
		9011.12	5390.952	1.7	34	935.50					
		9011.12	5390.952	1.95	35	28.70					
		9011.12	5390.952	2.3	36	28.55					
		9013.58	5407.261	0.55	37	3355.00					
		9013.58	5407.261	1.35	38	1790.00					
		9013.58	5407.261	1.75	39	16.45					
		9013.58	5407.261	2.05	40	10.96					
		9013.58	5407.261	2.25	41	12.00					

Data fra forurennet byggegrund på Sjælland

Område afgrænsning		Målepunkt koordinater				Variable					
Xkoordinat	Ykoordinat	Xkoordinat	Ykoordinat	Zkoordinat	Id	af kulbr	Var2	Var3	Var4	Var5	Var6
0.00	95.00	26.25	107.42	0.40	1	21.00					
10.00	80.00	26.25	107.42	1.00	2	0.00					
25.00	100.00	26.25	107.42	1.50	3	0.00					
70.00	30.00	36.79	119.11	0.55	4	0.00					
90.00	30.00	36.79	119.11	1.50	5	0.00					
105.00	70.00	48.01	101.85	0.30	6	6.10					
245.00	0.00	48.01	101.85	0.50	7	53.00					
260.00	50.00	48.01	101.85	0.75	8	85.00					
75.00	130.00	48.01	101.85	1.00	9	0.00					
20.00	130.00	48.01	101.85	1.45	10	0.00					
0.00	95.00	48.01	101.85	2.00	11	0.00					
		55.38	110.01	0.40	12	270.00					
		55.38	110.01	0.60	13	67.00					
		55.38	110.01	0.80	14	89.00					
		55.38	110.01	1.00	15	0.00					
		58.02	73.50	0.20	16	22.00					
		58.02	73.50	0.50	17	0.00					
		58.02	73.50	0.55	18	87.00					
		58.02	73.50	1.00	19	48.00					
		68.08	85.10	0.20	20	700.00					
		68.08	85.10	0.50	21	0.00					
		68.08	85.10	0.60	22	470.00					
		68.08	85.10	1.00	23	0.00					
		68.08	85.10	1.50	24	90.00					
		75.51	93.69	0.20	25	0.00					
		75.51	93.69	0.50	26	6.10					
		75.51	93.69	1.00	27	5.30					
		75.51	93.69	1.15	28	0.00					
		75.51	93.69	1.50	29	31.00					
		75.51	93.69	2.00	30	38.00					
		75.51	93.69	2.90	31	43.00					
		75.51	93.69	4.00	32	9.00					
		73.85	45.82	0.20	33	340.00					
		73.85	45.82	0.45	34	480.00					
		73.85	45.82	0.50	35	0.00					
		73.85	45.82	1.00	36	41.00					
		87.24	72.03	0.65	37	46.00					
		87.24	72.03	1.00	38	8.10					
		87.24	72.03	1.50	39	13.00					
		87.24	72.03	2.05	40	0.00					
		92.88	86.77	0.60	41	0.00					
		92.88	86.77	1.80	42	45.00					
		92.88	86.77	2.75	43	0.00					
		117.68	76.51	0.65	44	36.00					
		117.68	76.51	1.50	45	0.00					
		117.68	76.51	2.55	46	0.00					
		138.96	74.65	0.80	47	53.00					
		138.96	74.65	2.25	48	28.00					
		150.04	60.56	0.20	49	5.50					
		150.04	60.56	0.50	50	110.00					
		150.04	60.56	1.00	51	190.00					
		150.04	60.56	1.40	52	55.00					
		150.04	60.56	1.50	53	160.00					
		150.04	60.56	2.00	54	0.00					
		150.04	60.56	3.00	55	220.00					
		150.04	60.56	3.50	56	0.00					
		158.50	77.79	0.30	57	0.00					
		158.50	77.79	1.00	58	0.00					
		158.50	77.79	1.35	59	110.00					
		158.50	77.79	1.50	60	43.00					
		158.50	77.79	2.00	61	110.00					
		158.50	77.79	2.50	62	70.00					
		158.50	77.79	2.95	63	110.00					
		158.50	77.79	3.00	64	54.00					
		158.50	77.79	3.50	65	7.50					
		168.37	59.92	0.20	66	150.00					
		168.37	59.92	0.50	67	0.00					
		168.37	59.92	1.00	68	0.00					
		168.37	59.92	1.10	69	66.00					
		168.37	59.92	1.50	70	33.00					
		168.37	59.92	2.00	71	12.00					
		168.37	59.92	2.50	72	2.40					
		175.87	75.42	0.35	73	8.10					
		175.87	75.42	1.00	74	14.00					
		175.87	75.42	1.50	75	0.00					
		175.87	75.42	1.80	76	22.00					
		175.87	75.42	2.00	77	0.00					
		175.87	75.42	2.50	78	0.00					
		190.93	48.13	0.45	79	63.00					
		190.93	48.13	1.15	80	0.00					
		190.93	48.13	2.05	81	3.10					
		190.93	48.13	3.10	82	12.00					
		190.93	48.13	4.20	83	14.00					
		196.44	59.15	0.80	84	40.00					
		196.44	59.15	1.90	85	3.00					

Data fra skydebane på Sjælland

Område afgrænsning		Målepunkt koordinater				Variable					
Xkoordinat	Ykoordinat	Xkoordinat	Ykoordinat	Zkoordinat	id	Bly	Cadmium	Log (bly)	Var4	Var5	Var6
10.00	625	1197.00	256.00	1.00	1	3.00	0.05	0.48			
300.00	600	844.00	332.00	0.50	2	18.00	0.13	1.26			
600.00	350	844.00	332.00	1.00	3	9.30	0.15	0.97			
1100.00	250	964.00	563.00	1.00	4	6.40	0.18	0.81			
1100.00	10	1657.00	189.00	1.00	5	14.00	0.26	1.15			
1250.00	10	1182.00	365.00	0.15	6	90.00	0.27	1.95			
1250.00	150	1174.00	38.00	0.50	7	18.00	0.29	1.26			
1800.00	150	641.00	517.00	1.00	8	9.60	0.32	0.98			
2000.00	550	630.00	525.00	0.15	9	27.00	0.33	1.43			
1380.00	750	1201.00	454.00	0.15	10	34.00	0.33	1.53			
10.00	750	641.00	517.00	0.50	11	19.00	0.33	1.28			
10.00	625	82.00	643.00	0.15	12	27.00	0.34	1.43			
		1657.00	189.00	0.50	13	32.00	0.34	1.51			
		393.00	699.00	0.15	14	7.80	0.35	0.89			
		964.00	563.00	0.50	15	9.80	0.35	0.99			
		1197.00	256.00	0.50	16	15.00	0.35	1.18			
		848.00	437.00	0.15	17	30.00	0.36	1.48			
		344.00	573.00	0.15	18	35.00	0.37	1.54			
		861.00	498.00	0.15	19	25.00	0.37	1.40			
		1174.00	143.00	0.15	20	25.00	0.37	1.40			
		1401.00	315.00	0.15	21	74.00	0.37	1.87			
		344.00	653.00	0.50	22	22.00	0.37	1.34			
		1130.00	412.00	1.00	23	5.30	0.37	0.72			
		82.00	725.00	0.15	24	30.00	0.39	1.48			
		1071.00	389.00	0.15	25	24.00	0.39	1.38			
		1657.00	189.00	0.15	26	44.00	0.39	1.64			
		641.00	517.00	0.15	27	27.00	0.40	1.43			
		664.00	479.00	0.15	28	26.00	0.40	1.41			
		1033.00	294.00	0.15	29	33.00	0.40	1.52			
		1132.00	473.00	0.15	30	32.00	0.40	1.51			
		1174.00	38.00	0.15	31	23.00	0.41	1.36			
		1466.00	374.00	0.15	32	43.00	0.41	1.63			
		607.00	384.00	0.15	33	26.00	0.42	1.41			
		668.00	552.00	0.15	34	29.00	0.42	1.46			
		1096.00	279.00	0.15	35	39.00	0.42	1.59			
		1197.00	256.00	0.15	36	21.00	0.42	1.32			
		1567.00	206.00	0.15	37	40.00	0.42	1.60			
		666.00	351.00	0.50	38	23.00	0.42	1.36			
		1121.00	401.00	0.15	39	27.00	0.43	1.43			
		666.00	351.00	0.15	40	28.00	0.44	1.45			
		949.00	462.00	0.15	41	28.00	0.44	1.45			
		223.00	714.00	0.15	42	24.00	0.45	1.38			
		223.00	643.00	0.15	43	39.00	0.45	1.59			
		386.00	678.00	0.15	44	20.00	0.45	1.30			
		420.00	672.00	0.15	45	12.00	0.45	1.08			
		720.00	361.00	0.15	46	25.00	0.45	1.40			
		1130.00	412.00	0.15	47	35.00	0.45	1.54			
		1323.00	433.00	0.15	48	82.00	0.45	1.91			
		1386.00	380.00	0.15	49	57.00	0.45	1.76			
		1712.00	197.00	0.15	50	24.00	0.46	1.38			
		344.00	680.00	0.15	51	26.00	0.47	1.41			
		344.00	653.00	0.15	52	33.00	0.47	1.52			
		1174.00	80.00	0.15	53	26.00	0.47	1.41			
		666.00	351.00	1.00	54	13.00	0.47	1.11			
		918.00	315.00	0.15	55	29.00	0.48	1.46			
		1187.00	214.00	0.15	56	32.00	0.48	1.51			
		1399.00	458.00	0.15	57	46.00	0.49	1.66			
		861.00	588.00	0.15	58	21.00	0.50	1.32			
		1294.00	267.00	0.15	59	27.00	0.50	1.43			
		223.00	678.00	0.15	60	34.00	0.52	1.53			
		424.00	643.00	0.15	61	31.00	0.52	1.49			
		683.00	634.00	0.15	62	33.00	0.52	1.52			
		82.00	678.00	0.50	63	17.00	0.52	1.23			

		441.00	687.00	0.15	64	40.00	0.53	1.60			
		1292.00	344.00	0.15	65	35.00	0.54	1.54			
		1697.00	300.00	0.15	66	41.00	0.54	1.61			
		82.00	678.00	1.00	67	9.40	0.55	0.97			
		344.00	653.00	1.00	68	9.50	0.55	0.98			
		964.00	563.00	0.15	69	27.00	0.56	1.43			
		1399.00	458.00	0.50	70	16.00	0.57	1.20			
		1583.00	546.00	1.00	71	7.50	0.57	0.88			
		82.00	678.00	0.15	72	31.00	0.58	1.49			
		1145.00	515.00	0.15	73	25.00	0.58	1.40			
		420.00	714.00	0.15	74	28.00	0.60	1.45			
		1174.00	38.00	1.00	75	8.40	0.61	0.92			
		1499.00	483.00	0.15	76	67.00	0.63	1.83			
		1088.00	620.00	0.15	77	22.00	0.65	1.34			
		1941.00	500.00	0.15	78	14.00	0.65	1.15			
		1130.00	412.00	0.50	79	14.00	0.65	1.15			
		1854.00	470.00	1.00	80	4.60	0.65	0.66			
		819.00	722.00	0.15	81	14.00	0.66	1.15			
		1386.00	380.00	0.50	82	19.00	0.66	1.28			
		932.00	466.00	0.15	83	19.00	0.67	1.28			
		792.00	722.00	0.50	84	11.00	0.68	1.04			
		701.00	714.00	1.00	85	5.30	0.68	0.72			
		1399.00	458.00	1.00	86	4.60	0.68	0.66			
		1583.00	546.00	0.15	87	20.00	0.69	1.30			
		1088.00	620.00	1.00	88	6.60	0.69	0.82			
		983.00	668.00	0.15	89	26.00	0.73	1.41			
		907.00	697.00	0.15	90	22.00	0.74	1.34			
		1821.00	552.00	0.50	91	16.00	0.74	1.20			
		657.00	672.00	0.15	92	28.00	0.76	1.45			
		1180.00	691.00	0.15	93	26.00	0.76	1.41			
		1617.00	466.00	0.15	94	29.00	0.76	1.46			
		1854.00	470.00	0.50	95	4.70	0.76	0.67			
		1296.00	517.00	1.00	96	3.60	0.76	0.56			
		426.00	519.00	0.15	97	50.00	0.77	1.70			
		1107.00	701.00	0.15	98	22.00	0.77	1.34			
		1516.00	617.00	0.15	99	24.00	0.77	1.38			
		1575.00	380.00	0.15	100	35.00	0.77	1.54			
		1136.00	657.00	0.15	101	23.00	0.78	1.36			
		979.00	634.00	0.15	102	27.00	0.80	1.43			
		1296.00	517.00	0.15	103	19.00	0.81	1.28			
		1088.00	620.00	0.50	104	12.00	0.81	1.08			
		1898.00	531.00	0.15	105	9.90	0.84	1.00			
		701.00	714.00	0.15	106	23.00	0.86	1.36			
		1233.00	592.00	0.15	107	24.00	0.88	1.38			
		1835.00	508.00	0.15	108	4.80	0.90	0.68			
		1296.00	517.00	0.50	109	9.20	0.90	0.96			
		1363.00	653.00	0.15	110	24.00	0.91	1.38			
		701.00	714.00	0.50	111	13.00	0.91	1.11			
		1304.00	590.00	0.15	112	24.00	0.92	1.38			
		1382.00	676.00	0.15	113	20.00	0.92	1.30			
		1867.00	518.00	0.15	114	3.00	0.92	0.48			
		1903.00	575.00	0.15	115	4.90	0.93	0.69			
		1924.00	542.00	0.50	116	3.00	0.94	0.48			
		1397.00	653.00	0.15	117	22.00	0.96	1.34			
		1583.00	546.00	0.50	118	16.00	0.99	1.20			
		844.00	332.00	0.15	119	34.00	1.00	1.53			
		1821.00	552.00	0.15	120	16.00	1.00	1.20			
		1860.00	563.00	0.15	121	7.00	1.00	0.85			
		1907.00	484.00	0.15	122	13.00	1.00	1.11			
		1924.00	542.00	0.15	123	17.00	1.00	1.23			
		1854.00	470.00	0.15	124	18.00	1.10	1.26			
		1378.00	638.00	0.15	125	20.00	1.20	1.30			
		779.00	592.00	0.15	126	53.00	0.90	1.72			

Vejledning for 3D-GV

Manual for 3D-GV regneark til afgrænsning af forureningsudbredelser

Manual for 3D-GV regneark til afgrænsning af forureningsudbredelser

Agern Allé 5
2970 Hørsholm

Tlf: 4516 9200
Fax: 4516 9292
E-mail: dhi@dhi.dk
Web: www.dhi.dk

Marts 2009

Klient		Klientens repræsentant			
Miljøstyrelsen					
Projekt		Projekt nr.			
Manual for 3D-GV regneark til afgrænsning af forureningsudbredelser		52666 11700052			
Forfattere		Dato			
Jesper Overgaard Henrik Madsen		Marts 2009			
		Godkendt af			
	Teknisk Notat	JVO/HEM	CHG	CHG	240209
Revision	Beskrivelse	Udført	Kontrolleret	Godkendt	Dato
Nøgleord		Klassifikation			
Grundvand, 3D transportmodel, Monte Carlo simulering		<input type="checkbox"/> Åben <input type="checkbox"/> Intern <input checked="" type="checkbox"/> Tilhører klienten			
Distribution				Antal kopier	
Miljøstyrelsen DHI				Elektronisk fordeling	

Indhold

FORORD	119
1 INDLEDNING	121
2 INSTALLATIONSVEJLEDNING	123
3 INDLEDENDE OM PROGRAMMET	125
4 REGNEARKETS RATIONALE	127
5 TEORIEN BAG REGNEARKET	129
5.1 SIMULERING AF FORURENINGSUDBREDELSEN	129
5.2 USIKKERHEDSANALYSE	131
5.3 PLOT AF DATA	132
6 OPBYGNING AF REGNEARKET	133
6.1 FORSIDEN	133
6.2 AKVIFÆR OG KILDE	133
6.3 DISPERSION, TILBAGEHOLDELSE OG NEDBRYDNING	134
6.4 MÅLINGER	134
6.5 RESULTATER	134
6.6 RESULTATUDSKRIVNING OG -PLOT	135
7 EKSEMPLER PÅ ANVENDELSE AF PROGRAMMET	137
8 REFERENCER	139

Forord

Denne manual beskriver manual beskriver anvendelsen af et Excel regneark til beskrivelse af forureningsudbredelse og sandsynlighed for overskridelse af grænseværdi i grundvands ved forurenede grunde.

Anvendelsen af regnearket forudsætter at brugeren har fortaget installation som beskrevet i afsnittet installationsvejledning.

Regnearket og de bagvedliggende beregningsrutiner er udviklet til at kunne afvikles på en almindelig standard PC. For usikkerhedsberegninger hvor der er medtaget observationer, kan beregningstiden dog løbe op i timer.

Regnearket er udviklet i Excel 1997-2003 installeret på en Microsoft Windows XP platform med international decimal komma notation. Regnearket er efterfølgende afprøvet uden problemer i Excel 2007, på Microsoft Vista platform og med dansk decimal komma notation.

1 Indledning

Anvendelse af regnearket i undersøgelser af grundvand under forurenede grunde er beskrevet i rapporten "Metoder til estimering af undersøgelsesomfanget og til vurdering af usikkerheden af forureningsafgrænsningen" /1/, hvor regnearket kaldes **3D-værktøj**.

2 Installationsvejledning

Følgende filer hentes og kopieres samlet ind i en mappe, der for eksempel kaldes 3D-GV:

3D-GV.xls
3d-gvengine.exe
Apv2.dll
Libifcoremd.dll
Libmmd.dll
Mfc71.dll
DHI.ContourPlot.exe
DHI.Generic.dll
TeeChart.dll

Når regnearket skal benyttes, kopieres alle filer over i en ny mappe navngivet efter sagen, hvorfra regnearket køres. Det har derudover vist sig hensigtsmæssigt at oprette en ny undermappe med alle foldere, hver gang der gennemføres en kørsel med regnearket. Dette skyldes, at regnearkets datafiler overskrives efter hver kørsel, således at tidligere beregnede data tapes, hvis de ikke placeres i ny undermappe.

3 Indledende om programmet

Opsætning af en traditionel grid-baseret grundvandsmodel som MODFLOW eller MIKE SHE til brug i undersøgelse af grundvandsforurening under en forurennet grund vil i de fleste tilfælde kræve en betydelig indsats, både gennem opsætning og dataindsamling. For mindre forureninger vil en sådan indsats ikke stå mål med opgavens omfang. I mange tilfælde vil der derfor være behov for at kunne tage mere simple metoder i brug til at beskrive afgrænsning af en grundvandsforurening.

Formålet med det udviklede regneark er at skabe let adgang til anvendelsen af nogle relativt avancerede værktøjer til beregning af udbredelsen af en forureningsfane i tre dimensioner. Ved hjælp af det udviklede værktøj kan den beregnede forureningsudbredelse suppleres med en usikkerhedsberegning, der kan vise, med hvilken sandsynlighed fanen kan afgrænses, givet nogle brugerspecificerede usikkerheder på udvalgte parametre. Der er yderligere mulighed for at inddrage eventuelle observationer i usikkerhedsanalysen, således at de beregnede usikkerheder kommer til at afspejle den faktiske til rådighed værende viden.

Regnearket stilles til rådighed med et simpelt datasæt, der giver mulighed for en gennemskuelig afprøvning.

4 Regnearkets rationale

Formålet med udviklingen af programmet har været at skabe et værktøj, der med en relativt lille indsats, og på et begrænset datagrundlag kan beregne udbredelsen af en forureningsfane og den sikkerhed, hvormed fanen er afgrænset. Sådanne beregninger er ikke trivielle, og det er derfor forsøgt at lette adgangen til nogle relativt avancerede beregningsrutiner ved at pakke dem ind i en let tilgængelig Excel brugerflade.

Eksekveringen af programmet foregår i to trin. I første trin indtaster brugeren den nødvendige information til beregning af udbredelse af en forureningsfane i regnearket. Når brugeren har afsluttet opsætningen af modellen og vælger at starte beregningen på sidste side i regnearket, foretager Excel den nødvendige pre-processing af de indtastede informationer. De processerede data udskrives til én eller evt. to tekst filer, der placeres i samme mappe som regnearket. De to filer er input.txt og measurements.txt. Measurements.txt udskrives kun i de tilfælde, hvor brugeren har ønsket at inddrage observationer i usikkerhedsanalysen.

I andet trin indlæses de to filer af programmet DHI_Analgwst.exe. Dette program indeholder rutinerne til løsning af den tredimensionale stoftransportligning, samt rutinerne til bestemmelse af usikkerheder, og resultatudskrivning.

Som standard parameter værdier er så vidt muligt valgt værdier fra JAGG regnearket /2/.

Eksekveringen af DHI_Analgst.exe foregår automatisk, når brugeren har valgt at starte simuleringen fra Excel. Når DHI_Analgwst.exe eksekveres fremkommer en dialogbox, der viser status for simuleringen. De processerede data udskrives som én eller evt. to sæt af tekst filer. Det simple txt format kan benyttes i det medfølgende plot program eller andre plot programmet efter eget valg. Alle grafer gemmes fra plot programmet som standard som png filer, der uden videre kan indsættes direkte i rapporter og præsentationer.

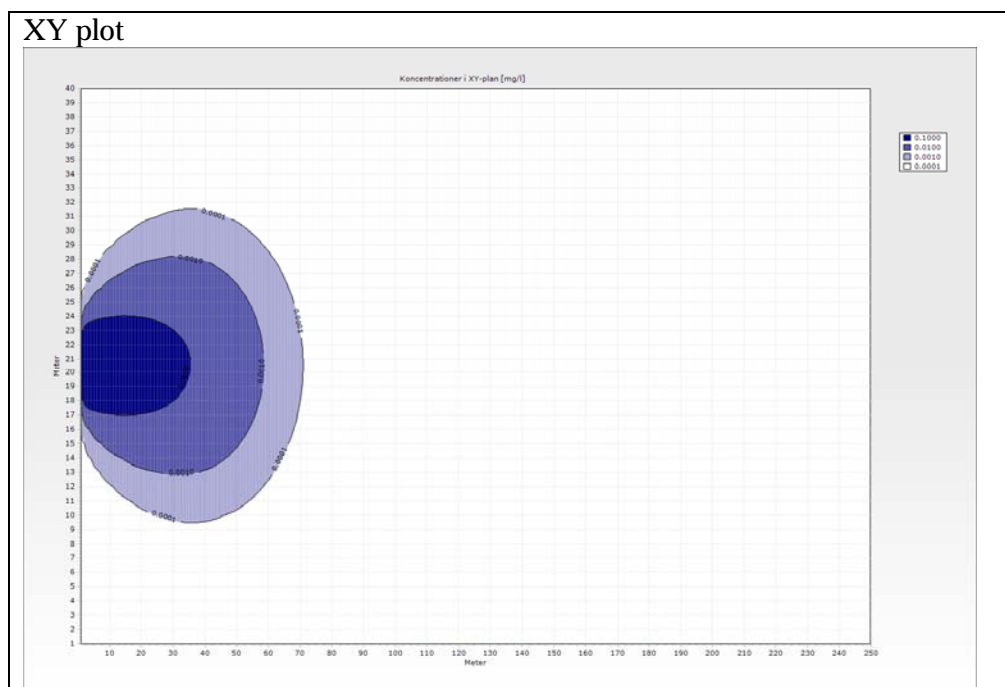
5 Teorien bag regnearket

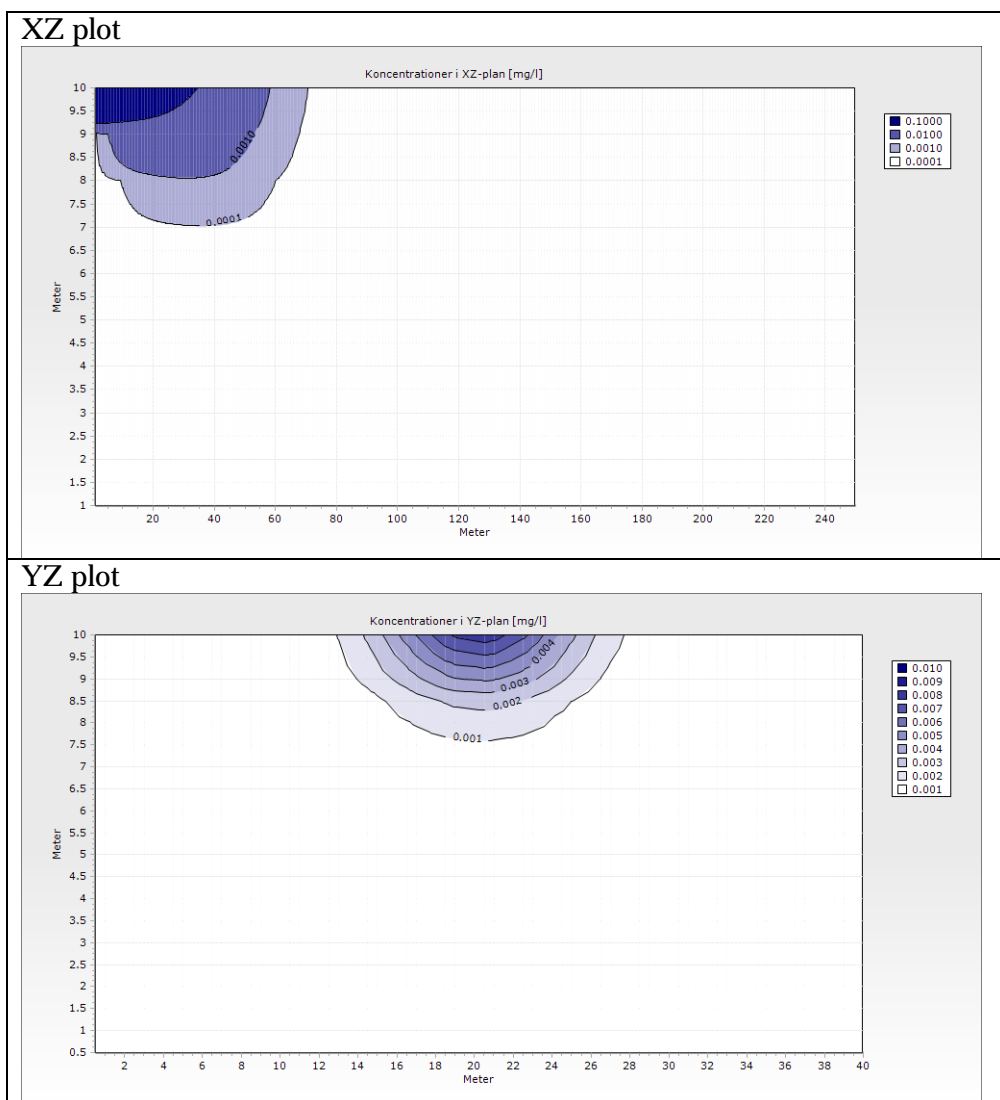
De anvendte beregningsmetoder er kort beskrevet nedenfor.

5.1 Simulering af forureningsudbredelsen

Beregningen af forureningsudbredelsen er baseret på en analytisk løsning af den tredimensionale stoftransportligning. De anvendte beregningsrutiner er udviklet af United States Geological Survey (USGS), og en detaljeret beskrivelse af løsningsmetoden findes i /3/. I dette afsnit gives en mere kvalitativ beskrivelse af de antagelser, der ligger til grund for udledningen af den anvendte løsning.

Den første antagelse knytter sig til grundvandsmagasinet geometri, som antages at være kasseformet, og afgrænset af impermeable flader i både højden og bredden. Længden kan være vilkårlig lang. Dette er illustreret i Figur 1 **Fejl! Henvissningskilde ikke fundet.**, hvor grundvandets strømningsretning er fra venstre imod højre, eksempel fra /1/.





Figur 1

Antagelser om magasinets geometri.

I realiteten vil de fleste forureningsfaser ikke være begrænset af impermeable flader, og i disse tilfælde defineres modelområdet blot tilstrækkeligt stort til, at forureningen ikke kommer i kontakt med randen. Af beregningstekniske årsager bør det dog altid tilstræbes, ikke at gøre modelområdet større end højest nødvendigt. Strømningen antages altid at foregå i x-aksens retning.

Den næste overordnede antagelse angår de hydrauliske egenskaber af magasinet. For at gøre en analytisk løsning mulig, er det nødvendigt at antage, at der hersker fuldstændig homogene forhold i magasinet. Hvis det vurderes, at geologisk heterogenitet har afgørende betydning for udbredelsen af en forureningsfase i et område, bør man overveje skifte den analytiske model ud med en grid-baseret grundvandsmodel. Dog vil jævnt fordelt inhomogenitet blive inddraget i form af beregning baseret på dispersivitet.

Endvidere antages det, at forureningskilden er kasseformet og placeret på endefluden af modelområdet, vinkelret på forureningsudbredelsen. Midtpunktet for kilden antages altid at ligge i midten af modelområdet, målt i y-aksens retning. På Figur 1 er forureningen placeret lige under grundvandsspejlet. Denne situation svarer til det tilfælde, hvor forureningen er dannet ved nedsivning af forurenende vand gennem den umættede zone. I sådanne tilfælde beregnes den resulterende koncentration almindeligvis ved kildenær opblanding i de øverste

0.25 meter af magasinet som beskrevet i /4/. I regnearket er der dog også mulighed for at benytte målinger fra prøvetagninger. Endelig er der også mulighed for at simulere forureningsudbredelsen fra en kilde nedgravet under grundvandsspejlet.

Endelig skal det bemærkes, at den benyttede analytiske løsning ikke giver mulighed for at indregne effekten af infiltration på den vertikale transport.

Den analytiske løsning, der er anvendt her, tillader første ordens nedbrydning og tilbageholdelse af stof. Tilbageholdelse simuleres gennem en nedsættelse af den effektive porevandshastighed svarende til den beregningsmetode, der er beskrevet i /4/.

5.2 Usikkerhedsanalyse

Til vurdering af usikkerheden på forureningsudbredelsen benyttes Monte Carlo simulering. Det er her muligt at tilknytte en usikkerhed på forskellige input parametre i form af enten en procentsats eller en faktor (afhængig af parametertypen) af de benyttede input værdier. Følgende parameterusikkerheder kan medtages:

- Kildestyrkekonzentration direkte eller, hvis koncentrationen beregnes fra jordkoncentrationer, bestemt ud fra usikkerhederne på forureningskoncentrationen i det infiltrerende vand, netto-nedbøren og de hydrauliske parametre
- Porevandshastighed beregnet på basis af usikkerhederne på den hydrauliske ledningsevne, den hydrauliske gradient, den effektive porøsitet og retardationsfaktoren (hvis tilbageholdelse medtages i beregningen)
- Dispersiviteter i x, y og z-retning
- Nedbrydningskonstant (hvis nedbrydning medtages i beregningen)
- Udbredelsesretning
- Tidspunkt for forureningens start

Det antages, at parametrene er normalfordelte indenfor de angivne usikkerhedsbånd. Usikkerheden på kildekonzentration, dispersionskoefficienter, nedbrydningskonstant og porevandshastighed antages log-normalfordelt, mens usikkerheden på udbredelsesretning og tid fra forureningens start antages normalfordelt. I programmet omsættes nedre og øvre grænse fra regneark/input fil til middelværdi og varians i normalfordeling ved at antage at 99 % af sandsynlighedsmassen er mellem nedre og øvre grænse.

I usikkerhedsanalysen genereres 100 statistisk repræsentative parametersæt indenfor de angivne usikkerhedsintervaller, og for hvert parametersæt foretages en simulering af forureningsudbredelsen. Usikkerheden på forureningsudbredelsen beregnes da som konfidensgrænser for en given koncentration. Dvs.: hvis der i et beregningspunkt er 90 af de 100 simuleringer, der giver en koncentration under den givne koncentration, udgør beregningspunktet et punkt på 90 % konfidensgrænsen. Generelt, indenfor en p % konfidensgrænse, er der p % sandsynlighed for at koncentrationen er under den givne koncentration.

Usikkerhedsanalysen muliggør desuden at inkludere koncentrationsmålinger til at give en forbedret beregning af koncentrationsudbredelsen og den tilhørende usikkerhed. Til dette benyttes en procedure kendt som GLUE (Generalised Likelihood Uncertainty Estimation).

Der genereres i dette tilfælde 1000 statistisk repræsentative parametersæt indenfor de angivne usikkerhedsintervaller, og for hvert parametersæt foretages en beregning af koncentrationen i målepunkterne. De 100 parametersæt med beregnede koncentrationer, der er nærmest de målte koncentrationer (målt som en middel kvadratafvigelsessum), benyttes til simulering af forureningsudbredelsen og beregning af konfidensgrænser.

5.3 Plot af data

Der er udvalgt et simpelt og åbent tilgængeligt software til brug i plot af datafiler: TeeChart.

6 Opbygning af regnearket

6.1 Forsiden

På det første ark i regnearket skal brugeren foretage et antal valg til fastlæggelse af modelleringsstrategien. Disse valg omhandler følgende punkter:

- **Kildeplacering.** For kildens placering eksisterer der to muligheder. Enten er kilden placeret over grundvandsspejlet, eller også er den nedgravet under grundvandsspejlet
- **Kildekoncentrationen.** Her skal det angives om koncentrationen er målt direkte ved prøvetagning i grundvandet, eller om styrken skal bestemmes udfra en antagelse om kildenær opblanding
- **Nedbrydning.** Regnearket giver mulighed for at inddrage 1. ordens nedbrydning under aerobe eller anaerobe forhold
- **Tilbageholdelse.** Her specificeres om tilbageholdelse ønskes inkluderet i modellen
- **Resultatudskrivning.** For hver modelkørsel er det muligt at udtage resultater i højst ét tværsnit i hver plan. Der udskrives dog altid resultater i x-y planen. Placeringen samt opløsningen af de enkelte planer skal der tages stilling til senere
- **Usikkerhedsanalyse.** Under dette punkt tages stilling til, om der ønskes foretaget en usikkerhedsanalyse, samt om observationer ønskes inddraget i analysen. Hvis usikkerhedsanalysen aktiveres, vil der udføres for hver af de parametre, der kan inddrages, fremkomme et ekstra felt, hvori usikkerheden skal angives. Afhængig af parametertypen angives usikkerheden som enten en procent, eller en faktor. Ønskes en parameter udeladt af usikkerhedsanalysen, angives usikkerheden i procenter og faktorer som hhv. 0 og 1

Overskriften øverst på siden viser hvilke dialoger, der skal udfyldes, inden simuleringen kan eksekveres. Den aktuelle side er markeret med fed skrift. Der fortsættes til næste side ved at trykke på knappen markeret med symbolet ">" i overskriftslinien. Det præcise indhold på de efterfølgende sider vil afhænge af de valg, der er foretaget på forsiden. Man kan til hver en tid gå tilbage til de foregående sider i regnearket ved at trykke på "<"

6.2 Akvifer og kilde

Det næste ark omhandler de hydrauliske egenskaber for grundvandsmagasinet, samt beregningen af kildekonzentrationen.

- **Akviferen.** For magasinet skal altid angives den effektive hydrauliske ledningsevne, hydraulisk gradient, samt den effektive porøsitet. Disse størrelser anvendes til at beregne porevandshastigheden. Knapperne i venstre side af regnearket giver mulighed for at fremkalde en tabel med forslag til parametre for forskellige jordtyper. Den beregnede porevandshastighed vises nederst under punktet "Afledte værdier"
- **Forureningskilden.** De parametre, der skal angives under dette punkt, afhænger af de valg, der er blevet truffet på forsiden. I alle tilfælde skal kildens geometri angives. Er

kilden placeret på overfladen skal bredden af kilden målt vinkelret på udbredelsesretningen altid angives. Hvis kildestyrken ønskes beregnet ved kildenær opblanding, skal kildens areal, samt nettonedbøren angives. Er kildekonzentrationen kendt fra prøvetagning, skal filterlængden angives. Filterlængden vil blive benyttet til at omregne den målte koncentration til en kildekonzentration ved at antage, at forureningen er begrænset til de øverste 0.25 meter. Er kilden beliggende under grundvandsspejlet skal dybden til midten af kilden angives sammen med bredde og højde. Modellen antager, at kilden er rektangulær. I alle tilfælde kan den afledte kildekonzentration findes under punktet "Afledte værdier". Knapperne i venstre side fremkalder tabeller med forslag til parameterværdier

- **Retningsusikkerhed.** Forureningen antages under almindelige simuleringer at forløbe parallelt med x-aksen, og dermed skal retningen ved almindelige simuleringer ikke angives af brugeren. Hvis usikkerhedsanalysen er aktiveret, er det imidlertid muligt at angive en usikkerhed på udbredelsesretningen under dette punkt.

6.3 Dispersion, tilbageholdelse og nedbrydning

På denne side skal alle parametre angående dispersion, tilbageholdelse og nedbrydning angives.

- **Dispersion.** Under dette punkt angives dispersiviteterne i hhv. x, y og z retningen
- **Første ordens nedbrydning.** Er første ordens nedbrydning valgt inkluderet i beregningen, angives her nedbrydningskonstanten. Knappen til venstre fremkalder en tabel med nedbrydningskonstanter. De viste konstanter afspejler, om nedbrydningen er angivet som anaerob eller aerob
- **Tilbageholdelse.** Her angives parametre relateret til tilbageholdelse. Den beregnede retardationsfaktor kan ses under "Afledte værdier" nederst på siden. Her vises også den resulterende porevandshastighed. Retardationsfaktoren beregnes i overensstemmelse med de retningslinier der er givet i /4/

6.4 Målinger

Denne side vises kun, hvis det er valgt at inkludere målinger i usikkerhedsanalysen. Øverst på siden angives antallet af målinger. I tabellen nedenfor angives koordinaterne for hver boring, målt relativt i forhold til origo for modelområdet. Yderligere skal filterlængden angives. Det antages, at toppen af filteret er beliggende i grundvandsspejlet. Herefter angives tidspunktet for målingen, regnet i forhold til den estimerede start af forureningen, og i sidste kolonne angives den målte koncentration.

6.5 Resultater

Den sidste side i regnearket omhandler afgrænsningen af modelområdet, samt resultatudskrivningen.

- **Områdefgrænsning.** Her angives dimensionerne af modelområdet i hhv. x, y og z retningen. Af hensyn til den analytiske løsning, skal disse angives således, at modelområdet indeholder hele forureningsfanen

- **Placering af resultattværsnit.** For hvert af de tværsnit, der ønskes udskrivning af resultater i, skal planens placering angives. Til venstre på siden findes et antal knapper markeret med et "C". Tryk på disse bevirker, at planerne placeres i centeret af kilden
- **Afstand mellem beregningspunkter.** Resultaterne af beregningen udskrives i et homogent net af punkter jævnt fordelt i hvert af de planer, der ønskes udskrevet resultater i. Afstanden mellem udskrivningspunkterne skal angives for hvert plan. Da den anvendte løsning er analytisk, vil nøjagtigheden af beregningen ikke afhænge af den valgte opløsning. Beregningstiden er proportional med antallet af beregningspunkter og specielt i forbindelse med usikkerhedsanalysen, kan en lille afstand mellem beregningspunkterne medføre store beregningstider. Under punktet "Afledte værdier" kan de totale antal beregningspunkter for hver plan ses
- **Tidspunkt.** Til sidst angives det tidspunkt, der ønskes udskrevet resultater for. Ønskes resultater udskrevet for flere tidspunkter, skal modellen køres flere gange
- **Konfidensgrænser.** Hvis usikkerhedsanalysen er aktiveret, skal her angives hvilken koncentration, der ønskes udskrevet konfidensgrænser for

Simuleringen startes ved at trykke "Start beregning" øverst til højre på siden.

6.6 resultatudskrivning og -plot

For hver simulering produceres en resultatfil indeholdende koncentrationerne for hvert af de planer der er valgt udskrivning i. Koncentrationerne er angivet i mg/l. De resultatfiler der indeholder de beregnede koncentrationer er navngivet hhv. cXY, cXZ og cYZ. Er usikkerhedsanalysen aktiveret udskrives yderligere tre filer indeholdende konfidenskurverne for det angivne koncentrationsniveau. Disse filer er navngivet confXY, confXZ og confYZ.

Endeligt findes de inkluderede målinger som en txt fil navngivet measurements. Resultaterne er udskrevet i et generelt format (.txt) indeholdende tre kolonner: x, y og resultatet af simuleringen. Dette format kan indlæses af de fleste plotte programmer (for eksempel Surfer). Alternativt kan man benytte det medfølgende plot program DHI Contour Plot.

DHI Contour Plot startes, og de ønskede txt filer indlæses, hvorefter plots tilpasses det ønskede under egenskaber, series. Observationer kan kun indlæses, når enten et koncentrationsplot eller et sandsynlighedsplot er indlæst. Plots kan gemmes som png filer under gem billede.

7 Eksempler på anvendelse af programmet

I /1/ er vist eksempler på anvendelse af 3D-værktøjet og plot programmet.

8 Referencer

1. Grøn, C., Overgaard, J., Madsen, H., Michael, L., Andersen, L., and Andersen, J. S. Metoder til estimering af undersøgelsesomfanget og til vurdering af usikkerheden af forureningsafgrænsningen. 2009.
2. Holm, J. and Kjærgaard, M. Manual for program til risikovurderinger - JAGG (Jord, Afdampning, Gas, Grundvand). Miljøprojekt no. 520. 2000. Miljøstyrelsen.
3. Wexler EJ: Analytical solutions for one-, two-, and three-dimensional solute transport in ground-water systems with uniform flow -- Supplemental Report: Source codes for computer programs and sample data sets. In U.S. Geological Survey Open-File Report 92-78. 1992.
4. Miljøstyrelsen. Oprydning på forurenede lokaliteter. Miljøstyrelsens Vejledninger nr. 6 og 7 1998.

Vejledning for MBGeoStat

Manual for MBGeoStat regneark til afgrænsning af forureningsudbredelser

Manual for MBGeoStat regneark til afgrænsning af forureningsudbredelser

Marts 2009

Klient		Klientens repræsentant			
Miljøstyrelsen		Ole Kiilerich			
Projekt		Projekt nr.			
Manual for MBGeoStat regneark til afgrænsning af forureningsudbredelser		52666 11700052			
Forfattere		Dato			
Jens Strodl Andersen JSA-EnviroStat		Marts 2009			
		Godkendt af			
	Teknisk Notat	JSA	CHG	CHG	240309
Revision	Beskrivelse	Udført	Kontrolleret	Godkendt	Dato
Nøgleord		Klassifikation			
Forurenet jord, geostatistik		<input type="checkbox"/> Åben <input type="checkbox"/> Intern <input checked="" type="checkbox"/> Tilhører klienten			
Distribution				Antal kopier	
Miljøstyrelsen DHI JSA-EnviroStat				Elektronisk fordeling	

Indhold

FORORD	147
1 INDLEDNING	149
2 INSTALLATIONSVEJLEDNING	151
3 INDLEDENDE OM PROGRAMMET	153
4 REGNEARKETS RATIONALE	155
5 TEORIEN BAG REGNEARKET	157
5.1 SPATIAL KORRELATION	157
5.2 ESTIMATION OG PRÆDIKTION	158
5.3 USIKKERHED PÅ ESTIMATION OG PRÆDIKTION	158
6 PROGRAMMETS OPBYGNING	159
6.1 FORSIDEN	159
6.2 DATA	160
6.3 DESIGN	161
6.4 ANALYSE	162
6.5 RESULTATER	164
6.6 DATAPLOT	165
6.7 VARIOGRAM	165
6.8 PRÆDIKTION	166
6.9 GRÆNSEVÆRDI	167
6.10 RESIDUALER	168
6.11 DYBDE	169
6.12 TITLER	170
6.13 HJÆLP (?)	170
7 EKSEMPEL PÅ ANVENDELSE AF PROGRAMMET	171
7.1 DATA OG AFGRÆNSNING AF OMRÅDET	171
7.2 DESKRIPTIV STATISTIK	172
7.3 ER DER SPATIAL KORRELATION, ET KIK PÅ VARIOGRAMMET	173
7.4 VURDERING AF KONCENTRATION I HELE OMRÅDET	175
7.4.1 Estimation af den spatiale korrelation	175
7.4.2 Vurdering af estimationen, residualer	176
7.4.3 Prædiktions af koncentrationen indenfor området	176
7.4.4 Usikkerhed på prædiktions af koncentrationen	177
7.4.5 Koncentrationen i forhold til en grænseværdi	179
7.4.6 Information fra nye målinger	180
8 REFERENCER	183

Forord

Denne manual beskriver anvendelsen af et Excel regneark til prædiktion af koncentrationsniveauet og usikkerheden på dette i forbindelse med vurdering af jordforurening. Prædiktionen er baseret på jordprøver, hvor koncentrationen er målt. Anvendelsen af applikationen forudsætter at brugeren har fortaget installation beskrevet i afsnittet installationsvejledning.

Regnearket og de bagvedliggende beregningsrutiner er udviklet til at kunne afvikles på en almindelig standard PC.

Regnearket er udviklet i Excel 1997-2003 installeret på en Microsoft Windows XP platform.

1 Indledning

I det følgende anvendes følgende terminologi.

Programmet betegnes applikationen. De enkelte ark/faner i applikationen betegnes med regneark/side.

I applikationen anvendes **estimation** om estimation af parametre i den spatiale model og **prædiktion** om beskrivelsen af forureningsudbredelsen baseret på de estimerede parametre.

Anvendelse af applikationen i undersøgelser af forurenede grunde er beskrevet i rapporten "Metoder til estimering af undersøgelsesomfanget og til vurdering af usikkerheden af forureningsafgrænsningen" /1/, hvor applikationen kaldes **det geostatistiske værktøj**.

2 Installationsvejledning

- 1) Inden Excel applikationen startes skal sikkerhedsniveauet i Excel sættes til middel, så man kan vælge at køre makroer. Hvis tidligere versioner af RExcel er installeret skal disse afinstalles først.
- 2) Kør programmet RAndFriendsSetup2092V3.0-17-2.exe. Anvend default indstillinger gennem hele installationen. Nu er statistik programmet R installeret samt evnen til at kommunikere mellem R og Excel.
- 3) Opret en mappe med navnet "basisfunktioner", hvor R er installeret : ("C:\Program Files\R\R-2.9.12\") og unzip filerne i "Basis.zip" til mappen "C:\Program Files\R\R-2.9.2\basisfunktioner".
- 4) Kopier Excel-applikationen "MBGeoStat.xls" hen hvor du ønsker at gemme det. Start herefter Excel-applikationen. Første gang applikationen anvendes hentes nogle statistik-pakker til R. Her skal aktivt vælges land, vælg Danmark.
- 5) " MBGeoStat.xls" kan frit omdøbes til noget andet og gemmes hvor som helst på computeren.
- 6) Når applikationen skal benyttes, oprettes en mappe til formålet, MBGeoStat kopieres ind i denne mappe, og data kan indlægges, filen gemmes osv. Som med andre Excel filer. På denne måde har man altid en intakt fil med applikationen i den oprindelige mappe.

3 Indledende om Programmet

Formålet med udviklingen af programmet har været at skabe et værktøj, der baseret på målinger kan prædiktere koncentrationen af en forurening indenfor et afgrænset område. Yderligere har formålet været at kvantificere usikkerheden på denne prædiktion og dermed sætte brugeren i stand til at vurdere sandsynligheder for overskridelse af eventuelle grænseværdier. Disse beregninger er pakket ind i en let tilgængelig Excel brugerflade.

Regnearket stilles til rådighed med et simpelt datasæt, der giver mulighed for en gennemskuelig afprøvning. I denne manual er anvendelsen tillige illustreret med et datasæt fra en skydebane på Sjælland, som er omfattende og konsistent og dermed velegnet til demonstration af værktøjets brug.

4 Regnearkets rationale

Eksekveringen af programmet foregår trinvis. Først indlæses de nødvendige data (område afgrænsning samt forureningsmålingerne med deres tilhørende koordinater). Dernæst analyseres data trinvis. Den trinvis analyse er valgt for at øge refleksionen over de fremkomne resultater.

Alle grafer er lavet som Windows metafiles og kan derfor umiddelbart anvendes i rapporter og præsentationer. Alle titler i plots kan ændres.

5 Teorien bag regnearket

De anvendte beregningsmetoder er kort beskrevet nedenfor.

5.1 Spatial korrelation

Den geografiske variation/korrelationsstruktur i data kan beskrives på forskellig vis.

Variogrammer er hyppigt anvendt til at kvantificere den geografiske afhængighed. Der knytter sig normalt 3 parametre til et variogram. De beskriver egenskaber ved variogrammet og betegnes **nugget**, **sill** og **range** [2-4].

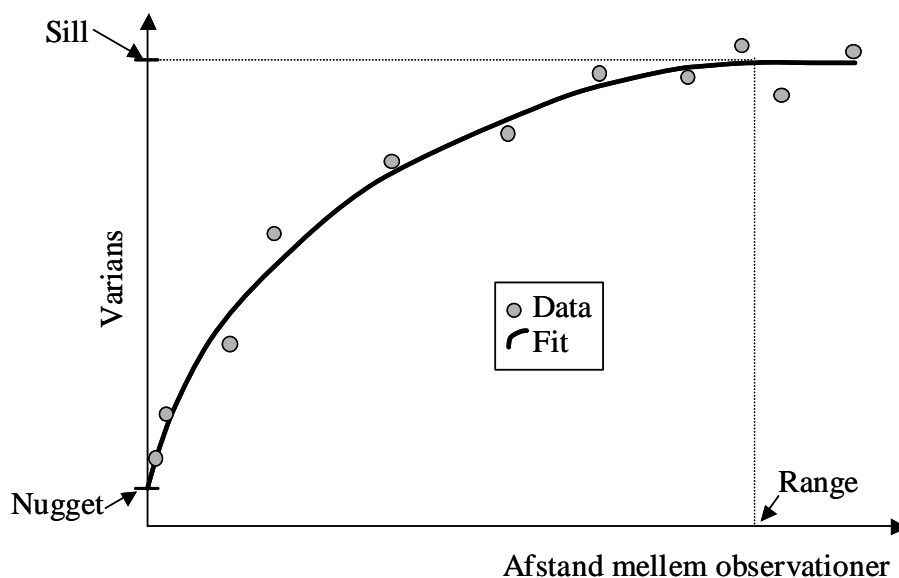
Nugget er en sum af flere komponenter (der med en vel planlagt forsøgsplan kan adskilles). Nugget består af måleusikkerheden samt variationen mellem to prøver taget meget tæt på hinanden.

Sill er den maksimale variation, det vil sige den variation, der i data stammer fra målepunkter med så stor indbyrdes afstand, at de er uafhængige. For et datasæt uden geografisk korrelation er **Sill** blot variansen af data. **Partial Sill** er betegnelse for **Sill-Nugget**, altså den del af variationen, der ikke er tilfældig.

Range betegner den afstand, hvor målingerne ikke længere er korrelerede, dvs. uafhængige.

Variogrammet beregnes ved at inddele afstanden mellem observationerne i en række intervaller. Dernæst beregnes variansen mellem alle observationer i det pågældende interval. Disse varianser plottes derefter mod afstanden mellem observationer som skitseret i

Figur 1. **Nugget**, **Sill** og **Range** er ligeledes skitseret.



Figur 1
Variogram med parametre.

Det er nærliggende at tilpasse (fite) en kurve til punkterne i variogrammet. Der eksisterer adskillige variogram modeller, hvor de oftest anvendte er en gaussisk, eksponentiel eller sfærisk funktion /2;3;5;6/. Her skal det påpeges, at den tilpassede kurve og dermed estimationen af **nugget**, **sill** og **range** vil være afhængig af valget af antal intervaller, idet antallet af samt hvilke punkter, der ender i de forskellige intervaller, er afhængigt af hvilke intervaller, der vælges. Den tilpassede kurve udgør nu det bedste bud på variations afhængighed af afstanden mellem observationer. Stejlheden af variogrammet beskriver, hvor hurtigt variansen/korrelationen ændrer sig.

Variogrammet bør estimeres i forskellige retninger, hvor udelukkende målepunkter i en vis retning kommer i betragtning eks. (0°, 45°, 90°, 135°). Endvidere kan området inddeles i delområder, og variogrammet kan estimeres indenfor hvert delområde. Inddeles området i en række delområder, bliver det naturligvis på bekostning af antallet af observationer i området.

5.2 Estimation og prædiktio

I dette afsnit præsenteres hvordan niveauet af ét enkelt stof inden for et geografisk område estimeres {Diggle, 2006 11419 /id;Diggle, 2000 11418 /id;Ribeiro, 1999 11423 /id}. Modellen er specificeret ved $Y(x) = \mu(x) + S(x) + \varepsilon$, hvor x er den geografiske position, Y er koncentrationen, $\mu(x) = \beta$, hvor β er middelværdifunktion. $S(x)$ er en stationær gaussisk process med varians σ^2 (partial sill = sill - nugget) og en korrelationsfunktion parametriseret ved ϕ (range parameter). Yderligere parametre i korrelationsfunktionen er i enkelte tilfælde en ekstra smoothness parameter κ (kappa) og en eventuel retningsafhængighed. ε er fejleddet (eller residualer) med variansparameter τ^2 (nugget varians). Endvidere er det muligt at benytte Box-Cox transformation af Y , dvs. $Y(x)$ erstattes med $g(Y(x))$, hvor $g(Y(x)) = (Y^\lambda(x) - 1) / \lambda$, det bemærkes at $\lambda=0$ svarer til \log_e og $\lambda=1$ svarer til ingen transformation. Ved metoden optimeres likelihood funktionen, og parametrene estimeres derved simultant og er derved uafhængig af subjektive valg af eks transformation af Y eller valg af afstande til variogrammet. Da nugget, sill og range er parametre i den optimerede likelihood funktion, er det muligt at få information/inferens om estimatorne og dermed at vurdere usikkerheden på dem.

5.3 Usikkerhed på estimation og prædiktio

En central parameter i forbindelse med vurderingen af usikkerheder er **nugget**. Den indeholder variation fra følgende kilder:

- 1) Variation inhomogeniteten af prøver udtaget samme sted på samme tidspunkt. Definitionen af samme sted er lidt vanskelig og skal her stå åben. For jord kan man forestille sig to prøver udtaget lige ved siden af hinanden.
- 2) Reproducerbarheden, herunder repeterbarheden, der dækker mange variationskilder, homogenisering af prøven, ekstraktion, opbevaring, laboratorium effekter (dag til dag-, apparat-, laborant-effekt etc.).
- 3) Den spatiale variationen mellem punkter med en indbyrdes afstand mindre end de mindste afstande i designet.

6 Programmets Opbygning


På alle sider (undtagen forsiden) findes øverst en blå bjælke med grå knapper, der angiver navnene på de forskellige sider i applikationen. Den aktiverede side har en rød stiplede linje under sig. Man kan gennem hele analyseforløbet frit skifte mellem de forskellige sider. Bjælken er skitseret nedenstående

Forside	Data	Design	Analyse	Resultater	Data plot	Variogram	Prædiktion	Grænseværdi	Residualer	Dybde	Titler	?
---------	------	--------	---------	------------	-----------	-----------	------------	-------------	------------	-------	--------	---

I det følgende vil de enkelte sider blive beskrevet i den rækkefølge, de forekommer i den blå menu bjælke set ovenfor. Efterfølgende vil det naturlige analyseforløb blive demonstreret. De enkelte knapper i applikationen aktiveres ved ét klik med venstre museknap.

6.1 Forsiden

Forsiden aktiveres, når regnearket åbnes, den byder velkommen og anviser tre mulige



Dette regneark er udarbejdet for miljøstyrelsen af DHI-Vand & Miljø og JSA-EnviroStat i forbindelse med projektet "Metoder til estimering af undersøgelsesomfanget og vurdering af forureningsafgrænsningen. De udarbejdede rapporter kan findes på Miljøstyrelsens hjemmeside www.mst.dk.

Formålet med regnearket er at beregne usikkerheder i forbindelse med vurdering af forureningsudbredelse i jord.

Programmeringen i nærværende applikation er foretaget med stor omhu, der tages på trods af dette intet ansvar for eventuelle utilsigtede anvendelser eller fejl. Ved fejl rettes henvendelse til Miljøstyrelsen.

God fornøjelse

Indsæt data Analyse Vejledning

udgangspunkter for anvendelse af regnearket:

- **Indsæt data.** På denne side indtastes eller kopieres data, der skal analyseres. Denne indgang vælges, hvis brugeren ønsker at indsætte nye data og foretage beregninger baseret på disse.
- **Analyse.** Denne side er den centrale i applikationen. Herfra udføres beregninger og plot af resultater. Er data allerede indtastet kan der startes her.
- **Vejledning.** Åbner denne manual.

6.2 Data

På denne side findes alle data for et undersøgelsesområde, lokalisering af borerne samt måleresultaterne sammen. Nedenstående er et screendump fra siden, og de enkelte dele er beskrevet efterfølgende.

Område afgrænsning		Målepunkt koordinater				Variable					
Xkoordinat	Ykoordinat	Xkoordinat	Ykoordinat	Zkoordinat	id	pb	Cd	dybde	Var4	Var5	Var6
10,00	625,00	1197,00	256,00	1,00	1	3,00	0,05	1,00			
300,00	600,00	844,00	332,00	0,50	2	18,00	0,13	0,50			
600,00	350,00	844,00	332,00	1,00	3	9,30	0,15	1,00			
1100,00	250,00	964,00	563,00	1,00	4	6,40	0,18	1,00			
1100,00	10,00	1657,00	189,00	1,00	5	14,00	0,26	1,00			
1250,00	10,00	1182,00	365,00	0,15	6	90,00	0,27	0,15			
1250,00	150,00	1174,00	38,00	0,50	7	18,00	0,29	0,50			
1800,00	150,00	641,00	517,00	1,00	8	9,60	0,32	1,00			
2000,00	550,00	630,00	525,00	0,15	9	27,00	0,33	0,15			
1380,00	750,00	1201,00	454,00	0,15	10	34,00	0,33	0,15			
10,00	750,00	641,00	517,00	0,50	11	19,00	0,33	0,50			
10,00	625,00	82,00	643,00	0,15	12	27,00	0,34	0,15			
		1657,00	189,00	0,50	13	32,00	0,34	0,50			
		393,00	699,00	0,15	14	7,80	0,35	0,15			
		964,00	563,00	0,50	15	9,80	0,35	0,50			
		1197,00	256,00	0,50	16	15,00	0,35	0,50			
		848,00	437,00	0,15	17	30,00	0,36	0,15			
		344,00	573,00	0,15	18	35,00	0,37	0,15			
		861,00	498,00	0,15	19	25,00	0,37	0,15			
		1174,00	143,00	0,15	20	25,00	0,37	0,15			
		1401,00	315,00	0,15	21	74,00	0,37	0,15			
		344,00	653,00	0,50	22	22,00	0,37	0,50			
		1130,00	412,00	1,00	23	5,30	0,37	1,00			
		82,00	725,00	0,15	24	30,00	0,39	0,15			
		1071,00	389,00	0,15	25	24,00	0,39	0,15			
		1657,00	189,00	0,15	26	44,00	0,39	0,15			
		641,00	517,00	0,15	27	27,00	0,40	0,15			
		664,00	479,00	0,15	28	26,00	0,40	0,15			
		1033,00	294,00	0,15	29	33,00	0,40	0,15			
		1132,00	473,00	0,15	30	32,00	0,40	0,15			
		1174,00	38,00	0,15	31	23,00	0,41	0,15			
		1466,00	374,00	0,15	32	43,00	0,41	0,15			
		607,00	384,00	0,15	33	26,00	0,42	0,15			
		668,00	552,00	0,15	34	29,00	0,42	0,15			

Vælg afhængig variable ("Y")

pb

Cd

dybde

Var4

Var5

Var6

Vælg evt. forklarende variable ("X")

pb

Cd

dybde

Var4

Var5

Var6

Opdater data med "X"

Vælg dybde interval("Z")

Alle målinger medtages

Min Max

0,1 0,3

Dybdeplot nr: 1

Værdi af forklarende variable til prædiktation

<input type="checkbox"/> pb	
<input type="checkbox"/> Cd	
<input type="checkbox"/> dybde	0,15
<input type="checkbox"/> Var4	
<input type="checkbox"/> Var5	
<input type="checkbox"/> Var6	

Vælg netstørrelse (grid) nxn til prædiktationen

n= 50

Data består af tre dele

- **Område afgrænsning.** (X,Y)-koordinater for området indsættes, afgrænser arealet. Punkterne danner et polygon. Første og sidste punkt skal være ens. Forureningen bliver prædikeret indenfor dette område
- **Målepunkt koordinater.** (X,Y,Z)-koordinater for målepunkterne indsættes. Z er prøvetagningsdybde
- **Variable.** Forureningsmålinger for de målte stoffer, der er plads til 6 forureningskomponenter

I højre side skal der foretages en række valg:

- Den afhængige variabel skal vælges, det vil sige den forurening, der ønskes beskrevet. Der kan kun markeres ét felt
- Eventuelle forklarende variable markeres. Disse medtages lineært i estimationen. Det er ikke muligt at specificere ikke-lineære sammenhænge

- Der vælges, hvilke dybder der skal medtages. Analyseres flere dybder, kan disse med fordel gives fortløbende numre i feltet "Dybdeplot nr". Derved opnås et overblik på "Dybder"-siden, hvor de enkelte prædiktioner af koncentrationsniveauet vises
- Er det valgt at medtage forklarende variable, skal der specificeres, hvilken værdi den forklarende variabel skal have i prædiktionen af forureningen
- Endeligt skal gridstørrelsen for prædiktionen vælges. Griddet dækker det valgte område og udspændes af henholdsvis min og max af X,Y koordinaterne for områdeafgrænsningen

Det bemærkes at ændres kolonnenavne på variablene, kopieres disse navne automatisk til check-boksene i højre side. Det er **ikke** meningen, at man skal taste nye navne ind i checkboksene.

Der bør **ikke** skrives i de røde kolonner. Den røde kolonne mellem målepunkt koordinater og variable indikerer antallet af datapunkter.

6.3 Design

På denne side kan man udforske betydningen af nye målepunkter. Denne side benyttes i reglen først, når hele analysen er tilendebragt i første omgang. Det er muligt at indtaste nye målepunkter manuelt, eller applikationen kan generere den automatisk. Et screen dump af siden er vist nedenstående. "Målepunkt koordinater" og "Variable" er opbygget som på "Data" siden, og kolonne navne er ligeledes kopieret herfra og skal derfor **ikke** indtastes.

Forside	Data	Design	Analyse	Resultater	Data plot	Variogram	Prædiktion	Grænseværdi	Residualer	Dybde	Titler	?	
<p>Tilføj de nye manuelt indtastede værdier (X,Y,Z, Variable) til datasættet</p> <hr/> <p>Simuler koncentrationen i XYZ baseret på den prædikterede forureningsflade og usikkerheden på denne</p> <hr/> <p>Usikkerhedsreduktion Faktor: 1</p> <hr/> <p>Vis ændringer i prædiktionen af forureningsfladen, samt ændringer i usikkerhed på prædiktionen</p>			Målepunkt koordinater				Variable						<p>Generer XYZ og vis positionerne</p> <p>X - variabel Min Max 800 1100</p> <p>Y - variabel Min Max 290 600</p> <p>Antal punkter X Y 20 20</p> <p><input type="checkbox"/> Grid <input checked="" type="checkbox"/> Random</p> <p>Zkoordinat: 0,15</p>
			Xkoord	Ykoord	Zkoord	id	ph	Cd	dybde	Var4	Var5	Var6	
			807,00	434,00	0,15	1	29,67	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
			972,00	377,00	0,15	2	32,28	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
			871,00	459,00	0,15	3	14,86	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
			857,00	552,00	0,15	4	32,81	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
			989,00	503,00	0,15	5	23,93	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
			1018,00	474,00	0,15	6	15,96	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
			946,00	567,00	0,15	7	33,09	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
			890,00	310,00	0,15	8	19,50	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
			1029,00	576,00	0,15	9	35,01	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
			834,00	556,00	0,15	10	22,34	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
			816,00	412,00	0,15	11	16,20	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
			826,00	577,00	0,15	12	20,72	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
			962,00	548,00	0,15	13	32,36	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
			1060,00	491,00	0,15	14	45,12	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
			908,00	319,00	0,15	15	10,91	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
			999,00	332,00	0,15	16	23,16	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
			1085,00	401,00	0,15	17	37,44	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
			956,00	298,00	0,15	18	18,81	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	
913,00	403,00	0,15	19	37,08	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00				
1045,00	469,00	0,15	20	40,28	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00				

Der er to mulige fremgangsmåder til **generering af X,Y,Z-koordinater**

- 1) Manuel indtastning.
 - 2) Automatisk generering af nye datapunkter. Disse beskrives i det følgende.
- ad 1) X,Y,Z-koordinaterne indtastes manuelt i de gule felter

ad 2) X,Y,Z-koordinaterne kan generes automatisk ved i højre side at klikke på "Generer XYZ...". Derved genereres punkter ud fra de indtastede værdier i felterne i højre side for X, Y og Z

Der er ligeledes to mulige fremgangsmåder til **generering af værdier for variablene**:

- 1) Manuel indtastning
- 2) Automatisk generering.

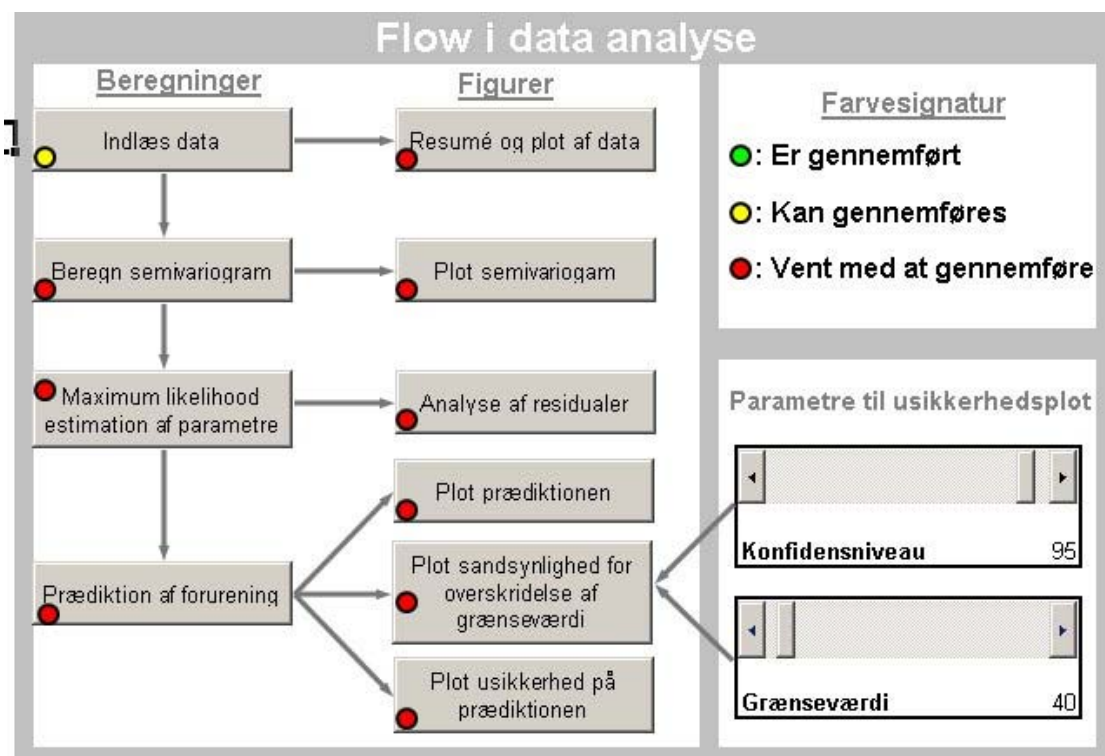
ad 1) Variableværdierne indtastes manuelt. Herefter klikkes på "Tilføj de manuelt indtastede værdier...", hvorved disse data føjes til det originale datasæt fra "Data"-siden.

ad 2) Variableværdierne kan generes automatisk ved i højre side at klikke på "Simuler koncentrationen...", Derved genereres koncentrationer/værdier af den forklarende variabel ud fra den allerede prædikterede flade og dennes usikkerhed. Det er muligt at reducere variationen med en faktor indtastet i usikkerhedsreduktionsfaktor feltet.

Efterfølgende klikkes på "Vis ændringer i prædiktionen..." og en ny prædiktion foretages med de nye data. Herved genereres et nyt sæt grafer.

6.4 Analyse

Det er fra denne side data analyseres. Den blå bjælke er udeladt fra nedenstående screendump. De grønne, gule og røde cirkler markerer, om det er muligt at benytte knapperne.



Efter at data er indtastet eller kopieret ind på "Data"-siden, analyseres data ved at klikke på:

- **Indlæs data.** Data indlæses i statistikprogrammet.
- **Resume og plot af data.** Giver et grafisk overblik over data på siden "Data plot" og ét numerisk resume af data på siden "Resultater". NB! Fokus skiftes til siden "Data plot". Data inspiceres. For at komme fra "Data plot" til "Resultater" siden skal klikkes på "Resultater" i den blå bjælke. Data inspiceres og der reflekteres.

For at komme tilbage til "Analyse" siden skal klikkes på "Analyse" i den blå bjælke.

- **Beregn semivariogram.** Variogrammet beregnes ved at inddele afstanden mellem observationerne i 50 intervaller. Dernæst beregnes variansen mellem alle observationer i det pågældende interval. Disse varianser plottes derefter mod afstanden mellem observationer. Der fittes derefter én sfærisk variogramfunktion til de empiriske variogramdata. Parameter estimaterne kan ses på siden "Resultater"
- **Plot semivariogram.** Giver et plot af de beregnede værdier samt den fittede variogramfunktion. Her ses visuelt, om der er spatial korrelation. NB! Fokus skiftes til siden "Variogram". Plottet inspiceres, og der reflekteres.
- **Maximum likelihood estimation af parametre.** Her foregår estimationen af parametrene i den spatiale model. Der estimeres forskellige modeller NB! Fokus skiftes til siden "Resultater", hvor de estimerede parametre kan ses. Nu er den spatiale sammenhæng estimeret, nu skal resultaterne blot visualiseres og valideres!
- **Analyse af residualer.** En forudsætning for at kunne stole på den beregnede usikkerheden på den prædikterede forureningsflade er, at residualerne fra modelfittet er normal fordelte, er ukorrelerede og identisk fordelte. Dette er adresseret i forskellige residualplots. Disse genereres ved at klikke på "Analyse af residualer". Fokus skifter så til siden "Residualer", som vurderes. Nu er forudsætningerne for at anvende den spatiale sammenhæng undersøgt, og er resultaterne tilfredsstillende, kan forureningen prædikteres ved at klikke på:
- **Prædiktion af forurening.** Her prædikteres koncentrationen i hele området (dvs. i det valgte grid) baseret på de målte koncentrationer og den estimerede spatiale model. Prædiktioner udenfor området slettes. Prædiktionen kan visualiseres ved at klikke på:
- **Plot prædiktionen.** Dette resulterer i et niveaukort og fokus skifter til "Prædiktion"-siden. Kortet sammenlignes med de deskriptive data.
- **Plot sandsynlighed i de områder hvor koncentrationen ikke med 95 % sikkerhed overskrider grænseværdien.** Dette plot kræver to input fra brugeren, konfidensgraden/sandsynligheden, samt grænseværdien. Der plottes koncentrationen i de områder, hvor koncentrationen ikke med 95% sikkerhed kan siges at være mindre end grænseværdien. Det er de områder hvor det ikke er muligt med den angivne konfidensgrad at sige, at grænseværdien er større en den prædikterede koncentration med tilhørende usikkerhed. Er grænseværdien større end den øvre grænse i konfidensintervallet plottes ingenting (hvidt). Fokus skiftes til "Grænseværdi" siden.
- **Plot usikkerheden på prædiktionen.** Dette plotter standard error på den prædikterede flade. Yderligere plottes den relative standard error. Fokus flyttes til "prædiktion" siden.

6.5 Resultater

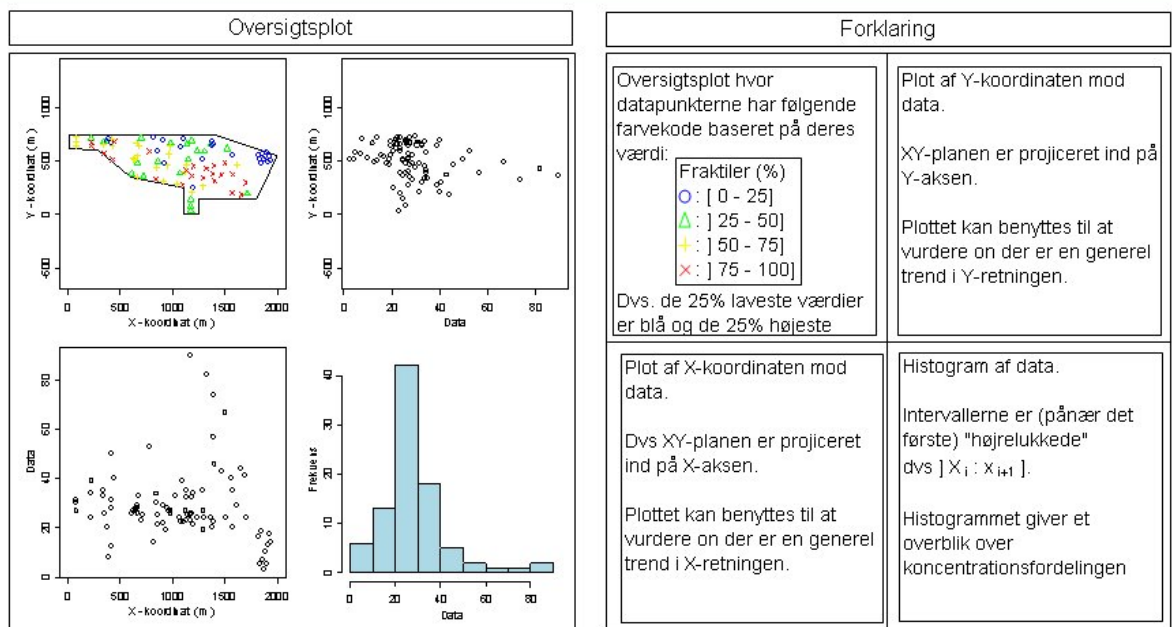
På denne side er de numeriske resultater angivet

Forside		Data	Design	Analyse	Resultater	Data plot	Variogram	Prædiktion	Grænseværdi	Residualer	Dybde	Titler				
Deskriptiv om data			Fitted variogram:			Maximum likelihood Estimation,										
Minimum	3.000	Nugget			67.487	Originale data										
5%	4.725	Sill			185.370	Informationskriterier										
10%	6.800	Phi (Range)			364.039	Akaike (AIC)							1000.75			
25%	14.000								Bayesian (BIC)					1014.93		
50%	23.500								Spatiale parametre							
75%	29.750								Nugget							2.947
90%	39.500								Partial Sill							1.000
95%	49.000								Range							536.884
Maximum	90.000								Retning							0.000
Mean	24.049								Retningsfaktor							1.000
Varians	225.615								Transformation af koncentrationen							
Std. Afv.	15.020								Box-Cox (lambda)							0.367
CV	0.625								Niveau, trend og forklarende variable							
Afstande (x,y) (m)			X - koordinat			Niveau							5.600			
Minimum	0.00	Minimum			82	X-koordinat										
5%	115.41	Maksimum			1941	Y-koordinat										
10%	196.01	Minimum			10038	Z - koordinat										
25%	333.77	Maksimum			10725	Minimum							0.15			
50%	556.39	Maksimum			1	Maksimum										
75%	869.21															
90%	1192.19															
95%	1388.09															
Maximum	1872.57															

- Angiver summary statistics for den afhængige variabel.
- Angiver summary statistics for X,Y,Z-koordinaterne, samt for afstandene mellem observationerne.
- Angiver parametre for den fittede variogram funktion. Nugget, Sill og Range.
- Angiver parametrene i maksimum likelihood estimationen. AIC og BIC er informations kriterier, dvs. værdier der beskriver den fittede model. Disse er mest medtaget for brugere med statistisk interesse. De estimerede afstandsrelaterede mål for den spatiale korrelation Nugget, Partial Sill og Range er vist. Hvis variationens afhængighed af afstanden er retningsorienteret vil dette være angivet i de to parametre Retning og Retningsfaktor, der så vil angive vinklen og størrelsesordenen. Den estimerede Lambda i Box-Cox transformationen er angivet, og gennemsnits niveauet på den transformerede skala er angivet. Er der estimeret en trend i én retning, er den vist ved X,Y koordinaterne.

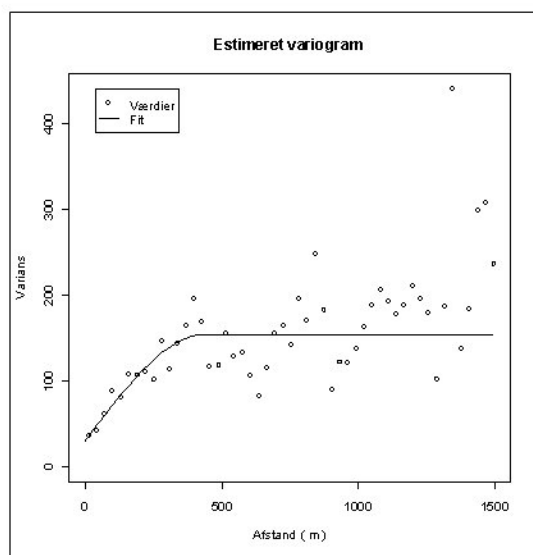
6.6 Dataplot

Denne side fremkommer efter at have klikket på "Resume og plot af data"-knappen på analysesiden. Siden viser et oversigtsplot, der indikerer om der er spatial variation. I øverste venstre hjørne er X,Y-kordinaterne for observationerne plottet, punkterne har forskellige farvekode og forskelligt symbol afhængig af værdien for den valgte forureningskomponent. Spatial korrelation antydes, hvis symbolerne ligger "klumpet" sammen. Endvidere er data projiceret ind på henholdsvis x og y-aksen, og der er angivet et histogram.



6.7 Variogram

Plot af det estimerede semivariogram fremkommer ved at klikke på "Beregn variogram" og dernæst "Plot variogram" på analyse siden. Variogrammet giver en meget enkel vurdering af, om der er spatial korrelation. Et fladt variogram indikerer, at der ikke er nogen spatial sammenhæng i data. Et variogram, der stiger med afstanden, er et udtryk for at der eksisterer korrelation i rummet.



Forklaring på "Estimeret variogram"

Punkterne er fremkommet ved at inddele alle indbyrdes afstande mellem to målepunkter i en række ikke overlappende intervaller (int.) f.eks.: int. 1:[0:50m], int. 2:[50:100m],etc.

Dernæst er variansen mellem alle punktpar med en indbyrdes afstand fra [0:50m] (altså tilhørende int1) beregnet, herefter beregnes variansen mellem alle punktpar i grp2 etc.

Hvis data udviser rumlig korrelation, vil data tæt på hinanden være mere ens og dermed have mindre varians end data langt fra hinanden. Dvs at et plot af afstand (intervallerne) mod variansen vil være en voksende kurve.

Den afstand hvor data ikke længere er rumligt korrelerede betegnes "Range" (der hvor kurven flader ud) og variansen ved denne afstand betegnes "Sill". Endnu en parameter er vigtig i beskrivelsen af den rumlige korrelation, det er "Nugget" der beskriver den variation data udviser meget tæt på hinanden (dvs. afstanden 0 m). Nugget beskriver den naturlige variation på prøver udtaget samme tid og sted og inkluderer også forsøgs/laboratorieusikkerhed.

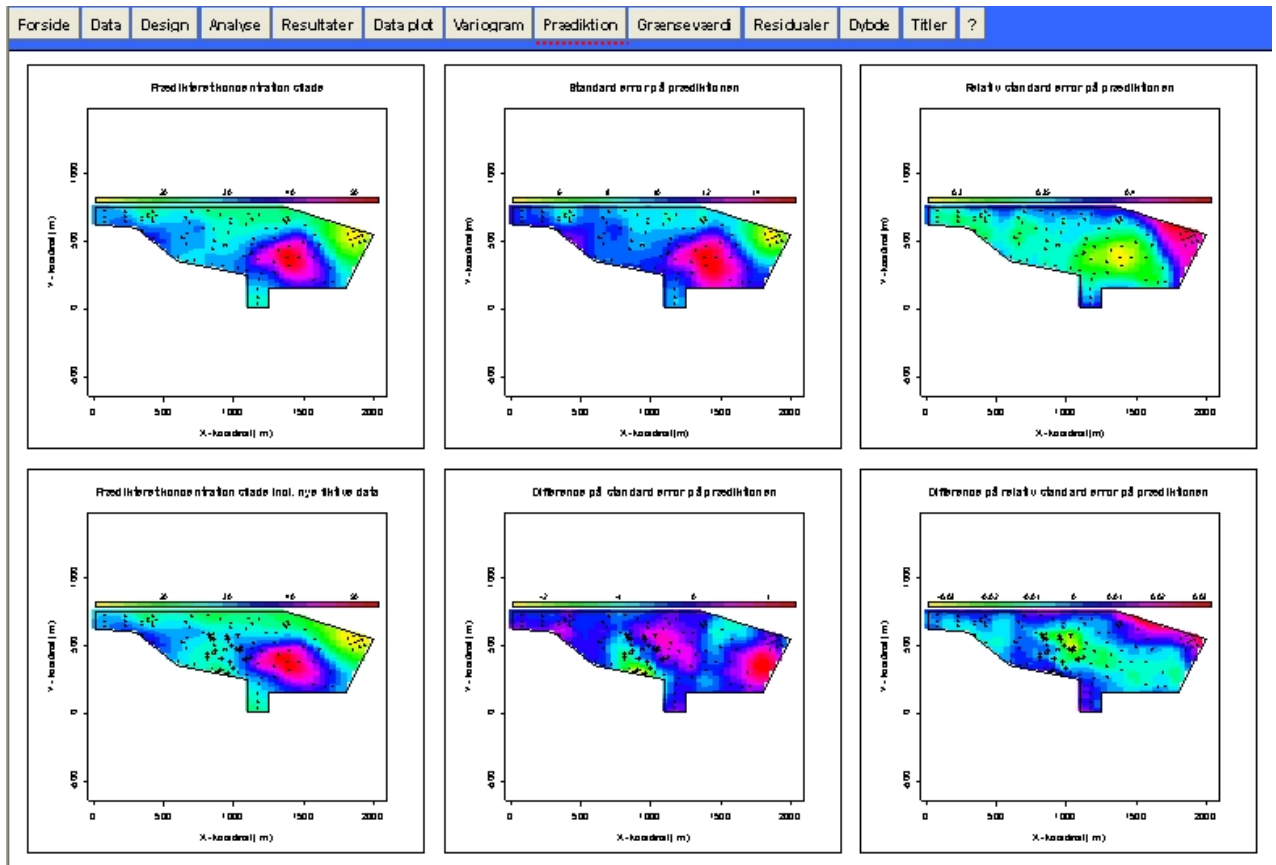
Der er fittet en sfærisk "variogram-funktion" til punkterne.

Er data blot en tilfældig sky, er der ingen spatial korrelation, på ovenstående eksempel ses en korrelation ud til ca. 400 meter og derefter ingen spatial korrelation.

6.8 Prædiktion

Efter at have foretaget maximumlikelihood estimation af de spatiale parametre og vurderet de diagnostiske residual plot, kan forureningsfladen prædikteres. Plot af den prædikterede koncentration indenfor området, usikkerheden på prædiktionen samt den relative usikkerhed er vist nedenstående.

Yderligere er der i de nederste tre plot inkluderet nye data, hvilket tilsyneladende afgrænser forureningen yderligere.

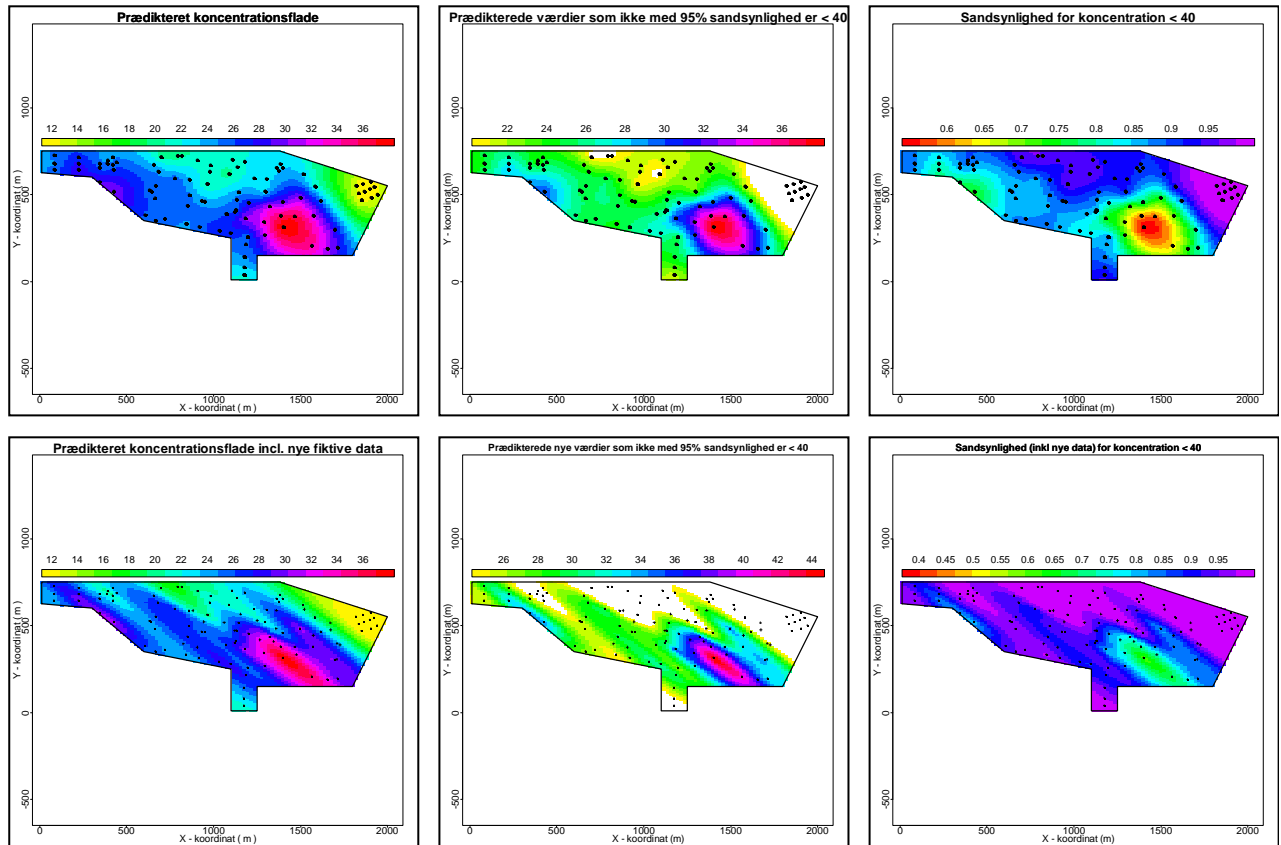


Der identificeres umiddelbart ét område med høj koncentration (rødt). Det bemærkes, at usikkerheden er størst i dette område, men at den relative usikkerhed er lille.

6.9 Grænseværdi

Når prædiktionen er plottet kan sandsynligheden for overskridelse af den angivne grænseværdi illustreres. Koncentrationen i de punkter, hvor man på basis af de prædikterede værdier and deres usikkerhed ikke med f.eks. 95 % sikkerhed kan sige, at koncentrationen er under grænseværdien, vil blive vist. De øvrige punkter, hvor den øvre 95 % ikke overstiger grænseværdien, er hvide.

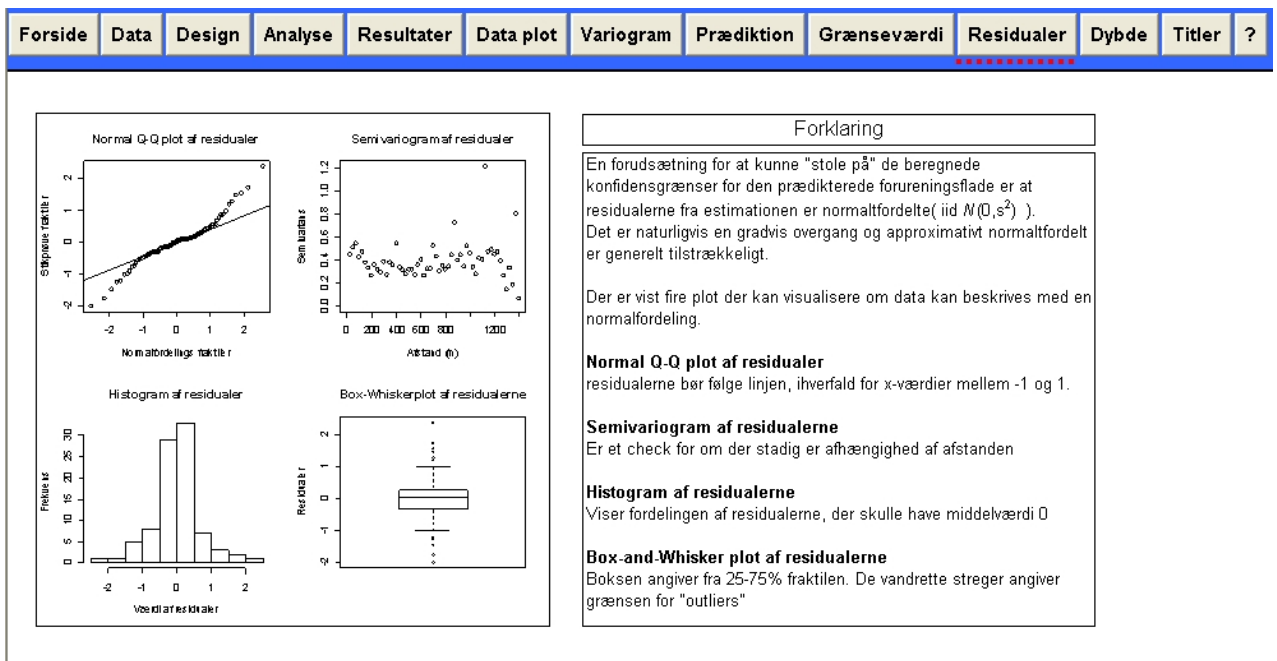
I de tre nederste plot er inkluderet 20 nye punkter angivet med kryds, og dette afgrænser yderligere forureningen.



6.10 Residualer

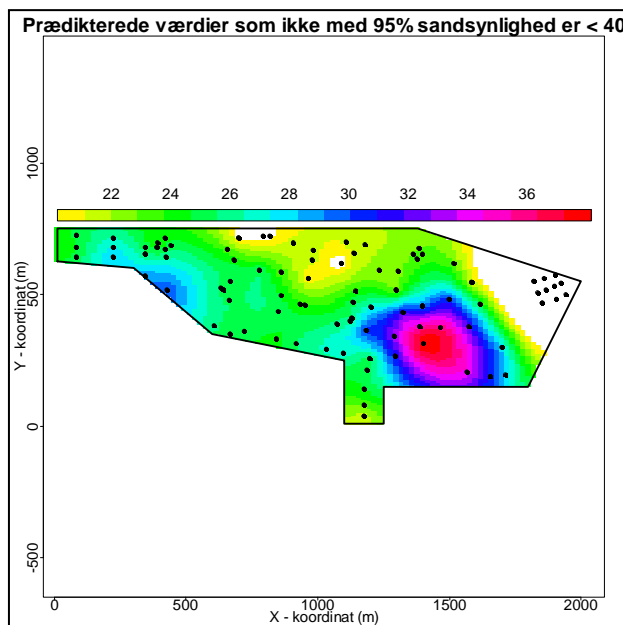
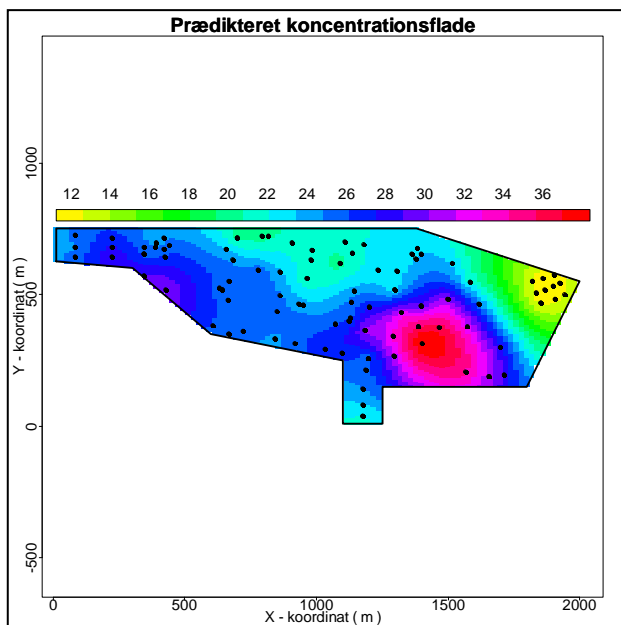
Plot af residualer fra estimationen er et vigtigt redskab til at vurdere, om estimationen af de spatiale parametre har fanget den variation i data. For at kunne stole på usikkerheden på det prædikerede koncentrationsniveau, skal residualerne være uafhængige og identisk normalfordelt. QQ-plottet checker normalitet (sammen med histogram og Box-whiskerplot), og semivariogrammer undersøger uafhængigheden af afstanden.

Der ses i eksemplet nedenfor approksimativ normalitet samt ingen spatial korrelation i residualerne.



6.11 Dybde

Plot af de prædikterede værdier samt de prædikterede værdier, som ikke med 95 % sikkerhed kan siges at være mindre en grænseværdien, overføres til dybde arket. Der overføres og gemmes grafer for alle de valgte analyse dybder (vælges i data-arket).



Den valgte dybde er angivet i venstre side af arket.

6.12 Titler

Her kan frit ændres titler til de enkelte plots.

Forside	Data	Design	Analyse	Resultater	Data plot	Variogram	Prædiktion	Grænseværdi	Residualer	Dybde	Titler	?
					Navn på plot		Titler, hhv på x,y-akser samt overskrift					
					Oversigtsplot.		(plottes i "Data plot")					
					X-akse	X - koordinat (m)						
					Y-akse	Y - koordinat (m)						
					Navn på data	Data						
					Semivariogram		(plottes i "Variogram")					
					X-akse	Afstand (m)						
					Y-akse	Semivarians						
					Titel	Estimeret semivariogram						
					Plot af prædiktionen og usikkerheden på denne.		(plottes i "Prædiktion")					
					X-akse	X - koordinat (m)						
					Y-akse	Y - koordinat (m)						
					Titel koncentrationsflade	Prædikteret koncentrationsflade						
					Titel std.err. på koncentrationsfladen	Standard error på prædiktionen						
					Titel relativ std.err. på koncentrationsfladen	Relativ standard error på prædiktionen						
					Titel på std.err. Difference mellem original og incl nye data	Difference på standard error på prædiktionen						
					Titel på nye prædikterede flade	Prædikteret koncentrationsflade incl. nye fiktive data						
					Titel på relativ. Std. Err. Difference	Difference på relativ standard error på prædiktionen						
					ot af prædikterede værdier, hvor øvre konfidensgrænse overskrider grænseværdien		(plottes i "Grænseværdi")					
					X-akse	X - koordinat (m)						
					Y-akse	Y - koordinat (m)						
					Titel	Prædikterede værdier hvor øvre 80% konfidensgrænse er > 24						
					Titel, incl nye data	Prædikterede nye værdier hvor øvre 80% konfidensgrænse er > 24						
					Plot af sandsynligheden for overskridelse af grænseværdien.		(plottes i "Grænseværdi")					
					X-akse	X - koordinat (m)						
					Y-akse	Y - koordinat (m)						
					Titel	Sandsynlighed for koncentration > 24						
					Titel ny usikkerhedplot II	Sandsynlighed (inkl nye data) for koncentration > 24						
					Residualplot, QQ-plot		(plottes i "Residualer")					
					X-akse	Normalfordelings fraktiler						
					Y-akse	Stikprøve fraktiler						
					Titel	Normal Q-Q plot af residualer						
					Residualplot, Semivariogram		(plottes i "Residualer")					
					X-akse	Afstand (m)						
					Y-akse	Semivarians						
					Titel	Semivariogram af residualer						
					Residualplot, histogram		(plottes i "Residualer")					
					X-akse	Værdi af residualer						
					Y-akse	Frekvens						
					Titel	Histogram af residualer						

6.13 Hjælp (?)

Åbner denne vejledning. Yderligere er der på alle sider angivet en forklaringsboks med tekst, der beskriver funktionaliteten samt indholdet af de enkelte sider.

7 Eksempel på anvendelse af programmet

Dette eksempel anvendelse og fortolkning af de output, som programmet giver. For en beskrivelse af den sandsynlighedsbaserede undersøgelsesstrategi henvises til /1/. Datasættet er fra en skydebane på Sjælland.

7.1 Data og afgrænsning af området

Først skal data kopieres in i "Data" arket. I dette tilfælde består datasættet af 123 målepunkter, hvor ét målepunkt er ét punkt i X,Y,Z-planen. Disse koordinater skal kopieres til kolonne D:F med første punkt i D6:F6 som vist nedenstående i Figur 2.

I dette tilfælde er målt 2 forureningskomponenter Blu (Pb) og Cadmium (Cd). Disse skal kopieres til celle H:I med første måling i H6:I6 som vist nedenstående i Figur 2.

Programmet skal yderligere vide, hvor der skal prædikteres. (X,Y)-koordinaterne for området skal indtastes i kolonne A:B med første koordinatsæt i A6:B6 som vist nedenstående i Figur 2. Det er et krav, at sidste punkt og første punkt i område afgrænsningen er ens.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
Række 3	Område afgrænsning			Målepunkt koordinater				Variable					
Række 4	Xkoord	Ykoord		Xkoord	Ykoord	Zkoord		id	pb	Cd	Var3	Var4	Var5
Række 5	10,00	625,00		1197,00	256,00	1,00	1	3,00	0,05				
Række 6	300,00	600,00		844,00	332,00	0,50	2	18,00	0,13				

Figur 2
Input data.

Efter at data er på plads, skal træffes nogle valg, før estimationen kan foretages.

1. Den afhængige variabel (variablen, der skal beskrives) skal vælges. Dette gøres ved at sætte et flueben (ved at klikke med musen) i kassen med overskriften "Vælg afhængig variabel ("Y")" til højre for dataområdet. Der må kunne sættes ét flueben. Default er der valgt den første variabel i kolonne H.
2. Yderligere skal der vælges eventuelle forklarende variable ("X-variable") efter samme princip. Her er det dog tilladt at vælge flere forklarende variable ved at sætte flere flueben.
3. Endelig skal der vælges dybder (Z-koordinater), der skal medtages. Der kan vælges alle målinger eller et interval med min og max dybde.

Herefter kan estimationen foretages, men først lidt diagnostiske øvelser for at få lidt mere indsigt i data. Dette fås ved at klikke på "indlæs data" og derefter "Resumé og plot data". Hermed fremkommer deskriptiv statistik og plot af data.

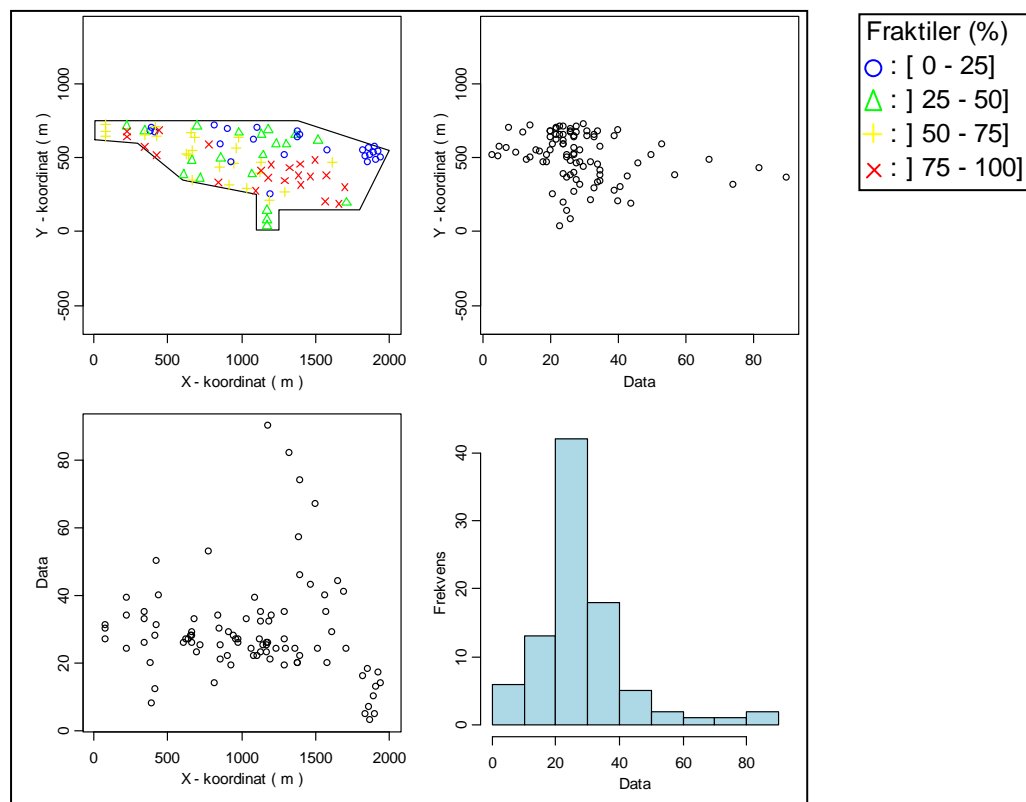
7.2 Deskriptiv statistik

Første trin i analysen er at "kigge på data". Kigge betyder både et grafisk og numerisk kig. I resultater er X,Y,Z-koordinaterne summeret med minimum og maksimum. Yderligere er X,Y-afstandene summeret med minimum og maksimum, samt en række fraktiler. Endelig er den forklarende variabel summeret. Disse størrelser vist i Figur 3.

Deskriptivt om data		Afstande (x,y) (m)		X - koordinat	
Minimum	3,000	Minimum	13,60	Minimum	82
5%	8,745	5%	118,39	Maksimum	1941
10%	14,000	10%	195,04	Y - koordinat	
25%	22,000	25%	330,34	Minimum	38
50%	26,500	50%	557,96	Maksimum	725
75%	33,000	75%	881,17	Z - koordinat	
90%	43,100	90%	1196,51	Minimum	0,15
95%	55,200	95%	1410,27	Maksimum	0,15
Maximum	90,000	Maximum	1872,57		
Mean	28,916				
Varians	216,192				
Std. Afv.	14,703				
CV	0,508				

Figur 3
Deskriptiv statistik.

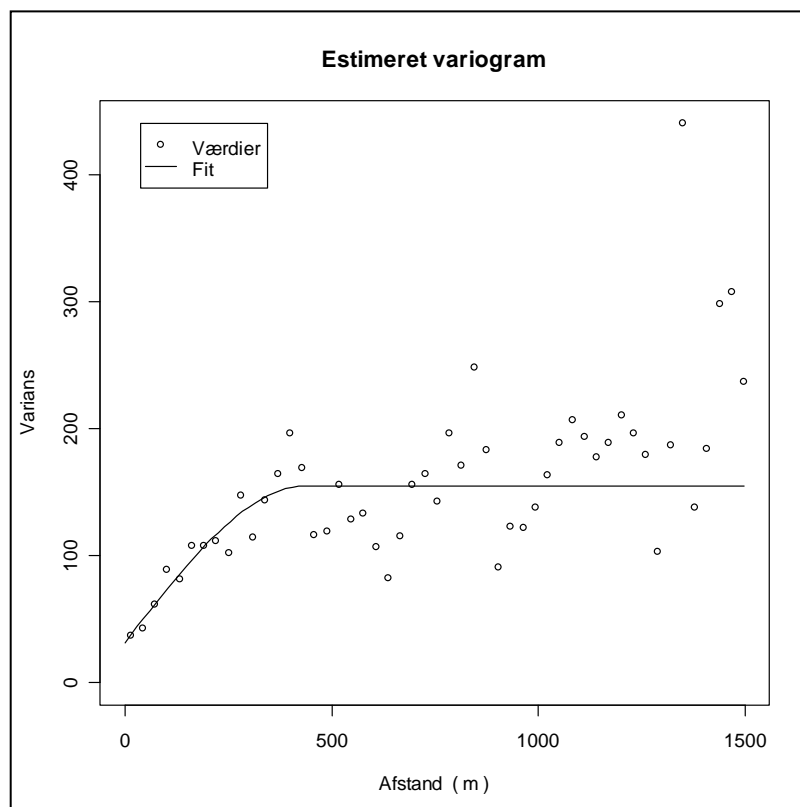
Fire plots giver et spatielt førstehåndsintryk af datas geografiske fordeling, se Figur 4. Øverst til venstre har datapunkterne farvekode baseret på deres værdi: Blå cirkel er de 25% laveste værdier, lysegrøn trekant [25-50%], gult plus [50-75%] og rødt kryds er de 25% højeste.



Figur 4
Plot af datas geografiske fordeling.

7.3 Er der spatial korrelation, et kik på variogrammet

For at vurdere, om det er relevant at benytte spatiale statistiske metoder, betragtes variogrammet. Variogrammet beregnes her ved at inddele afstanden mellem observationerne i 50 intervaller. Dernæst beregnes variansen mellem alle observationer de pågældende intervaller. Disse varianser plottes derefter mod afstanden mellem observationer. Hvis data ikke har nogen spatial sammenhæng, dvs. hvis data tæt på hinanden ikke er mere ens end data langt fra hinanden, vil data være en sky af punkter uden nogen åbenlys sammenhæng. Er der derimod spatial korrelation/sammenhæng, betyder det, at data tæt på hinanden er mere ens end data langt fra hinanden og dermed har mindre varians. Dette vil give en voksende varians med afstanden mellem observationerne. I Figur 5 ses en tydelig afhængighed af afstanden, idet variansen stiger indtil en afstand omkring 400 m.



Figur 5
Variogram punkter og en fitted sfærisk funktion.

For at få et udtryk for variationens afhængighed af afstanden, fittes en én sfærisk variogramfunktion til de empiriske variogramdata. Parameter estimerne kan ses i på siden "Resultater" og er vist i Figur 6.

Fitted variogram:		
	Nugget	31,524
Sfærisk	Sill	154,991
	Phi (Range)	441,325

Figur 6
Parameter estimer fra variogram fitting.

Funktionen er karakteriseret ved 3 parametre som ligeledes er skitseret i det teoretisk variogram, se Figur 5.

Nugget er den variation, der er mellem to prøver taget meget tæt på hinanden. Her betyder tæt på hinanden, at punkter med indbyrdes afstande på nul vil udvise denne varians. Variansen stiger derefter mod Sill som den gennemsnitlige variation, når der ikke længere er nogen spatial sammenhæng.

Sill er den maksimale variation, det vil sige den variation, der er i data stammer fra målepunkter med så stor indbyrdes afstand, at de er uafhængige. For et datasæt uden geografisk korrelation, er **Sill** blot variansen af data.

Range betegner den afstand, hvor målingerne ikke længere er korrelerede, dvs. afstanden indtil **Sill**. I dette eksempel er datapunkter med en indbyrdes afstand på mere en 441m uafhængige.

Forskellen mellem **Sill** og **Nugget**, kaldet **Partial Sill**, er relevant, idet denne forskel siger noget om, hvor stor en del af variationen i data, der kan forklares ved geografisk afhængighed.

7.4 Vurdering af koncentration i hele området

Det overordnede formål med analysen er at få prædikeret koncentrationen i ethvert punkt ud fra de tilgængelige observationer. For at kunne foretage denne prædiktation, skal den optimale spatiale model findes ved at optimere likelihoodfunktionen, og parametrene estimeres simultant og er derved uafhængig af subjektive valg af eks transformation af Y eller valg af afstande til variogrammet. Da nugget, sill og range er parametre i den optimerede likelihoodfunktion, er det muligt at få information / inferens om estimererne og dermed vurdere usikkerheden på dem.

7.4.1 Estimation af den spatiale korrelation

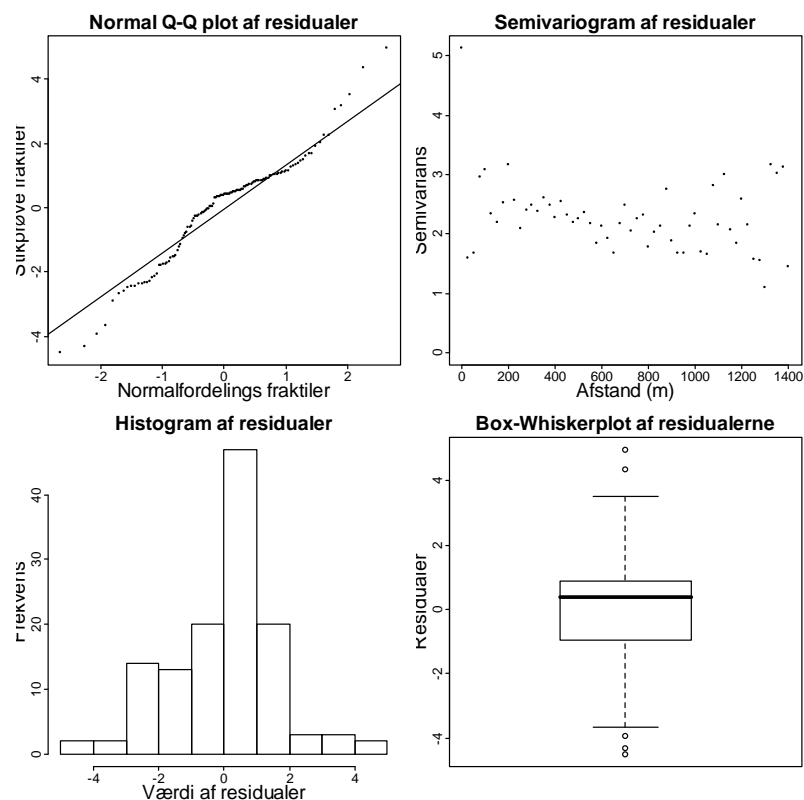
De spatiale parametre er vist i Figur 7. Øverst findes informationskriterier om den fittede model. Korrelationen ikke er signifikant forskellig for forskellige retninger. Data er korrelerede indenfor afstande på godt 500m (537m), og variansen på observationer helt tæt er ca tre fjerdedele af variansen mellem observationer med en indbyrdes afstand på godt 500 m eller mere. Data er transformerede.

Maximum likelihood Estimation, Originale data	
Informationskriterier	
Akaike (AIC)	1000,75
Bayesian (BIC)	1014,93
Spatiale parametre	
Nugget	2,947
Partial Sill	1,000
Range	536,884
Retning	0,000
Retningsfaktor	1,000
Transformation af koncentrationen	
Box-Cox (lambda)	0,367
Niveau, trend og forklarende variable	
Niveau	5,600
X-koordinat	
Y-koordinat	

Figur 7
Spatiale parametre.

7.4.2 Vurdering af estimationen, residualer

Det er valgt udelukkende at vurdere residualerne visuelt. Residualerne giver værdifuld information om de fittede parametre og dermed den fittede model i forhold til data. For at kunne stole på de usikkerheder, der angives på de prædikterede værdier, skal residualerne være approksimativt normalfordelte og ikke indeholde nogen spatial korrelation. Dette er illustreret i de fire nedenstående plots i Figur 8. Den approksimative normalfordeling er adresseret med et Q-Q plot, et histogram samt et box-whisker plot. Den spatiale korrelation, dvs. om der stadig er spatial information i residualerne, i et semivariogram.



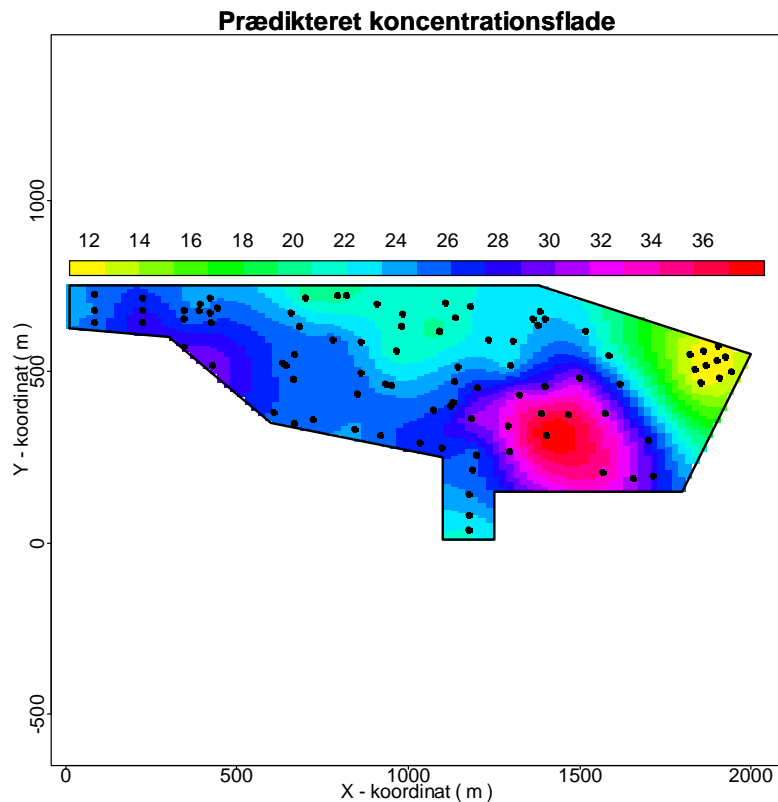
Figur 8
Residualplot fra estimation af spatiale parametre.

7.4.3 Prædiktion af koncentrationen indenfor området

Prædiktionen af koncentrationen er det bedste gæt på, hvad koncentrationen af den pågældende forureningskomponent er i ethvert punkt indenfor området, Figur 9.

I "data-arket" er valgt en grid størrelse, n , der lægger et kvadratisk net med $n \times n$ punkter ned over området. I ethvert grid-punkt estimeres koncentrationen ud fra et vægtet gennemsnit af målingerne i de omkringliggende målepunkter. Vægten beregnes ud fra de estimerede spatiale parametre, så punkter tæt på vægter højere en punkter længere væk. Vælges et større n vil det prædikterede billede få en større opløsning og dermed umiddelbart virke mere nøjagtigt / korrekt. Her skal det indskræpes, at det prædiktere billede altid skal have selskab af et usikkerhedsplot.

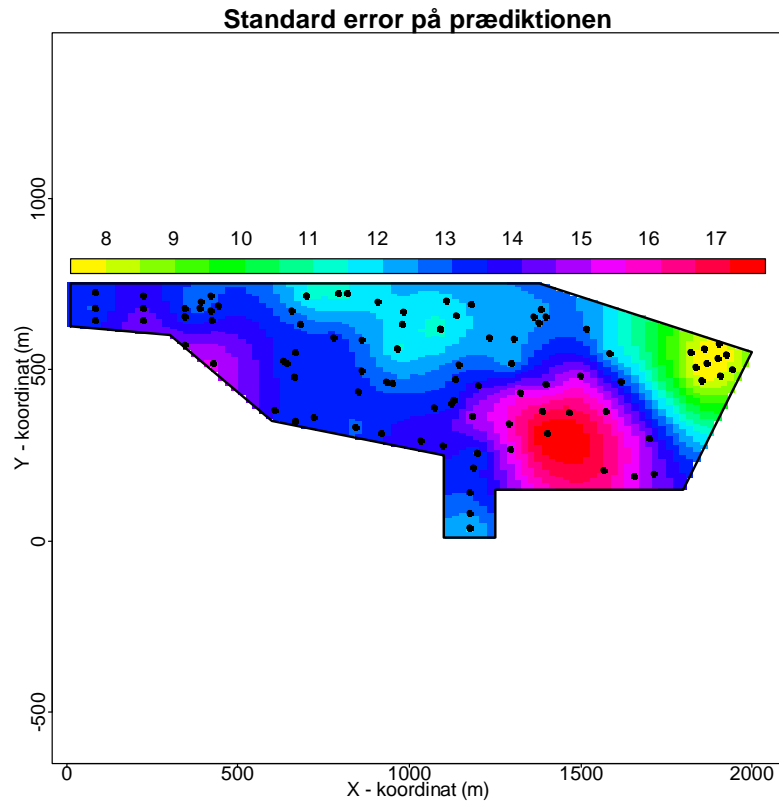
I Figur 9 kan ses ét delområde, hvor koncentrationen nærmer sig grænseværdien på 40 mg Pb/kg jord.



Figur 9
Den prædikterede koncentration af bly i området.

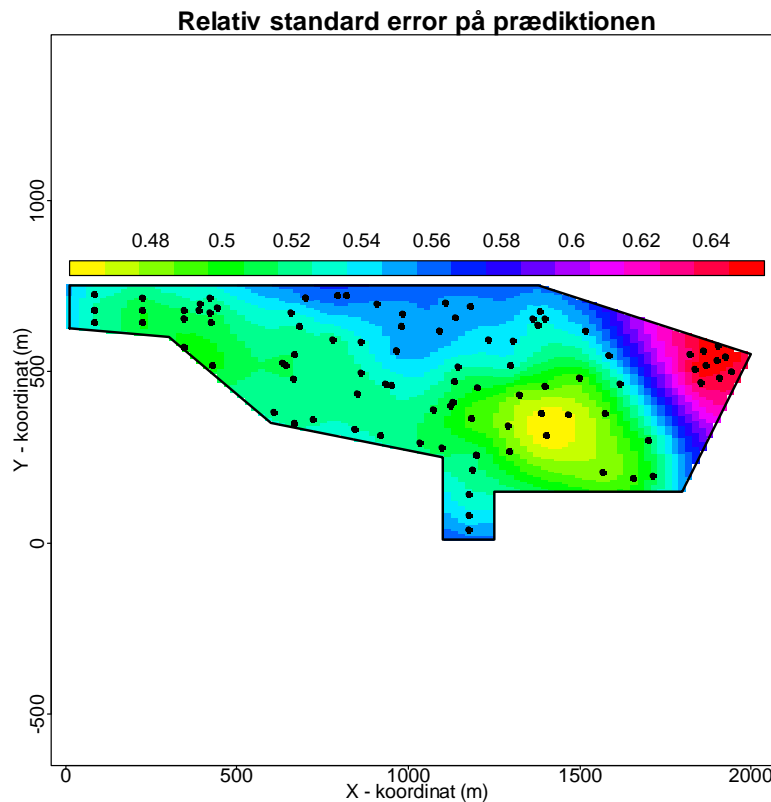
7.4.4 Usikkerhed på prædiktion af koncentrationen

I Figur 10 er vist usikkerheden på de prædikterede værdier. Usikkerheden er vist som standard error. Det bemærkes, at de prædikterede værdier og standard error er stærkt positivt korrelerede. Sagt på en anden måde, så vil en høj værdi i reglen også følges med en høj standard error. Derfor kan den relative error være mere informativ.



Figur 10
Standard error på prædiktionen.

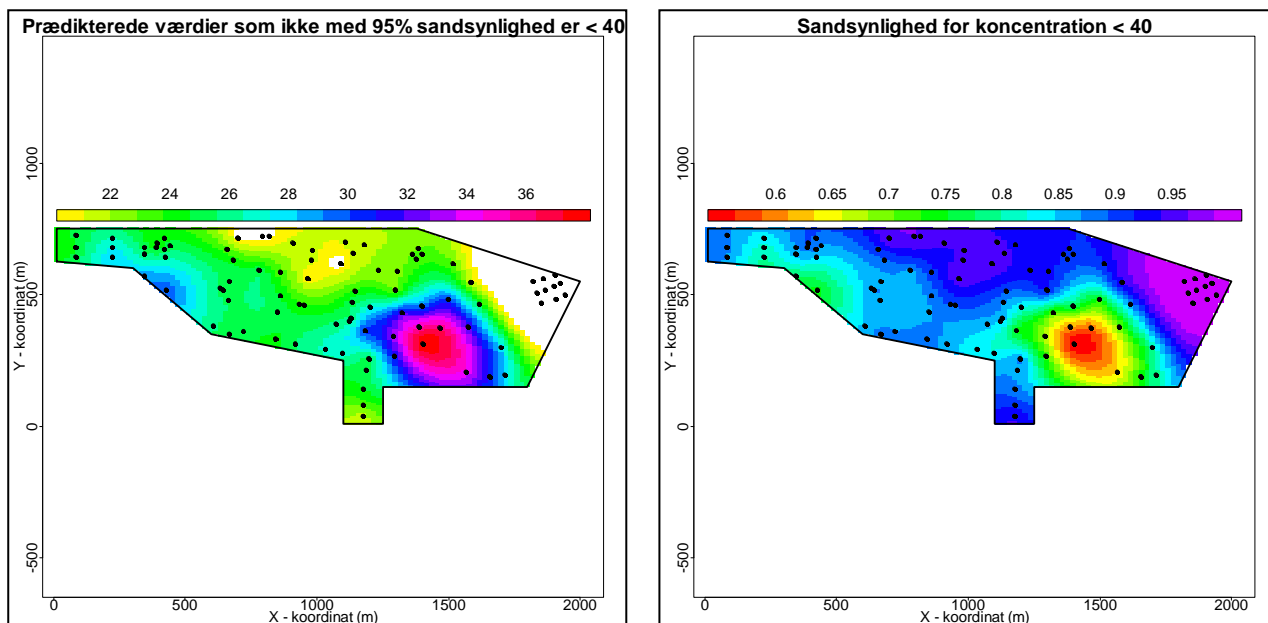
I Figur 11 er vist den relative standard error, dvs standard error divideret med den prædikterede værdi.



Figur 11
Relativ standard error på prediktionen.

7.4.5 Koncentrationen i forhold til en grænseværdi

Vurdering af den prædikterede koncentration og dennes usikkerhed i forhold til en grænseværdi er vist i Figur 12. Metoden er at vurdere i ethvert punkt, om grænseværdien er større end 95 % fraktilen i den normalfordeling, der beskriver variationen på den prædikterede værdi. Er dette tilfældet, plottes den prædikterede værdi. Er 95 % fraktilen derimod mindre end grænseværdien, udelades værdien (området bliver hvidt).

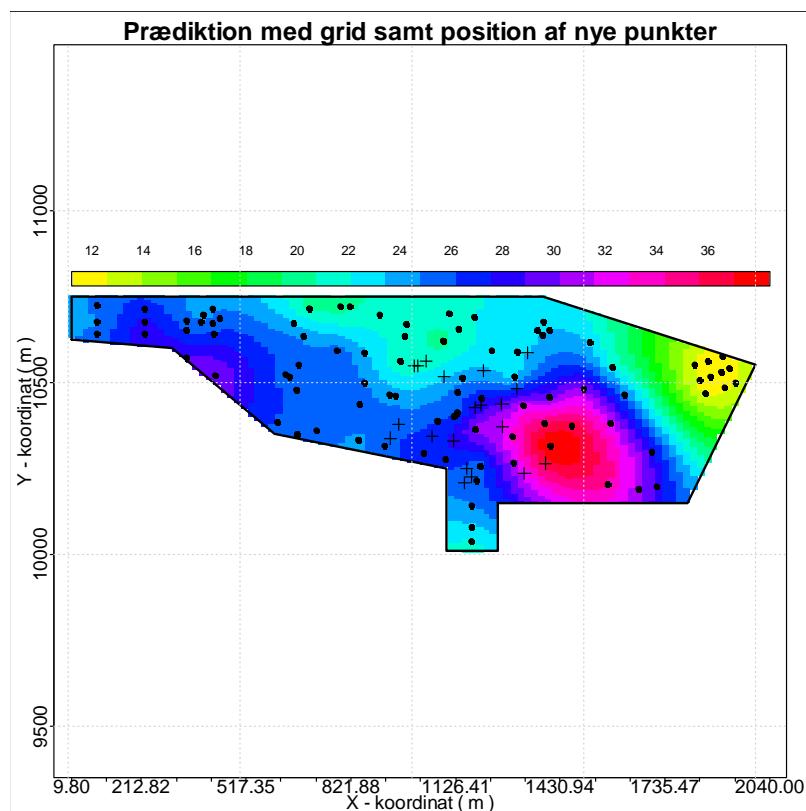


Figur 12
Prædikterede værdier i forhold til grænseværdi.

7.4.6 Information fra nye målinger

Ønskes det at vurdere, hvordan nye målepunkter vil påvirke prædiktionen og usikkerheden på denne, kan man indtaste positioner og koncentration manuelt i design arket eller generere dem automatisk.

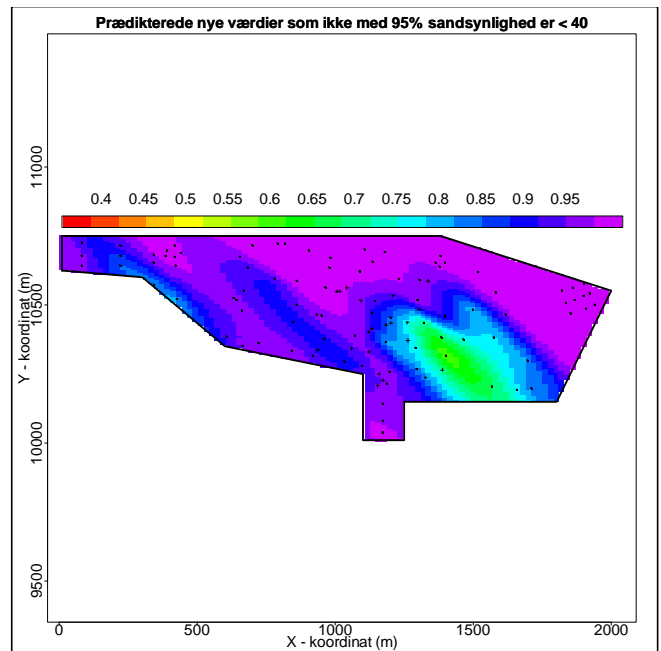
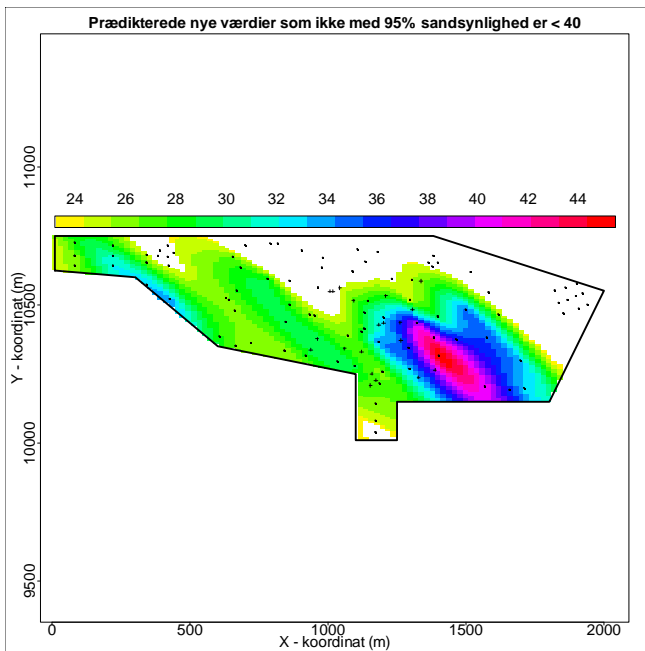
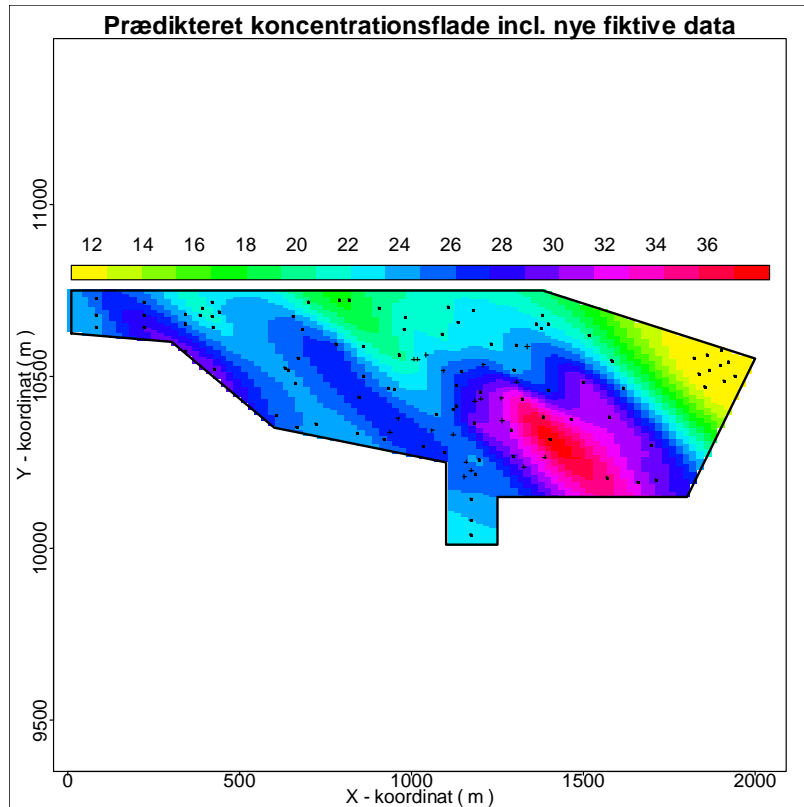
I Figur 13 er illustreret 20 nye punkter. Disse punkter er genereret automatisk (tilfældigt indenfor et grid). I hvert punkt er koncentrationen er simuleret baseret på den prædikterede koncentration og usikkerheden på denne. Disse nye punkter benyttes til at vurdere prædiktionen og usikkerheden på baggrund af de gamle og nye data.



Figur 13
Positioner for ny, hypotetiske data.

Det er derefter muligt at lave en ny maksimum likelihood estimation baseret på den gamle sammen med de nye data.

Den prædikterede koncentration og ændringerne i usikkerheden på denne estimeres og plottes baseret på de målte observationer og på de nye simulerede data, se Figur 14.



Figur 14
Prædiktion og sandsynligheder med ny, hypotetiske punkter.

På denne måde kan betydningen af nye observationer undersøges.

8 Referencer

1. Grøn, C., Overgaard, J., Madsen, H., Michael, L., Andersen, L., and Andersen, J. S. Metoder til estimering af undersøgelsesomfanget og til vurdering af usikkerheden af forureningsafgrænsningen. 2009.
2. Cressie NA: Statistics for Spatial Data. Wiley & Sons, 1991,
3. Ripley BD: Statistical inference for spatial processes. Cambridge, Cambridge University Pree, 1989,
4. Diggle PJ: Statistical analysis of spatial point patterns. London, Academic Press, 1983,
5. Nielsen, A. A. Analysis of Regularly and Irregularly Sampled Spatial, Multivariate, and Multi-temporal Data. 1994. Technical University of Denmark.
6. Andersen, J. S. Flerdimensionale rumligt korrelerede forureningsdata. 1994. Technical University of Denmark.
7. Diggle PJ, Ribeiro JR: Model-based geostatistics. Springer, 2006,
8. Diggle, P. J. and Ribeiro, J. R. Model-based geostatistics. Caxambu: Associação Brasileira de Estatística. (14° SINAPE - Simpósio Nacional de Probabilidade e Estatística). 2000.
9. Ribeiro, J. R. and Diggle, P. J. geoS: A geostatistical library for S-PLUS. ST-99-09. 1999. Lancaster University. Technical report.