



Miljøministeriet
Miljøstyrelsen

Udvidelse af værktøj til vurdering af pesticidsårbarhed med non-target analyser

Miljøprojekt nr. 2208

*Teknologiprogram for jord-
og grundvandsforurening*

August 2022

Udgiver: Miljøstyrelsen

Redaktion:

Martin Hansen (Aarhus Universitet),
Eva Birch Karlsen (COWI A/S),
Chloe Annelies Lanthers (COWI A/S),
Kirsten Rügge (COWI A/S)

Styregruppemedlemmer:

Signe Bonde Rasmussen (MST),
Helle Rűsz Hansen (MST),
Lisa Vogel (MST),
Nanette Levanius Schouw Christiansen (Region Sjælland) og
Marianne Jeppesen (HOFOR A/S)

Miljøstyrelsen offentliggør rapporter og indlæg vedrørende forsknings- og udviklingsprojekter inden for miljøsektoren, som er finansieret af Miljøstyrelsen. 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.

Må citeres med kildeangivelse

Indhold

Resume	4
Abstract	5
1. Introduktion	6
1.1 Projektets formål	6
1.2 Projekt fase 1 og 2	6
1.3 Krav til afrapportering	6
1.4 Styregruppe	7
2. Fase 1 — Hedeland	8
2.1 COWI Pesticidsårbarhedsværktøj	8
2.2 Region Sjælland vandanalyser Hedeland	8
2.3 Non-target analyser Hedeland	8
2.4 Metodebeskrivelse af datasammenligningen	9
3. Fase 2 — GRUMO	10
3.1 GRUMO vandanalyser	10
3.2 Non-target analyser i GRUMO borerer	10
3.3 Sammenstilling af analyseresultater og pesticidesårbarhedsværktøj	11
4. Resultater	12
4.1 Fase 1 — Hedeland	12
4.2 Fase 2 — GRUMO	13
5. Konklusion og perspektivering	15
6. Referencer	16
Bilag 1. Metodebeskrivelse – dokumentation for databehandling og kort	17
Bilag 2. Kortmateriale for fase 1	20
Bilag 3. Kortmateriale for fase 2	21

Resume

Projektet 'Udvidelse af værktøj til vurdering af pesticidsårbarhed med non-target screening analyse', er udført som et samarbejde mellem Aarhus Universitet og COWI. Projektet er realiseret ved hjælp af midler fra Teknologiudviklingsprogrammet for jord- og grundvandsforurening (TUP).

Projektet blev udført i to faser, med start i september 2021 og afslutning i juni 2022. Første fase omhandlede et casestudie for området Hedeland ved Roskilde, hvor der er en række kendte jordforureningslokaliteter. Region Sjælland har bidraget med data fra target-analyser for monitoringsboringer i området og Aarhus Universitet har analyseret de samme boringer med non-target screening (NTS) analysemetode. Disse resultater blev sammenlignet med COWIs 'Værktøj til vurdering af grundvandets pesticidsårbarhed'. Værktøjet er et machine learning værktøj, der bygger på en algoritme, som er trænet med en række datasæt. Analysere-sultaterne blev sammenholdt med værktøjets forudsigelser om risiko for forurening med pesti-cider. Der er overvejende sammenfald mellem pesticidfund og værktøjets forudsigelser for ri-siko for fund. Samtidig viste sammenstillingen, at der er grundlag for yderligere optimering af værktøjets algoritme og dermed forbedre risikoforudsigelserne for forurening med pesticider i den givne geologi.

Projektets fase 2 omfattede udtagning af nye vandanalyser i 11 GRUMO-boringer, hvor Aar-hus Universitet har analyseret prøverne med non-target analyse. Non-target analyseresulta-terne blev sammenholdt dels med Miljøstyrelsens GRUMO analyseresultater og dels med massescreeningsresultater. Alle analyseresultater blev desuden sammenholdt med COWIs sårbarhedsværktøj. Her blev der ligeledes foretaget en sammenligning og optælling af, om pe-sticidfund i target og non-target analyser ligger i områder, hvor der er høj sandsynlighed, for at finde pesticider.

Projektet er afsluttet med en række anbefalinger. Det konkluderes, at både target og non-tar-get analysedata vil kunne benyttes som input til at træne pesticidsårbarhedsværktøjet yderli-gere. Anvendelse af non-target analysedata kræver dog, at data filtreres, da analysedata i sin rå form udelukkende viser en responsværdi, og pesticider i prøveresultaterne ikke er identifice-ret. Der er således grundlag for yderligere udviklingsarbejde, således at vi ved hjælp af NTS-data kan indgå som vidensgrundlag ift. hvor man kan forvente at finde pesticider i grundvan-det.

Abstract

This research project "*Expansion of machine-learning tool with non-target chemical screening analysis to forecast groundwater pesticide vulnerability*". The project was a collaboration between Aarhus University and COWI, and funded by the Danish Environmental Protection Agency under the Technology development program for soil and groundwater pollution (TUP).

The project was carried out in two phases, starting in September 2021 and ending in June 2022. The first phase deals with a case study for the Hedeland area near Roskilde, with a known soil pollution. Region Zealand has contributed data from chemical analyses for a number of monitoring wells in the area and Aarhus University has analysed the same wells with a holistic non-target analysis method. These results are compared with COWI's 'Tool for assessing groundwater pesticide vulnerability'. The tool is a machine learning tool based on an algorithm that is trained with a series of data sets. The analysis results are compared with the tool's predictions about the probability of finding pesticides. There is a predominant coincidence between pesticide findings and the tool's predictions for probability of findings. At the same time, the compilation shows that there is a basis for further optimization of the tool's algorithm and thereby improve the risk predictions for contamination with pesticides in the given geology.

Phase 2 of the project included the analyses of 11 GRUMO wells, where Aarhus University has analysed the samples with non-target analysis and The Danish EPA performed chemical analysis and a mass screening for pesticides. The non-target analysis results are compared partly with the Danish Environmental Protection Agency's GRUMO analysis results and partly with mass screening results. In addition, all analysis results are compared with COWI's vulnerability tool. Here, a comparison and counting has also been made of whether pesticide findings in target and non-target analyses are located in areas where there is a high probability of finding pesticides in the groundwater.

The project is concluded with a series of recommendations. It is concluded that both target and non-target analysis data can be used as input to train the pesticide vulnerability tool further. However, the use of non-target analysis data requires that this data should be filtered, as it in its raw form only show a response value and pesticides in the test results are not identified. There is thus a basis for further development work, so that we can use NTS data as a knowledge base in relation to where one can expect to find pesticides in groundwater.

1. Introduktion

Aarhus Universitet og COWI indsendte i maj 2021 et projektoplæg til Miljøstyrelsens Teknologipulje (TUP), med overskriften 'Udvidelse af værktøj til vurdering af pesticidesårbarhed med non-target screening analyse'.

Teknologipuljen bevilgede de ansøgte midler på i alt 250.000 kr., fordelt til Aarhus Universitet som primær tilskudsmodtager og COWI som underleverandør (1). Der er efterfølgende indgået kontrakt mellem Aarhus Universitet og COWI angående projektet, og arbejdet med projektet blev opstartet i september 2021 og afsluttet i juni 2022.

1.1 Projektets formål

Formålsbeskrivelsen fra ansøgningen lyder: Projektet vil som det første sigte mod at sammenstille avanceret non-target screening (NTS) data og pesticidesårbarhedsmodellering som GIS-lag. Vi vil sammenkoble COWIs nyudviklede maskinlæringsværktøj til vurdering af pesticidesårbarhed fra fladekilde-forurening og NTS grundvandsdata (1).

Maskinlæringsværktøjet er en algoritme, der er udviklet til at forudse, hvor stor risiko der er for at finde pesticider eller nedbrydningsprodukter et givent sted i Danmark, i et givent grundvandsmagasin (2). NTS er en holistisk kemisk analyse, der anvender højopløsning masse-spektrometri, og som sigter mod at detektere mange molekyler i en given prøve og uden brug af eventuelle forhåndsinformationer, så som kendte punktkildeforureninger (3).

Projektet afprøver indledningsvist hypotesen om at *maskinlæringsværktøjet kan modellere pesticidesårbarhed ud fra et total NTS respons*.

1.2 Projekt fase 1 og 2

Projektet er inddelt i to faser, hvor fase 1 er en Hedeland-case og Fase 2 er en GRUMO-case. Se nærmere beskrivelse af faserne i afsnit 2 og 3 i denne rapport.

I dette projekt er der arbejdet dels med eksisterende analyseresultater fra et konkret caseområde – Hedeland i Region Sjælland, og dels er der udtaget nye vandprøver til non-target analyse, i udvalgte GRUMO-boringer. Prøverne blev udtaget ultimo 2021, og er blevet analyseret primo 2022.

Alle typer analyseresultater er sammenstillet med Pesticidesårbarhedsværktøjet med henblik på at foretage en vurdering af, hvordan de konstaterede target og non-target pesticidfund fordeler sig, og om der er sammenfald mellem fund og værktøjets forudsigelse om risiko for fund.

1.3 Krav til afrapportering

Afrapporteringskrav fra tildelingsbrev (4):

Ved projektets afslutning skal tilskudsmodtager aflevere en projektrapport. Rapporten skal indeholde resumé på såvel dansk som engelsk. Projektrapporten skal være klargjort til elektronisk publicering efter retningslinjerne på Miljøstyrelsens hjemmeside. Tilskudsmodtager har ansvar for at der læses faglig og sproglig korrektur på projektrapporten. Del 1 af det medsendte publikationsskema skal udfyldes af tilskudsmodtager og medsendes projektrapporten.

Denne rapport udgør den formelle afrapportering af projektet, i henhold til Miljøstyrelsens bestemmelser, som beskrevet i tildelingsbrev (4).

1.4 Styregruppe

Der er nedsat en styregruppe for projektet, jf. Miljøstyrelsens krav i forbindelse med tildeling af tilskud. Styregruppen består af:

Martin Hansen – Aarhus Universitet (Formand)

Eva Birch Karlsen – COWI

Chloe Lanthers – COWI

Kirsten Rügge – COWI

Marianne Jeppesen – HOFOR

Nanette Levanius Schouw Christiansen – Region Sjælland

Helle Rűsz Hansen – Miljøstyrelsen

Lisa Vogel – Miljøstyrelsen

Signe Bonde Rasmussen – Miljøstyrelsen

Der er afholdt tre styregruppemøder hhv. d. 25. november 2021, 3. maj 2022 og 17. juni 2022.

Derudover er projektet blevet præsenteret på et ATV Jord- og Grundvandsmøde d. 10. maj 2022.

2. Fase 1 — Hedeland

Projektet er blevet udført i to faser.

Fase 1: Sammenstilling af

- > Region Sjællands kemiske analyser (store analyse pakke) udtaget i udvalgte borer i Hedeland-området (V2 lokalitet, dvs. der er konstateret jordforurening)
- > Udtræk fra Jupiter på kemiske forbindelser for Hedeland området
- > Non-target analyser i Hedeland området i samme borer
- > COWI værktøj til forudsigelse af pesticidesårbarhed

2.1 COWI Pesticidsårbarhedsværktøj

Ved brug af maskinlæringsværktøjet har COWI i et selvstændigt projekt udviklet en algoritme, som skal forudsige risikoen for at finde pesticider og nedbrydningsprodukter i grundvandet, i et givent punkt (2).

Til udvikling af værktøjet er brugt en lang række miljødata vedr. jord- og grundvandsforhold. Dette er fx. nedbør, jordbund, geologi, arealanvendelse, redox-forhold, dybde til grundvandsmagasin, grundvandsdannelse, magasin-type, mv.

Analyseresultater fra Jupiter er anvendt til at træne modellen, således at modellen ved maskinlæringsprocesser sammenstiller data, og derved kan kategorisere, hvor stor sandsynlighed der er for at finde/ikke finde pesticider i et givent område i grundvandsmagasinet. Se den fulde beskrivelse og dokumentation for værktøjet, via link i reference (2).

2.2 Region Sjælland vandanalyser Hedeland

Region Sjælland fik i 2020 udtaget prøver til kemiske og NTS analyser i en række monitoringsboringer i Hedeland-området mellem Tune og Vindinge, som led i V2-kortlægning af en række forurenede lokaliteter. Prøverne til kemiske og NTS analyser blev udtaget henover de samme tre dage. Borer med analyseresultater, anvendt i fase 1, er angivet med DGU- og indtagnummer i Tabel 1. Der er 12 borer i alt med samlet 23 indtag.

Tabel 1. Oversigt med DGU nr. og indtag for de borer ved Hedeland, hvor der udtaget prøver til kemiske og non-target analyser for sammenligning.

206.1121-1	206.1126-f	206.1660-2	206.1666-3	206.2108-1	207.3915-1
206.1121-2	206.1133-1	206.1660-3	206.1672-1	206.2108-2	207.3915-2
206.1122-f	206.1364	206.1666-1	206.1672-2	207.3880-1	207.3915-3
206.1125-1	206.1660-1	206.1666-2	206.1672-3	207.3880-2	

Bemærk at borerne kan have flere indtag (nummereret på som "-1", "-2" og "-3") fra flere boringsdybder.

2.3 Non-target analyser Hedeland

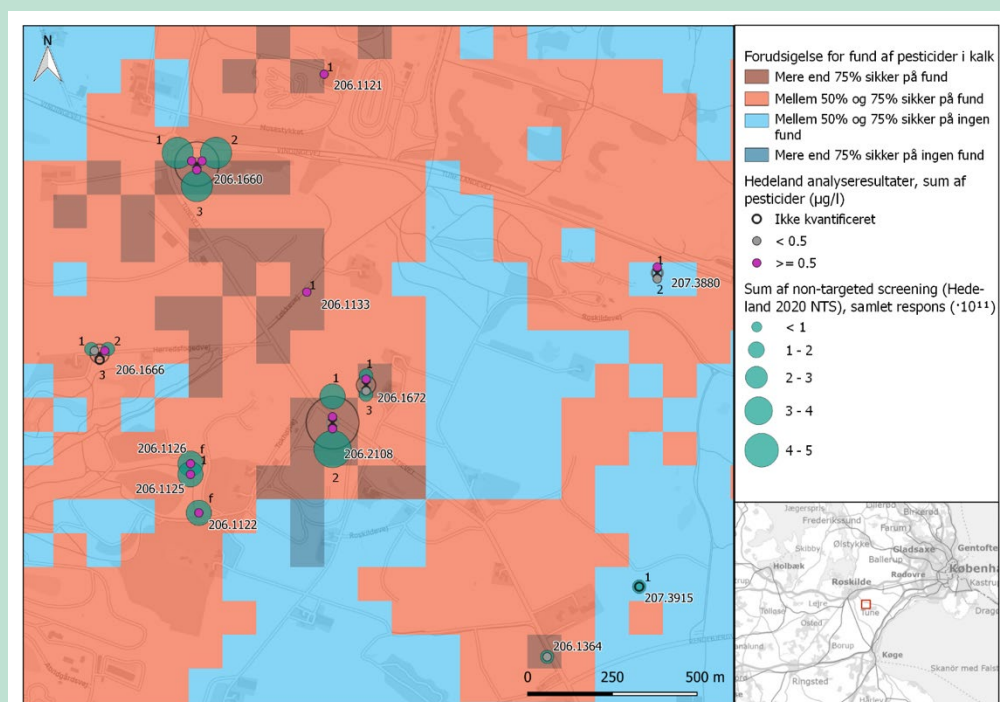
Aarhus Universitet har ligeledes i samarbejde med Region Sjælland i 2020 udtaget analyser fra borerne i Hedeland på samme tidspunkt.

NTS analyserne viste spor fra mere end 3000 forskellige stoffer, og det er pt. muligt at annotere ca. 10% af stofferne, såsom N,N-diethyl-meta-toluamid (DEET), diphenylamin, chlorendinsyre, trisulfuron-methyl og tris(2-butoxyethyl)phosphat.

Det samlede NTS analyse-respons, fra kendte og ukendte molekyler, er brugt som input til pesticidsårbarhedsværktøjet

2.4 Metodebeskrivelse af datasammenligningen

Dokumentation og metodebeskrivelse vedr. databehandling, GIS analyse, og anvendt kortmateriale, findes i Bilag 1. Sammenstilling af kemisk (målrettede) analyseresultater, NTS analyseresultater og pesticidsårbarhedsværktøj, ses på Figur 1. Kortet fremgår ligeledes i Bilag 2.



FIGUR 1. Oversigtskort for Hedeland, med sammenstilling af resultater fra hhv. målrettet kemisk analyse (angivet som 'ikke kvantificeret', 'under 0,5 µg/L' og 'over 0,5 µg/L'), NTS analyser (samlet respons) og baggrundskort fra pesticidsårbarhedsværktøjet. Boringerne kan have flere indtag (nummereret på kortet som 1, 2 og 3) fra flere boreringsdybder.

3. Fase 2 — GRUMO

Fase 2 omfatter sammenstilling af:

- > 11 nye NTS analyser udtaget i GRUMO borer i ultimo 2021
- > GRUMO-analyser ved alm. overvågningsprogram og massescreening
- > COWI-værktøj til forudsigelse af pesticidesårbarhed

3.1 GRUMO vandanalyser

I forbindelse med gennemførelse af det almindelige MST GRUMO overvågningsprogram, samt Miljøstyrelsens Massescreeningsprogram er der udtaget målrettede kemiske analyser i en lang række GRUMO-boringer. For 11 af disse boringer er der endvidere udtaget vandprøver til NTS analyse. De udvalgte boringer fremgår af Tabel 2.

Tabel 2. Oversigt med DGU nr. og indtag for de GRUMO boringer, hvor der udtaget målrettet og NTS analyser til sammenligning.

214.447-1	218.2224-1	218.1920-1	221.1318-2
220.742-1	218.995-2	218.993-1	216.693-3
215.1199-1	218.987-2	218.991-1	

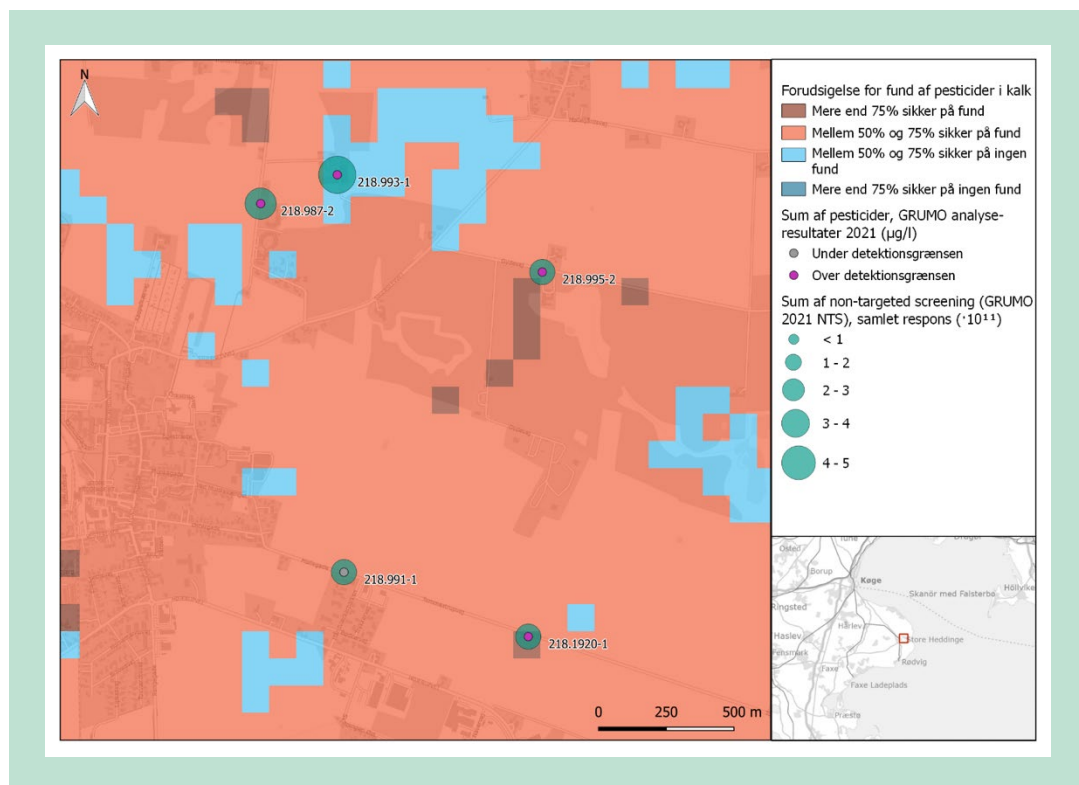
3.2 Non-target analyser i GRUMO boringer

NTS dataanalysen viste, at der er mere end 5000 forskellige stoffer i grundvandsprøverne. De identificerede stoffer inkluderer PPG og PEG polymerer, phtalater, BAM, icaridin, atrazin, ter-bucarb, dinoterb, koffein, og også naturlige metabolitter som steroid østrogener og fedtsyrer. Suspect analysen for PFAS-forbindelser viste endvidere spor af PFOA, forgrenet PFOA, samt PFOS.

3.3 Sammenstilling af analyseresultater og pesticidsårbarhedsværktøj

Dokumentation og metodebeskrivelse vedr. databehandling, GIS analyse, og anvendt kortmateriale, findes i Bilag 1.

På Figur 2 er vist eksempel på sammenstilling af GRUMO-resultater, NTS resultater og pesticidsårbarhedsværktøj. Det samlede kortmateriale for sammenstilling af resultater fra GRUMO-boringer og pesticidsårbarheds-værktøj, findes i Bilag 3.



FIGUR 2. Kortudsnit af fem GRUMO-boringer hvor der er udtaget vandprøver til hhv. målrettet og NTS analyser. Baggrundskort fra pesticidsårbarhedsværktøjet.

4. Resultater

I fase 1 og 2 er der kigget overordnet på sammenfald mellem hhv. målrettet og NTS analyser, og på hvorledes der er overensstemmelse mellem pesticidfund, og pesticidesårbarhedsværktøjets forudsigelse i den pågældende område, hvor boringen er beliggende.

4.1 Fase 1 — Hedeland

Sammenstilling af målrettet og NTS analyser i de udvalgte boringer ved Hedeland fremgår af oversigtskort Figur 1.

Det ses at der i de målrettede analyser, er fundet pesticider med en total-koncentration over 0,5 µg/l, i 13 ud af 23 indtag. Der er resultater for NTS analysen i ni af disse 13 boringer.

NTS analyseresultater er vist som sum af respons signal i en given prøve. Respons kan ikke tolkes som et udtryk for høj/lav koncentration af et stof. Respons repræsenterer desuden både pesticider og nedbrydningsprodukter, andre miljøfremmede stoffer, samt naturlige stoffer. En høj værdi kan skyldes at der er mange stoffer der tilsammen giver et højt signal (respons) eller at få stoffer der hver især giver meget høje respons. Ligeledes kan en lav værdi betyde at der er få eller ingen stoffer, eller at stofferne i sig selv giver et lavt respons.

Derfor er det vanskeligt at direkte sammenligne fund med de målrettede analyser, med NTS analysernes respons. Dog kan det ud fra kortet sammendrages, at der i de fem boringer med højeste respons (angivet som 3-4 og 4-5 på kort), DGU nr. 206.1660, 206.1672, 206.2108, 206.1126, 206.1125, 206.1122, ligeledes er fundet en pesticid sum-koncentration over 0,5 µg/l.

I forhold til pesticidesårbarhedsværktøjet ses det på kortet, at boringernes beliggenhed fordeler sig som opgjort i Tabel 3.

Tabel 3. Hedeland boringernes kategorisering i Pesticidsårbarhedsværktøjet. *) En prøve i 'Mørkerød' kategori (DGU nr. 206.1133) og en i 'Blå' (DGU nr. 207.3880) blev ikke analyseret med NTS.

Kategori	Antal boringer i kategorien	Heraf antal boringer med pesticidfund med sum konc. over 0,5 µg/l, i målrettet kemisk analyse	Heraf antal boringer med fund af syntetiske stoffer i NTS analyser
Mørkerød (mere end 75% sikkerhed for fund)	6	5	5*
Rød (ml. 50-75 % sikkerhed for fund)	4	4	4
Blå (ml. 50-75 % sikkerhed for ingen fund)	2	1	0*
Mørkeblå (mere end 75 % sikkerhed for ingen fund)	Ingen		

Ud fra sammenstillingen i tabellen kan det konkluderes, at der er overvejende sammenfald med, at der i de målrettede analyser er pesticidfund med en sumkoncentration over 0,5 µg/l i ni ud af de 10 borer, som ligger inden for rød og mørkerød. Dvs. de to kategorier, hvor der forudsiges at være hhv. 50-75 % og over 75% risiko for at være fund af pesticider i det pågældende magasin. I dette tilfælde er det kalk-magasinet, der er vist sandsynlighed for fund, da borerne er filtersat i kalk.

Sammenstilling med fund vha. NTS analysen, viser, at der er fundet syntetiske stoffer i alle otte analyserede borer inden for rød/mørkerød (to prøver var ikke mulig at analysere — 206.1121 og 206.1133).

4.2 Fase 2 — GRUMO

Sammenstilling af målrettet og NTS analyser i de prøvetagne GRUMO-borer fremgår af oversigtskortene i Bilag 3. Vedrørende specifikke grundvandsmagasiner: På hvert kort i fase 2, fremgår det øverst oppe i signaturforklaringen, hvilket grundvandsmagasin indtaget er filtersat i. I fase 2 er vandprøverne således udtaget i tre kvartære sandmagasiner, samt kalk magasin. Sandmagasinerne benævnes KS1, KS3 og KS4. Kalkmagasinet benævnes blot som 'kalk'. Magasinerne er defineret i DK-modellen (6).

Der er udtaget vandprøve til NTS analyse for 11 GRUMO-borer (ét indtag i hver boring). Borerne fremgår af Tabel 2.

Desuden er der i de pågældende borer foretaget målrettet analyser, både i forbindelse med MST massescreeningsprogrammet og alm. GRUMO overvågningsprogram. Resultater fra den seneste analyse fra begge typer analyserunder er medtaget samlet i datagrundlag for kortene i Bilag 3. Af kortene fremgår, at der fra de målrettede analyser i de 11 borer, er fundet pesticider over detektionsgrænsen i syv ud af 11 borer.

Oversigt over borer, kategorier og fund, ses i Tabel 4.

Tabel 4. GRUMO-boringernes kategorisering i Pesticidsårbarhedsværktøjet.

Kategori	Antal borer i kategorien	Heraf antal borer med pesticidfund med sum konc. over 0,5 µg/l, i målrettet analyser	Heraf antal borer med fund af syntetiske stoffer i NTS analyser
Mørkerød (mere end 75% sikkerhed for fund)	1	1	1
Rød (ml. 50-75 % sikkerhed for fund)	4	3	4
Blå (ml. 50-75 % sikkerhed for ingen fund)	5	3	5
Mørkeblå (mere end 75 % sikkerhed for ingen fund)	1	0	1

Ud fra Tabel 4 kan det konkluderes, at der for borer beliggende i de to 'røde' kategorier, er fundet pesticider i 4 ud af de 5 borer, ved målrettede analyser. Dette stemmer overvejende overens med forudsigelsen om, at der er høj sandsynlighed for at finde pesticider.

I borer i 'blå' kategori bør der ud fra pesticidesårbarhedsværktøjet, være hhv. 50-75 og over 75% sandsynlighed for ikke at finde pesticider. Der er seks borer beliggende i 'blå' kategori, og der er fundet pesticider i tre af dem, i de målrettede analyser.

NTS analyseresultaterne er vist som total-respons på kortene, kategoriseret i respons, på samme måde som kortet fra fase 1. Respons i ligger på 4-5 for to borer, på 3-4 for fire borer, og på 2-3 for fire borer. Dvs. samlet respons ligger forholdsvis højt for alle analyse-rede borer. Da NTS resultaterne ikke er filtreret for naturlige baggrundsstoffer, som f.eks. mikrobielle fedtsyre metabolitter, vurderes at det samlede NTS respons ikke kan bruges som input til pesticidesårbarhedsværktøjet. NTS analysen viser, at der er fund af syntetiske stoffer i samtlige borer (Tabel 4), dvs. stoffer som de målrettede kemiske analyser ikke finder.

Ud fra dette vurderes der at være gode muligheder for, at analysedata kan anvendes til at træne maskinlæringsværktøjet med en ny og større datamængde, da dette vil bidrage til at pesticidesårbarhedsværktøjet forbedres.

Datamængden i dette konkrete projekt er dog meget begrænset, hvilket også betyder at data alene herfra, ville udgøre et meget begrænset input til maskinlæringen. En mulighed ville være at bruge filtreret NTS (for pesticider) eller suspect screening data på en større andel GRUMO-borer. Her ville det være relevant at samle en større datamængde, som geografisk dækkede hele Danmark, eller store dele heraf, og som indeholdt så bredt antal analyseresultater for pesticider som muligt.

5. Konklusion og perspektivering

Dette arbejde viser, at der er god overensstemmelse mellem målrettede kemiske analyser og pesticidesårbarhedsværktøjet risikoforudsigelser for at finde pesticider eller nedbrydningsprodukter i et givent grundvandsmagasin. NTS analyserne kan bidrage med værdifuld viden, og finder typisk flere pesticider og andre miljøfarlige forurenende stoffer (MFS) end hvad der findes ved de målrettede analyser. Hypotesen om at bruge NTS total respons (inden filtrering) har ikke god overensstemmelse med risikoforudsigelserne, og afvises.

Den anvendte datamængde i dette studie har dog været begrænset (grundet økonomiske begrænsninger). Arbejdet viser indledningsvist, at maskinlæringsværktøjet kan forbedres i forhold til at forudsige risikoen for at finde pesticider eller nedbrydningsprodukter i et givent grundvandsmagasin. Ved at træne maskinlæringsværktøjet med NTS eller suspect screening data på en større andel GRUMO-boringer, vil man kunne inddrage pesticider, MFS, m.fl. i risikoforudsigelserne.

Pesticidsårbarhedsværktøjet er frit tilgængeligt og klar til brug. Værktøjet blev færdigudviklet i 2019, men kan løbende forbedres, ved at algoritmen trænes med nye analysedatasæt. Træning med NTS analysedata kræver som beskrevet mere udviklingsarbejde, men er en oplagt fremtidig mulighed for at videreudvikle værktøjet.

Der er ligeledes perspektiver for andre stofgrupper end pesticider: Der er interessante og meget relevante muligheder i at kigge på eksempelvis PFAS-stoffer, i forhold til NTS analyser, og ligeledes i forhold til muligheden for at udvikle algoritme i maskinlæringsværktøjet, så det kan forudsige fund af PFAS i grundvandet.

6. Referencer

- 1 Aarhus Universitet og COWI (2021), Projektoplæg under Miljøstyrelsens Teknologiudviklingspulje, 1. maj 2021. *Udvidelse af værktøj til vurdering af pesticidesårbarhed med non-target screening analyse*. Ansøgning om tilskud, maj 2021.
- 2 COWI A/S (2018-20): Værktøj til vurdering af grundvandets pesticidesårbarhed. Interaktivt kortværktøj og dokumentation, tilgås online: [Værktøj til vurdering af grundvandets pesticidesårbarhed \(cowi.com\)](https://www.cowi.com/vaerktoej-til-vurdering-af-grundvandets-pesticidesaarbarhed).
- 3 Gravert, T., Vuaille, J., Magid, J. & Hansen, M. (2021) Non-target analysis of organic waste amended agricultural soils: Characterization of added organic pollution. *Chemosphere* 130582.
- 4 Miljøministeriet, Miljøstyrelsen (2021): Teknologiprogrammet for jord- og grundvandsforurening. Tilskud til projektet: *Udvidelse af værktøj til vurdering af pesticidesårbarhed med non-target screening analyse*. Tilsagnsbrev, august 2021.
- 5 Levin, G., Iosub, C.-I. & Jepsen, M.R. (2017). Basemap02. Technical documentation of a model for elaboration of a land-use and land-cover map for Denmark. Aarhus University, DCE – Danish Centre for Environment and Energy, No. 95.
- 6 Danmarks- og Grønlands Geologiske Undersøgelser (GEUS)(2019): National Vandresource Model. <https://vandmodel.dk/>.

Bilag 1. Metodebeskrivelse – dokumentation for databehandling og kort

Phase 1: Mapping results from Hedeland

Data was received from Aarhus University:

(1) 2019-2283 2020-11-20 Hedeland Analyser samlet inkl pesticider.xls

(2) HEDELAND_COMPLETE_DATASET_220404MAH.xlsx

Data from (1) (analysis results) was modified before being visualised:

- Wells without data were removed from the analysis.
- Wells with filters indicated to be in sand, Kerteminde-Mergel or clay till were removed from the analysis.

The sum of pesticides as given in row 251 for each intake was visualised using QGIS:

- Where the sum was 'i.k.' ('ikke kvantificeret' or 'not quantified'), the intake is visualised as an empty ring.
- The sum of pesticides is otherwise categorised as above or below 0.5 µg/l, with a pink or grey point symbol respectively.
- Intakes of the same well were visualised using point displacement to avoid overlapping. The well is represented as a cross symbol with each intake appearing as its own point on a ring encircling the well. Wells and intakes are labelled.
- Dataforsyningen's 'skærmkort' was used as the background.
- The raster layer showing pesticide vulnerability of the limestone layer, as produced by the machine learning tool developed previously, is included as a partially transparent layer.

Data from (2) (non-targeted screening) was also modified before being visualised:

- The positive and negative responses for all compounds were summed for each intake, resulting in one value for each intake.

These results were visualised using QGIS:

- The sum of non-targeted screening is visualised using 5 intervals of $1 \cdot 10^{11}$.
- Intakes of the same well are visualised using point displacement to avoid overlapping. The well is represented as a cross symbol with each intake appearing as its own point on a ring encircling the well. Wells and intakes are labelled.
- Dataforsyningen's 'skærmkort' was used as the background.
- The raster layer showing pesticide vulnerability of the limestone layer, as produced by the machine learning tool developed previously, was included as a partially transparent layer.

Selecting wells for new analysis phase

Miljøstyrelsen was in the process of sampling GRUMO well intakes and provided a list of those that were yet to be sampled. Only those in Sjælland or Storstrøm were considered.

The aquifer corresponding to the screen of each intake in the list was found using MIKE-SHE and the DK-model. The borehole coordinates were used for the position, and the interval between the screen top and bottom were compared to the geology at that location in the DK-model to determine the aquifer in which the screen is installed.

Screens were found to be installed in the aquifers KS1, KS2, KS3 and limestone. The locations of wells in each of these groups were compared with the machine learning output raster layer for the corresponding aquifer.

12 intakes were chosen for analysis, aiming for samples from different aquifers and different predictions from the machine learning tool. Intakes were prioritised if pesticides were predicted in that location and layer by the machine learning tool. The following tables show the distribution of intakes with regards to aquifer and machine learning tool prediction.

Table 1-1 Intakes chosen for analysis, distributed on aquifers.

Aquifer	Number of intakes selected
KS1	1
KS2	1
KS3	3
Limestone	7

Table 1-2 Intakes chose for analysis, distributed on the tool prediction category.

Machine learning tool prediction	Number of intakes
More than 75% certain of no detection of pesticides	5
Between 50% and 75% certain of no detection of pesticides	3
Between 50% and 75% certain of detection of pesticides	3
More than 75% certain of detection of pesticides	1

Data was not received for all wells due to issues such as lost samples or breakage during transport.

Phase 2: Mapping results from GRUMO 2021

Data was extracted from the Jupiter database:

(3) Jupiter kemi - GRUMO boringer v3.xlsx

Data was also received from Aarhus University:

(4) 22AINTS01_GRUMO_LC_NEG_noGaps_220402MAH.xlsx

(5) 22AINTS01_GRUMO_LC_POS_noGaps_220402MAH.xlsx

Data for (3), groundwater chemistry analysis results for all the wells selected in 1.2, were extracted for compounds in the following compound groups as directed by Martin Hansen, AU:

- Lægemidler og beslægtede stoffer
- Naturlige organiske stoffer og toksiner
- Organisk mikroforurening
- Perfluorerede stoffer
- Pesticider, nedbrydningsprodukter og beslægtede stoffer

The newest analysis result was taken for each compound, provided it was taken in the last year or two. MST sent a dataset separately, which was added to the Jupiter database at a later date, and this data is also included.

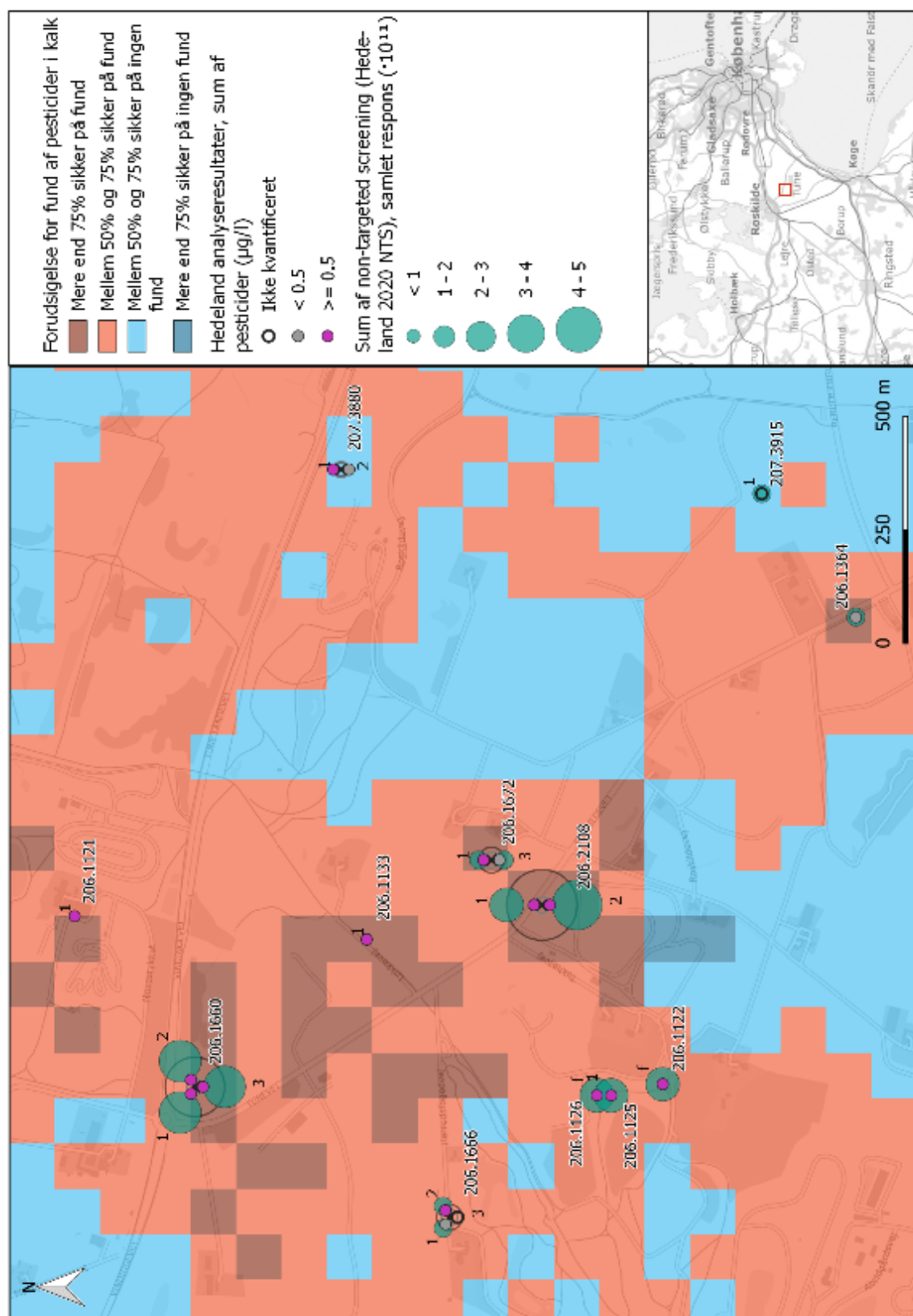
All analysis amounts over the detection limit were summed for each well intake, and this sum was visualised in QGIS:

- Where a well has only results that are under the detection limit, a grey circle is used as the symbol at the well location.
- Where a well has at least one result over the detection limit, the intake is represented by a pink circle.
- Only one intake per well was sampled, so there are no issues with overlapping. The wells and intakes are labelled.
- Dataforsyningen's 'skærmkort' was used as the background.
- The raster layer showing pesticide vulnerability of the limestone layer, as produced by the machine learning tool developed previously, is included as a partially transparent layer.

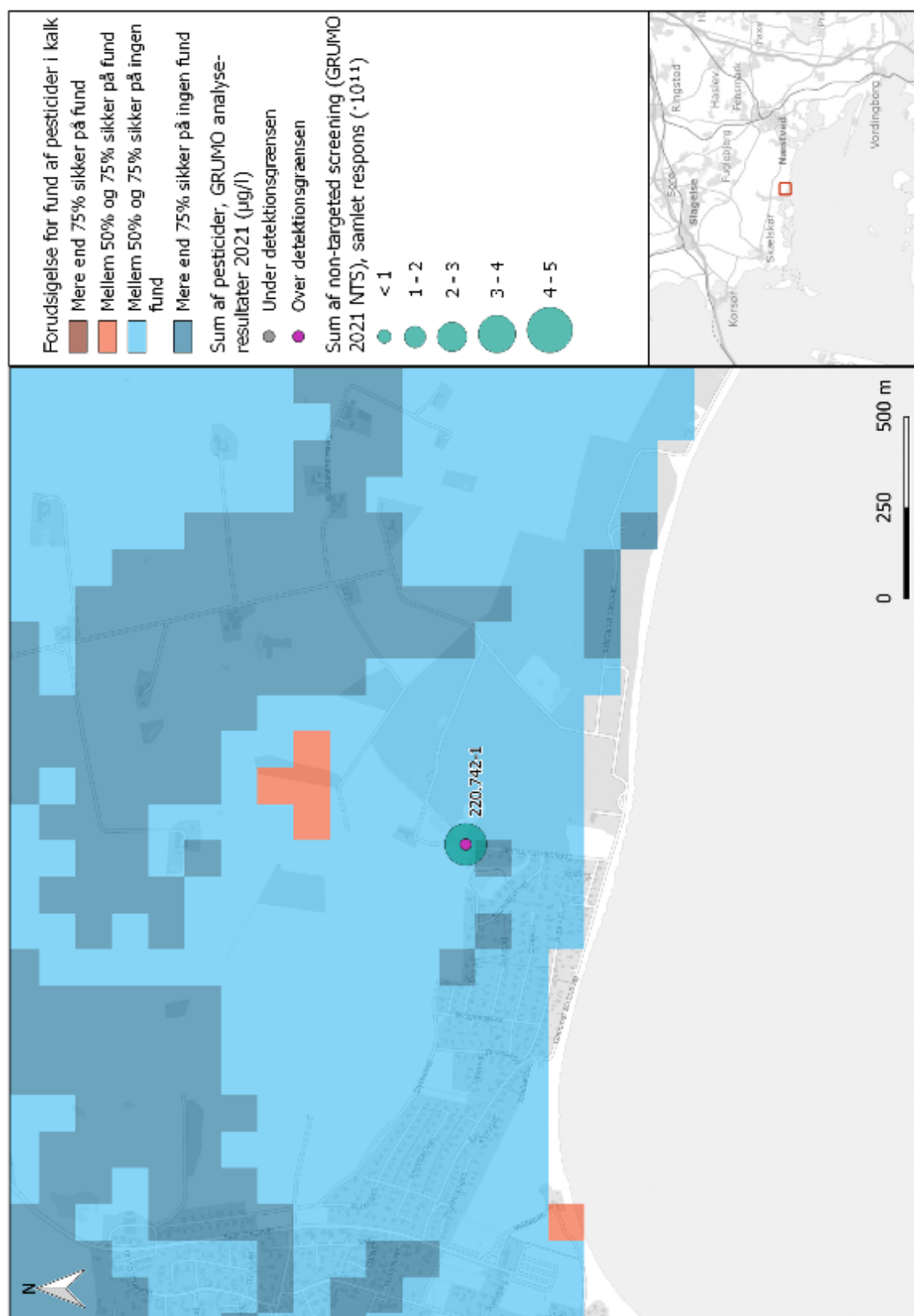
The data (4) and (5) (non-targeted screening) was collated in a single file. The responses, both negative and positive, were summed to obtain a total response for each intake, which were visualised using QGIS:

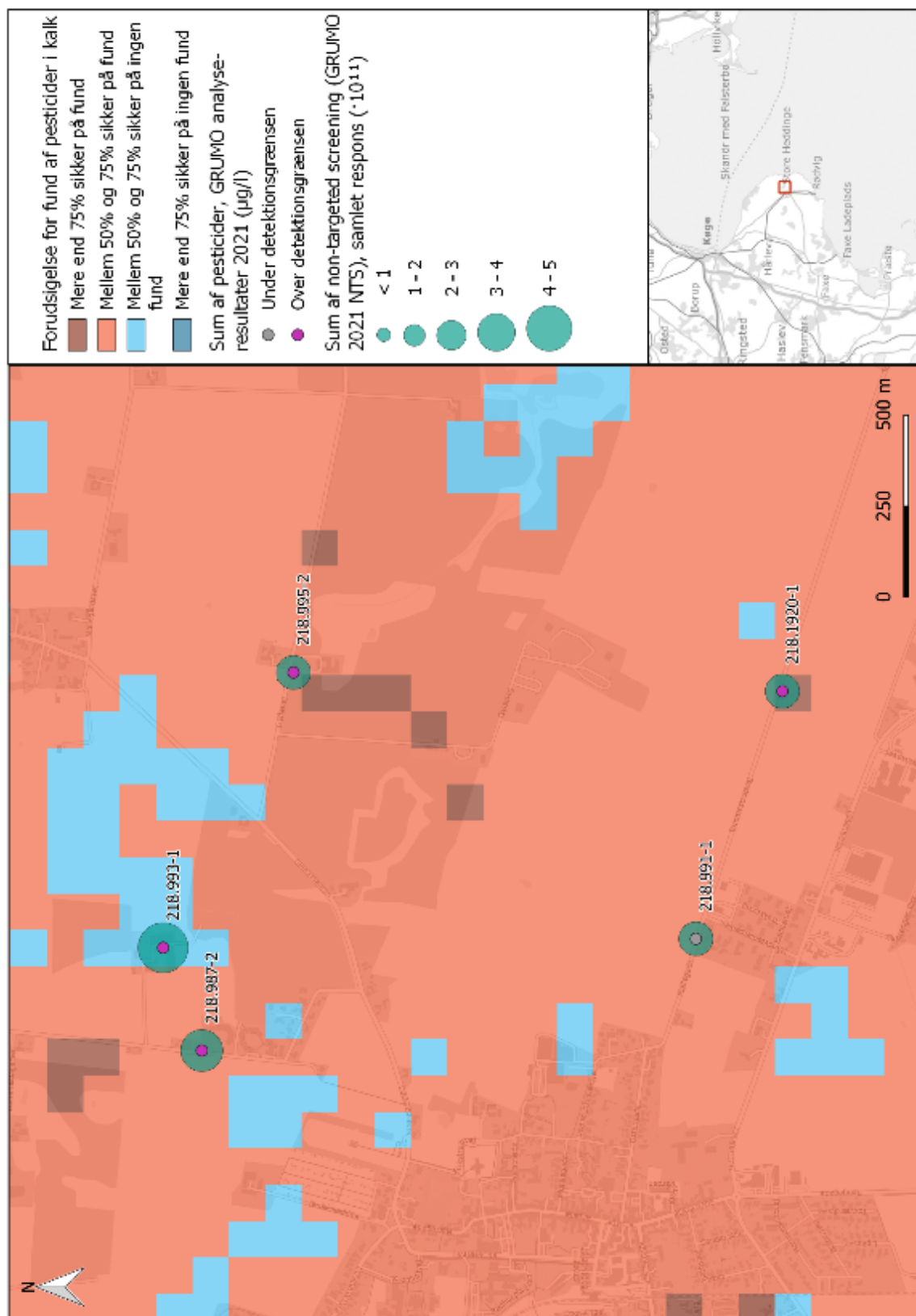
- The sum of non-targeted screening is visualised using 5 intervals of $1 \cdot 10^{11}$.
- Only one intake per well was sampled, so there are no issues with overlapping. The wells and intakes are labelled.
- Dataforsyningen's 'skærmkort' was used as the background.
- The raster layer showing pesticide vulnerability of the limestone layer, as produced by the machine learning tool developed previously, was included as a partially transparent layer.

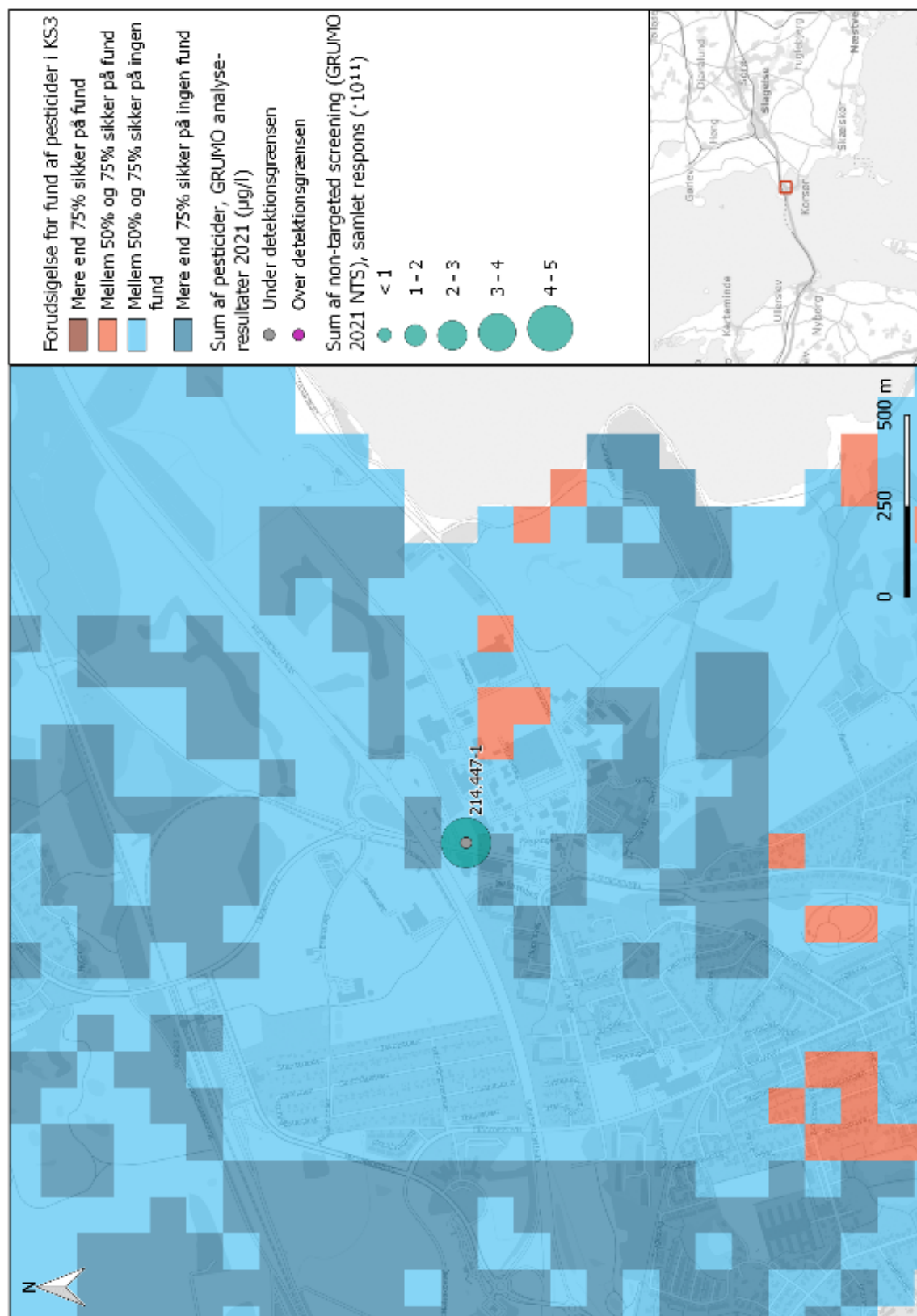
Bilag 2. Kortmateriale for fase 1

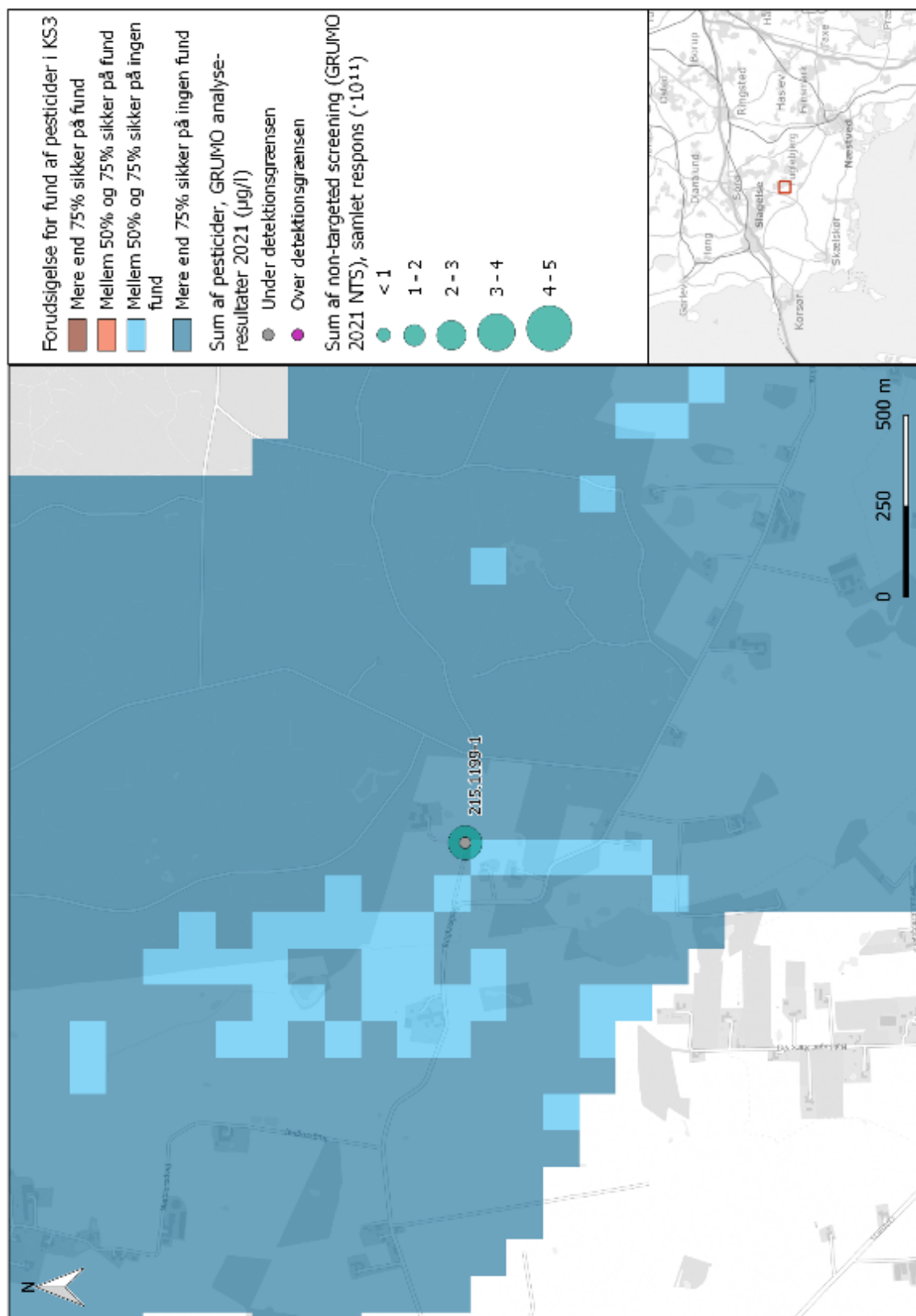


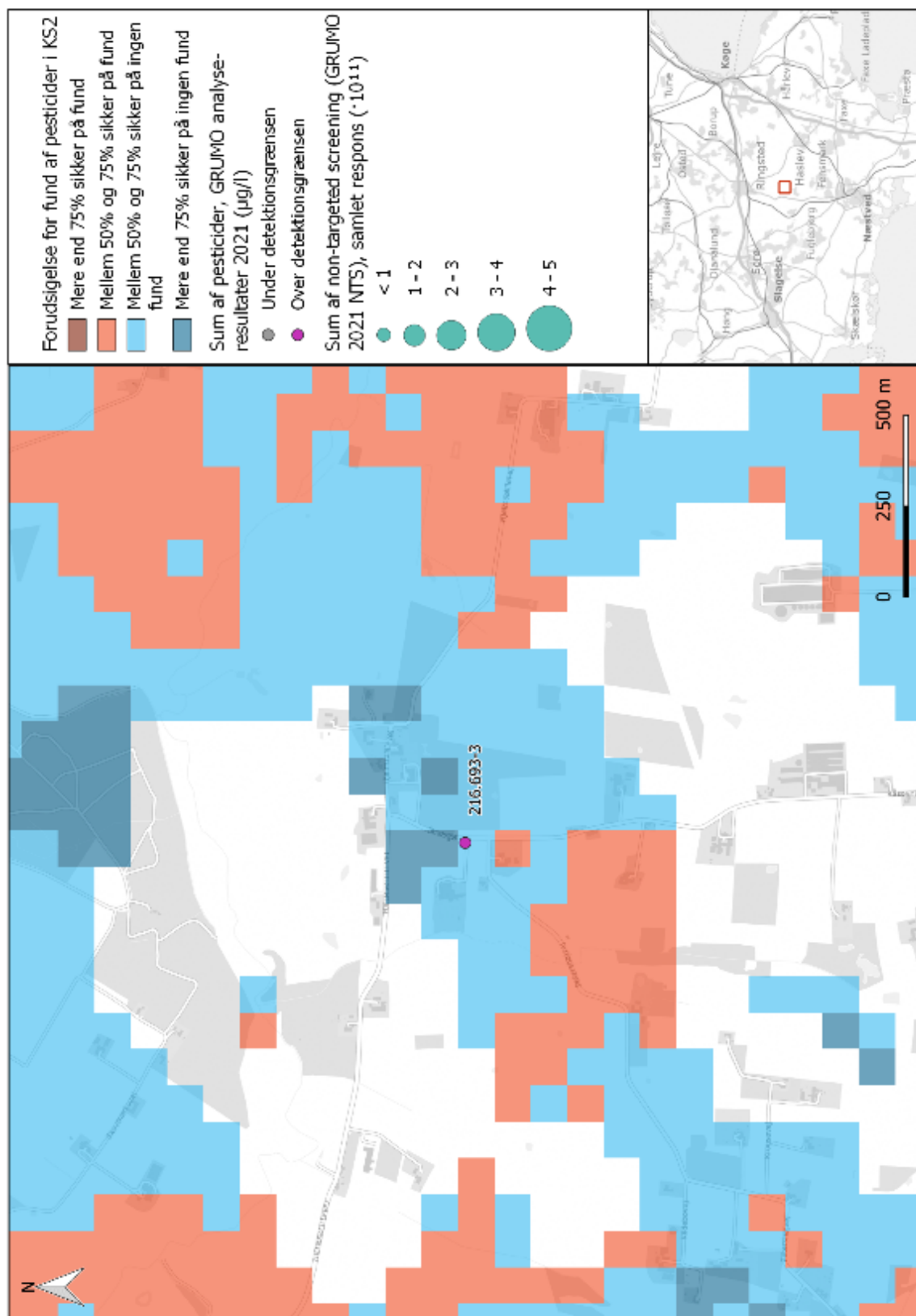
Bilag 3. Kortmateriale for fase 2











Udvidelse af værktøj til vurdering af pesticidsårbarhed med non-target analyser

Projektet blev udført i to faser, med start i september 2021 og afslutning i juni 2022. Første fase omhandlede et casestudie for området Hedeland ved Roskilde. Region Sjælland har bidraget med data fra kemiske analyser for en række grundvandsmoniteringsboringer i Hedelandområdet og Aarhus Universitet har analyseret de samme boringer med en holistisk non-target screening (NTS) metode. Disse resultater blev sammenstillet med COWIs 'Værktøj til vurdering af grundvandets pesticidsårbarhed'. Værktøjet er et machine learning baseret kortværktøj, der bygger på en algoritme, som er trænet med en række datasæt.

Ved sammenstillingen var der overvejende sammenfald mellem pesticidfund og værktøjets forudsigelser for risiko for fund. Samtidig viste sammenstillingen, at der er grundlag for yderligere optimering af værktøjets algoritme og dermed forbedre risikoforudsigelserne for forurening med pesticider i den givne geologi.

Projektets fase 2 omfattede udtagning af nye vandprøver i 11 GRUMO-boringer, hvor Aarhus Universitet har analyseret prøverne med non-target analyse. Non-target analyse-resultaterne blev sammenholdt dels med Miljøstyrelsens GRUMO analyseresultater og dels med massescreeningsresultater. Alle analyseresultater blev desuden sammenholdt med COWIs sårbarhedsværktøj. Her blev ligeledes foretaget en sammenligning og optælling af, om pesticidfund med kemisk og non-target analyser ligger i områder, hvor der er vurderet høj risiko for at finde pesticider.

Det konkluderes, at både kemisk analyse og non-target analysedata vil kunne benyttes som input til at træne pesticidsårbarhedsværktøjet yderligere. Der er grundlag for yderligere udviklingsarbejde, således at NTS-data kan indgå som vidensgrundlag ift. hvor man kan forvente at finde pesticider i grundvandet.



Miljøstyrelsen
Tolderlundsvej 5
5000 Odense C

www.mst.dk