



Miljøministeriet
Miljøstyrelsen

Flerdimensional modellering af vandstrømning og stoftransport i de øverste 1-2m af jorden i systemer med markdræn

Bekæmpelsesmiddelforskning fra
Miljøstyrelsen nr. 138, 2012

Titel:

Flerdimensional modellering af vandstrømning og stoftransport i de øverste 1-2m af jorden i systemer med markdræn

Redaktion:

Søren Hansen¹, Carsten T. Petersen¹, Mikkel Møllerup¹, Per Abrahamsen¹, Birgitte Gjettermann¹, Marie Habekost Nielsen¹, Merete Styczen¹, Robert Poulsen², Jens Kristian Lørup², Keiko Yamagata² og Michael Butts²

¹ Institut for Grundvidenskab og Miljø, Københavns Universitet

² DHI

Udgiver:

Miljøstyrelsen
Strandgade 29
1401 København K
www.mst.dk

Foto:**Illustration:****År:**

2012

Kort:**ISBN nr.**

978-87-92779-52-6

Ansvarsfraskrivelse:

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.

Må citeres med kildeangivelse.

Indhold

FORORD	5
SAMMENFATNING	7
SUMMARY	11
1 INDLEDNING	15
2 BAGGRUND OG FORMÅL	17
2.1 OVERORDNET FORMÅL	17
2.2 AFGRÆNSNING	17
2.3 BESKRIVELSE AF STRØMVEJE OG MEKANISMER	18
2.3.1 Strømning i makroporer	19
2.3.2 Transportveje for kolloider og stærkt adsorberende stoffer	21
2.4 DAISY	22
2.4.1 Det bioklimatiske modul	22
2.4.2 Vegetationsmodulet	23
2.4.3 Jordmodulet	23
3 FELTFORSØG	25
3.1 LOKALITETEN	25
3.2 METODER OG MATERIALER	26
3.2.1 Vanding, sporstof og bioporetælling	26
3.2.2 Jordprøver og analyser	29
3.2.3 Genfindning af partikler (MS)	30
3.2.4 Måling af bromid og Brilliant Blue	31
3.3 RESULTAT OG DISKUSSION FRA SPORSTOFFSFORSØGENE	31
3.3.1 Farvede bioporer og andre præferentielle strømningsveje	31
3.3.2 Modelkoncept	36
3.3.3 Sporstofskoncentrationer	36
4 MODELBESKRIVELSE AF DAISY2D	43
4.1 GRUNDLÆGGENDE MODELKONCEPTER	43
4.2 2D VANDTRANSPORT	43
4.2.1 Transport i matrix	43
4.2.2 Transport i sprækkesystemet	46
4.2.3 Transport i makroporesystemet	47
4.3 2D STOFTRANSPORT	48
4.3.1 Transport i matrix	48
4.3.2 Transport i sprækkesystemet	49
4.3.3 Transport i makroporesystemet	50
4.4 KOLLOIDER	50
4.4.1 Generering af kolloider	50
4.4.2 Transport af kolloider	51
4.4.3 Filtrering af kolloider	51
4.4.4 Kolloid-faciliteret transport	51
4.5 2D VARMETRANSPORT	52
4.6 KODELUDVIKLING	53
4.6.1 Datalogiske principper for modeludvikling	53
4.6.2 Daisy2D redesign	55
4.6.3 Numeriske metoder	55

4.6.4	Kobling af Daisy2D og MIKE SHE	56
5	MODELOPSÆTNING OG PARAMETERISERING	61
5.1	VEJR	61
5.2	LANDBRUGSMÆSSIG DRIFT	61
5.3	PARAMETERISERING AF JORDEN	62
5.3.1	<i>Matrixsystem</i>	64
5.3.2	<i>Sprækkesystem</i>	67
5.3.3	<i>Makroporer</i>	67
5.4	PARAMETRISERING AF PESTICIDER	68
6	MODELTEST	69
6.1	RØRRENDEGAARD	69
6.2	VAP	78
6.2.1	<i>Estrup</i>	79
6.2.2	<i>Silstrup</i>	82
7	SCENARIEANALYSER	89
7.1	ANALYSE AF VAP-SIMULERINGERNE	89
7.2	FOCUSBEREGNINGER	94
7.2.1	<i>Opsætning</i>	95
7.2.2	<i>Resultater</i>	96
7.2.3	<i>Diskussion</i>	99
7.3	SAMMENLIGNING PÅ OPLANDSDATA	100
7.3.1	<i>Modellering af vandstrømning i Lillebæk opland med MIKE SHE</i>	101
7.3.2	<i>Opsætning af MIKE SHE-Daisy for vandstrømning</i>	109
7.3.3	<i>Resultater fra MIKE SHE - Daisy</i>	115
7.3.4	<i>Opsætning af MIKE SHE-Daisy for pesticider</i>	123
7.4	SAMMENFATTENDE DISKUSSION	132
8	KONKLUSION	137
9	PERSPEKTIVERING	141
10	REFERENCER	143

Bilag A Daisy 2D simulation of Rørrendegård

Bilag B Daisy 2D simulation of Silstrup and Estrup

Forord

Projektet "Flerdimensional modellering af vandstrømning og stoftransport i de øverste 1-2 m af jorden i systemer med markdræn" er finansieret af Miljøstyrelsens program for Bekæmpelsesmiddelforskning. Projektet er udført ved Københavns Universitet (Institut for Grundvidenskab og Miljø) i samarbejde med DHI.

Projektet har været fulgt af en følgegruppe med følgende sammensætning:

- Dean Jacobsen, Københavns Universitet
- Jørgen Jakobsen
- Jørn Kirkegaard, Miljøstyrelsen
- Hans Roust Thysen, Videncentret for Landbrug
- Hans-Jørgen Albrechtsen, Danmarks Tekniske Universitet
- Niels Lindemark, Dansk Planteværn
- Peter Wiberg-Larsen, Aarhus Universitet
- Walter Brüsck, GEUS
- Anne Louise Gimsing, Miljøstyrelsen
- Rasmus Søgaard, Miljøstyrelsen
- Peter Jørgensen

Vi vil gerne takke følgegruppens medlemmer for deres engagement og konstruktive input gennem projektperioden. DJF, Aarhus Universitet og GEUS har stillet observationer fra VAP-programmet til rådighed. Endelig vil vi takke Vibeke Ernstsén, GEUS for samarbejde vedrørende de eksperimentelle undersøgelser på Rørrendegård.

Søren Hansen, Carsten T. Petersen, Mikkel Møllerup, Per Abrahamsen, Birgitte Gjettermann, Marie Habekost Nielsen, Merete Styczen, Robert Poulsen, Jens Kristian Lørup, Keiko Yamagata og Michael Butts.

Sammenfatning

Baggrund og introduktion

Beskyttelse af drikkevandet eller "grundvandet" i en større, men ikke nærmere defineret dybde er et hovedsigte for den administrative regulering af pesticidanvendelsen. I forbindelse med tidlig varsling og vurdering af risikoen for forurening af grundvandet med pesticider, har man i Danmark valgt at fokusere på det øverste grundvand. Bl.a. på denne baggrund blev Varslingssystem for Udvaskning af Pesticider til Grundvand (VAP) initieret i 1999.

Drænvand udgør i mange systemer en del af det øverste grundvand. Markdræn er etableret på rundt regnet halvdelen af Danmarks landbrugsareal. Med dræning bliver vand- og stoftransport i de øverste meter af jordprofilen typisk til en flerdimensional problemstilling. Det er forholdsvis let at udtage repræsentative prøver af drænvandet (DV) og derigennem måle stoffluxe i drænene, hvorimod det er meget vanskeligt at opnå repræsentative prøver af den del af tilstrømningen til grundvandet, som går uden om drænene (UV). I relation til drikkevandsbeskyttelse har man især interesse i at kende udvaskningen af forskellige stoffer med UV, men man kan i realiteten kun måle udvaskningen med DV.

Mange måleprogrammer, herunder eksempelvis VAP-programmet, har hidtil især været fokuseret på måling og præsentation af stoffluxe i DV. Målingerne i DV er typisk foretaget i ca. 1 m dybde, dvs. inden for det område af jorden, hvor man typisk finder såvel regnormegange som rodkanaler efter almindelige landbrugsafgrøder ("bioporedomænet"). For at fortolke disse målinger er der generelt brug for en flerdimensional, mekanisme-tro model til beskrivelse af vand- og stoftransport, som kan differentiere mellem DV og UV, og som kan bruges i forbindelse med analyse og fortolkning af målte stoffluxe i drænvandet samt i andre dele af det øvre grundvand.

Modeludvikling.

Der er taget udgangspunkt i den eksisterende markmodel Daisy, som herhjemme tidligere især har været brugt til beregning af kvælstofudvaskning. I det nærværende projekt er der fokuseret på tre nye aspekter, præferentielstrømning i bioporedomænet, kolloider og kolloidfaciliteret transport, samt lateral strømning i matrix domænet.

Til støtte for udvikling af en ny model for præferentielstrømning i bioporedomænet blev der udført et feltforsøg. Der blev lavet tre store udgravninger på KU-LIFE's forsøgsmark i Tastrup på tværs af dræn. I forbindelse med forsøget blev bioporerne optalt og kategoriseret. Derudover blev deres forbindelse med resten af jordsystemet afdækket ved hjælp af sporstofforsøg. På baggrund af dette forsøg og tidligere erfaringer blev der implementet en bioporemodel, hvor bioporerne blev opdelt i klasser efter start og slutdybde, diameter, afstand til dræn, samt oplysning om direkte forbindelse til dræn.

Kolloidmodulet er baseret på tilsvarende funktionalitet i MACRO modellen, generaliseret så enkelte delmodeller kan udskiftes. Kolloidfaciliteret transport

blev baseret på en dynamisk ligevægtsbetragtning mellem opløst pesticid, pesticid bundet til kolloider, samt pesticid bundet i jordmatricen. Beregning af lateral transport i matrix domænet blev gennemført ved at omskrive de basale ligninger (og tilhørende strukturelle understøttelse) i Daisy til 2 dimensioner, specifikt Richards ligning for vandtransport og konvektion-dispersion ligningen for stoftransport. De gamle 1D ligninger kan dog stadig bruges i mindre komplekse Daisy-beregninger.

Modellen er blevet testet på tre datasæt, den nævnte forsøgsmark i Tåstrup (særlig kolloiddata), samt to VAP marker, Silstrup og Estrup (særlig pesticiddata). I alle tre tilfælde var det nødvendigt at kalibrere modellen. For Tåstrup så vi, at vi kunne ramme dynamikken for kolloidudvaskningen. For Silstrup og Estrup blev vi nødt til at indføre en simpel model for overfladetransport. Med den på plads kunne vi forklare hovedparten af pesticidudvaskningen.

Forvaltning og beskyttelse af grundvand foregår på oplandsskala. For at udvide anvendelsen af de nye proces-beskrivelser på markskala i Daisy til oplandsskala, kobled vi Daisy-modellen til en oplandsmodel, MIKE SHE. MIKE SHE kan beskrive grundvandsdynamikken i tid og rum på oplandsskala, og strømningsveje til recipienter via grundvand og igennem drænsystemet. Betydningen af transport af pesticider med strømning i dræne (DV) eller uden om dræne (UV) på koncentrationer i å-systemer og grundvand kan på den måde estimeres. En ny teknologi til model kobling, OpenMI, anvendes til at udvikle en dynamisk kobling mellem de to modeller. I dette arbejde foretager vi en "proof-of-concept" undersøgelse til både at evaluere resultaterne og den praktiske anvendelighed af den koblede model og dens evne til at beskrive pesticid transport på oplandsskala. Efter afprøvning af koden anvendte vi den koblede model til beregning af pesticidtransport i Lillebæk oplandet. Resultaterne synes lovende. Selv om den koblede model ikke reproducerer nøjagtig de feltmålinger i Lillebæk, viser disse første resultater at konceptet for opskalering kan bruges på oplandsskala, og de nye processer i Daisy på markskala har en tydelig effekt på pesticidtransport og koncentrationer på oplandsskala.

Scenarier og perspektiver.

En analyse af simuleringerne gav anledning til to hovedresultater:

- Det er af meget stor betydning for simuleringens resultater om nedadgående stoffluxe beregnes i en dybde, der er inden for bioporedomænet eller uden for dette domæne.
- Der er ingen simpel sammenhæng mellem drænvandskoncentrationer og koncentrationer i vand, der bevæger sig uden om dræne til grundvandet.

Ud fra simuleringerne finder vi, at den konceptuelle model af systemet, med særlig vægt på direkte forbundne bioporer og transport nær dræn, er en nødvendig forudsætning for en forståelse af de målte værdier for stærkt adsorberende pesticider i drænvand.

Vi sammenholdt resultaterne fra kørsler af Daisy på opsætninger der inddrager erfaringer fra de tre testmarker, med standardopsætninger af FOCUS scenarierne der bygger på MACRO. De viste god overensstemmelse mellem de to modeller for vand og svagt adsorberende stoffer, men

standardopsætninger gav betydeligt lavere dyb udvaskning end Daisy for stærkt adsorberende pesticider.

Med hensyn til VAP foreslår vi på baggrund af resultaterne i nærværende projekt at:

- Der lægges større vægt på pesticidkoncentrationer målt i horisontalt udbredte filtre uden for bioporedomænet end på målinger inden for bioporedomænet, når koncentrationer i perkolation til grundvand skal vurderes.
- Vandfluxe og pesticidkoncentrationer målt i drænvand anvendes sammen med målte pesticidkoncentrationer under bioporedomænet ved matematisk modellering af pesticidfluxe til grundvandet (gennemsnitskoncentrationer). Fluxene simuleres under bioporedomænet.

For selve modellen mener vi der er to steder der bør arbejdes videre med:

- Processerne på overfladen, der er beskrevet ad-hoc i den nuværende model.
- Modellen bør konfronteres med et større datamateriale, f.eks. det samlede VAP datasæt.

Afsluttende mener vi, at modellen og VAP sammen bør bruges til at udvikle et katalog over hændelser og omstændigheder, der i særlig grad bidrager til pesticidudvaskning. En sådan viden vil kunne anvendes i reguleringsammenhæng.

Summary

Background and introduction.

Protection of drinking water or "groundwater" in a large, but undefined depth is a major issue for the administrative regulation of pesticide use. In connection with early warning and assessment of the risk of groundwater contamination by pesticides, focus in Denmark has been on the upper groundwater. In the light of this, the Pesticide Leaching Assessment Programme (PLAP) was initiated in 1999.

Drainage water is in many systems part of the upper groundwater as drain pipes are established in roughly half of Denmark's farmland. By including drainage, water and nutrient transport becomes a multidimensional problem in the soil profile. It is relatively easy to obtain representative samples of drainage water (DW) and through those measure solutes in the drains, whereas it is very difficult to obtain representative samples of the water which is transported to the groundwater, bypassing the drains (BW). In relation to drinking water protection the leaching of various substances in BW is of particular interest, but one can in fact only measure leaching in DW.

PLAP has so far mainly focused on measuring pesticide flux in DW. Measurements of DW are obtained at a depth of approximately 1 m, i.e. within the zone where you typically find both earthworms and root canals (the biopore domain). To interpret these measurements, we need a multidimensional model that includes the important mechanisms which can describe water and solute transport. The model must be able to differentiate between DW and BW, which can be used in analysis and interpretation of measured solute flux in drainage water, and in other parts of the upper groundwater.

Model development.

The existing Daisy model, previously used for nitrogen leaching analysis, has been chosen as basis for the model development. The present project focuses on three new aspects: preferential flow in the biopore domain, colloids and colloid facilitated transport, and lateral flow in the matrix domain.

To support the development of a new model for preferential flow in the biopore domain, a field trial was conducted. Three major excavations at KU-LIFE's experimental field in Taastrup were made. Biopores were counted and categorized, and their links with the rest of the soil system was investigated through tracer experiments. Based on the findings in these experiments and prior experience, we implemented a biopore model where biopores were divided into classes depending on their start and end depth, diameter, distance to drainage and whether they had a direct connection to the drain or not.

The new colloid module is based on equivalent functionality in the MACRO model, generalized so that individual sub-models can be replaced. Colloid facilitated transport was based on a dynamic equilibrium between dissolved pesticides, pesticides bound to colloids and pesticides bound to the soil matrix.

Calculation of lateral transport in the matrix domain was achieved by rewriting the basic equations (and associated structural support) in Daisy in two dimensions, specifically Richard's equation for water transport and the advection-dispersion equation for solute transport. The previous 1D-equations can still be used for less complex Daisy calculations.

The model has been tested on three data sets, the experimental field in Taastrup (particularly for colloids) and the PLAP fields Silstrup and Estrup (particularly for pesticides). In all three cases the model had to be calibrated. At Taastrup we found that we could match the dynamics of colloid leaching. For Silstrup and Estrup we found that we had to introduce a simple model for surface transport. With this in place, we could explain the majority of pesticide leaching.

The management and protection of groundwater is carried out at the catchment scale. To extend the new Daisy model formulations from the field scale to the catchment scale, Daisy was coupled to the catchment modelling tool MIKE SHE. MIKE SHE is able to represent the groundwater dynamics in space and time at the catchment scale and the flow pathways to streams either via the groundwater flow or through the drain system. In this manner, the impact of the transport of pesticides with drain flow (DW) or by-passing the drain (BW) on concentrations in the streams and groundwater can be estimated. A new model coupling technology OpenMI was used to develop a dynamic coupling between the two models. In this study a proof-of-concept investigation is carried out to evaluate the performance and practicality of this coupled model approach and its ability to capture the pesticide fate and transport at the catchment scale. After initial testing of the code, we applied the coupled model to the application of pesticides in the Lillebæk catchment. These first results appear promising. Even though the coupled model is not able to exactly reproduce the field measurements in Lillebæk, these first results show that this concept for upscaling give plausible results at the catchment scale and the new field scale processes in Daisy have a direct impact on pesticide transport and concentrations at the catchment scale.

Scenarios and perspectives.

An analysis of the simulations gave rise to two main results:

- It is of great importance for the simulation results whether downward solute fluxes are calculated within or below the biopore domain.
- There is no simple correlation between concentration in drainage water and concentrations in the water that moves between the drains to the groundwater.

From the simulations we conclude that the conceptual model of the system, with special emphasis on directly connected biopores and transport near drains, is a necessary prerequisite for an understanding of the measured values of strongly adsorbing pesticides in drainage water.

We compared the results from Daisy simulations using setups based on lessons learned from the three test fields, with standard configurations of FOCUS scenarios (using the MACRO model). The results showed good agreement between the two models for water and weakly adsorbing substances, but the FOCUS configurations seriously underestimated deep leaching of strongly adsorbing pesticides compared to Daisy.

With regard to PLAP, we propose:

- A greater emphasis on pesticide concentrations measured in the horizontal filters outside the biopore domain, and less on measurements within the biopore domain, for evaluation of deep leaching.
- Water fluxes and pesticide concentrations measured in drainage water should be used together with measured pesticide concentrations below the biopore domain, and combined with a mathematical modeling for estimation of pesticide leaching to deep groundwater, below the biopore domain.

For the model itself, we propose:

- The surface processes should be further developed, with more permanent models replacing the ad-hoc descriptions in the current model.
- The model should be confronted with additional data material, for example from PLAP, for robustness.

In conclusion, we believe that the model and PLAP data should be used together in order to develop a catalog of events and circumstances which significantly contributes to pesticide leaching. Such knowledge is highly relevant to the regulation and administration of pesticide use.

1 Indledning

Beskyttelse af drikkevandet eller "grundvandet" i en større, men ikke nærmere defineret, dybde er et hovedsigte ved den administrative regulering af pesticidanvendelsen. I forbindelse med tidlig varsling og vurdering af risikoen for forurening af grundvandet med pesticider har man i Danmark valgt at fokusere på det øverste grundvand (f.eks. Kjær et al., 2009; Miljøstyrelsen, 1998). I drikkevandsudvalgets betænkning fra 1998 (Miljøstyrelsen, 1998, p. 122) står der således: "Disse grænseværdier (drikkevandsdirektivets grænseværdier, vores bemærkning) skal være opfyldt i ca. 1 m dybde svarende til umiddelbart under rodzonen, og eventuel yderligere nedbrydning, tilbageholdelse i jorden eller fortynding umiddelbart under rodzonen medtages således ikke i vurderingen". Bl.a. på denne baggrund blev Varslingssystem for Udvasning af Pesticider til Grundvand (VAP) initieret i 1998 (se www.pesticidvarsling.dk).

Drænvand udgør i mange systemer en del af det øverste grundvand. Markdræn er etableret på rundt regnet halvdelen af Danmarks landbrugsareal (Olesen, 2009) for at kompensere for dårlige naturlige afvandringsforhold, dvs. ringe hydraulisk ledningsevne og/eller afløbsmuligheder. Dræningen har i reglen en betydelig indflydelse på markens hydrologi og medfører, at overskudsnedbør hurtigt ledes bort fra arealerne, som herved bliver bedre egnede til dyrkning. Med dræning bliver vand- og stoftransport i de øverste meter af jordprofilen typisk til en flerdimensional problemstilling, hvor tidsfaktoren (specielt nedbørsdynamikken) sammenholdt med jordlagenes hydrauliske egenskaber og stoffernes nedbrydnings- og adsorptionsegenskaber får særlig stor betydning for udvaskningsrisikoen. Det er forholdsvis let at udtage repræsentative prøver af drænvandet (DV) og derigennem måle stoffluxe i drænene, hvorimod det er meget vanskeligt at opnå repræsentative prøver af den del af tilstrømningen til grundvandet, som går uden om drænene (UV). I relation til drikkevandsbeskyttelse har man især interesse i at kende udvaskningen af forskellige stoffer med UV, men man kan i realiteten kun måle udvaskningen med DV.

VAP-programmet har på lerjord hidtil været fokuseret på måling og afrapportering af pesticidfluxe i DV, men omfattende måling af pesticidkoncentrationer i andre overfladenære grundvandskomponenter indgår også. Målingerne i DV er foretaget i ca. 1 m dybde, dvs. inden for det område af jorden, hvor man typisk finder et højt antal af såvel regnormegange som rodkanaler efter almindelige landbrugsafgrøder ("bioporedomænet"), mens målinger i andre dybereliggende grundvandskomponenter med stor sikkerhed er foretaget under bioporedomænet. Vi mener således, at drikkevandsudvalgets betænkning fra 1998 giver anledning til nogen uklarhed, når man på én gang henviser til referencedybden "ca. 1 m" og på den anden side til en (noget større) dybde "umiddelbart under rodzonen". I nærværende projekt indgår en vurdering af værdien af at prøvetage grundvandet inden for bioporedomænet.

VAP-programmets resultater fra drænedede arealer har givet anledning til diskussion af, hvordan målinger i forskellige overfladenære

grundvandskomponenter bør fortolkes i forhold regulering af pesticidanvendelsen. Særlig fokus har der været på det forhold, at der er målt betydelig udvaskning af en række pesticider herunder glyfosat med drænvand, samtidig med at pesticidkoncentrationerne i store horisontale filtre fra 3.5 m dybde har været meget lave i forhold til koncentrationerne i drænvand (Kjær et al., 2009). Diskussionen har lænet sig op ad forskellige konceptuelle modeller for, hvordan pesticider og andre adsorberende stoffer transporteres i systemet. Der har især været forskellig opfattelse af, hvilken vægt man bør tillægge makroporekontinuiteten samt særlige transportmekanismer forbundet med bioporer i drænenes næromgivelser, og som udløber heraf i hvor høj grad man kan forvente, at pesticidkoncentrationer målt i DV repræsenterer koncentrationer i UV i drændybden.

Selv for svagt adsorberende stoffer, som opblandes effektivt i jordens forskellige poredomæner, herunder sporstoffer som bromid og klorid og måske enkelte pesticider, vil drænvandskoncentrationer formentlig ikke være fuldt repræsentative for koncentrationer i UV. Det skyldes især, at afstrømnings-komponenternes (DV og UV) relative fordeling varierer over året, og med en varierende koncentration i det øvre grundvand bliver gennemsnitskoncentrationerne i de to strømningskomponenter også forskellige. Der vil m.a.o. være brug for en "fortolkning" af målte drænvandskoncentrationer, sådan som det f.eks. kan gøres vha. eksisterende endimensionale matematiske simuleringsmodeller som MACRO (Larsbo og Jarvis, 2003) og Daisy (Hansen et al., 1990; Abrahamsen og Hansen, 2000). Pga. god opblanding af svagtadsorberende stoffer i jorden vil en god overensstemmelse mellem målte og simulerede drænvands-koncentrationer og drænvandsfluxe give en vis sandsynlighed for at beregnede stoffluxe uden om drænene i drændybden og lidt dybere er nogenlunde rigtige. Derfor vil det i de fleste tilfælde formentlig være acceptabelt at bruge en endimensional model til at beregne fluxe af vand og svagt adsorberende stoffer i UV og DV, selv om sådanne modeller repræsenterer en meget kraftig forenkling af det reelle strømningsbillede.

At anvende en endimensional model til forklaring af transporten af adsorberende stoffer og jordpartikler til dræn vil derimod være stærkt kritisabelt (f.eks. DJF, 2004; Stamm et al., 2002), idet sådanne stoffer i overvejende grad transporteres i makroporerne og derfor ikke fordeles ligeligt mellem jordens vandførende porer, specielt ikke mellem vertikalt orienterede makroporer med forbindelse til drænene og horisontalt orienterede transportveje. Der er m.a.o. brug for en flerdimensional, mekanisme-tro model til beskrivelse af vand- og stoftransport, som kan differentiere mellem DV og UV, og som kan bruges i forbindelse med analyse og fortolkning af målte stoffluxe i drænvandet og i andre dele af det øvre grundvand.

2 Baggrund og formål

2.1 Overordnet formål

Det er projektets hovedformål er at udvikle en matematisk model, der kan simulere pesticiders skæbne i drænet jord. Projektet skal bygge på en opdateret og virkelighedsnær konceptuel forståelse, der indbefatter transport i 2 dimensioner og flere domæner (herunder et bioporedomæne), kolloidfaciliteret transport samt særlige transportforhold knyttet til kontinuerede makroporer i drænenes nærområde. Modellen skal for et givet pesticid med givne egenskaber udbragt på et givet tidspunkt kunne simulere:

- Nedbrydning
- Transport til drænene
- Transport til den del af det øverste grundvand, som ikke ender i drænene

Simuleringsmodellen baseres på eksisterende viden om nedbrydning, adsorption samt transport af pesticider i jord suppleret med et feltforsøg på KU-LIFE's forsøgsgård Rørrendegård ved Tåstrup, hvis formål er at bidrage til at kortlægge aktive transportveje i jordsystemet. Modellen testes mod eksperimentelle resultater fra andre feltforsøg udført på Rørrendegård, samt mod resultater fra VAP-programmet målt ved Estrup og Silstrup i Jylland. Validiteten af den konceptuelle forståelse skal vurderes gennem sammenligning af simuleringsresultater med måledata. I denne forbindelse vurderes betydningen af de særlige transportforhold ved drænene, som indgår i konceptet. Endvidere vurderes, om koncentrationer af pesticider målt i drænvand kan forventes at repræsentere koncentrationer i den del af grundvandsstrømmen, som ikke ender i drænene. Endelig skal modellen anvendes til gennemregning af en række stofeksempler, der yderligere kan bidrage til Miljøstyrelsens vurdering af udvaskningen til overfladevand og grundvand.

2.2 Afgrænsning

Principielt er der fire mekanismer, der kan bidrage til transport af pesticider i jordsystemet:

1. Diffusion i gasfasen
2. Advektion i gasfasen
3. Diffusion i væskefasen
4. Advektion i væskefasen

Transport i gasfasen bidrager ikke til pesticidtransport til markdræn eller grundvand. Gasformige tab vil normalt især ske inden pesticidet bevæger sig ind i jordsystemet. Derfor ses der i modellering af pesticidtransport i jordsystemet bort fra transport i gasfasen.

I markskala under naturlige forhold er diffusion i væskefasen en meget lidt effektiv transportmekanisme i sammenligning med advektion i denne fase.

Sidstnævnte er m.a.o. den helt dominerende transportmekanisme. Derfor koncentrerer modelleringen af pesticidtransport sig om advektionen, selvom diffusion indgår i beregningerne. Da pesticidet altså primært bevæger sig med vandet, er beskrivelsen af vandets strømning, herunder dets strømveje og strømningsdynamik i jorden, en meget central del af modelleringen.

Når drænene ligger indbyrdes parallelt og med lille vinkel i forhold til højdekurverne, som det normalt vil være tilfældet (om tværdreningsprincippet: se f.eks. Jensen, 2002), kan strømmingen mellem og til drænene generelt karakteriseres rumligt ved hjælp af blot 2 dimensioner (2D), hvilket er attraktivt rent beregningsmæssigt i forhold til at regne i 3 dimensioner. Det er derfor i modeludviklingen valgt at beskrive jordsystemet i 2D.

I nogle lavtliggende områder vil der også være et grundvandsbidrag fra højere liggende områder, og der vil eventuelt være interaktion med å-systemer. Dette betyder, at der skal være mulighed for at påtvinge modellen særlige randbetingelser. Dette opnås ved at koble den udviklede model dynamisk (via OpenMI, Gijsbers et al., 2002) til grundvandsmodellen i MIKE SHE, sådan at der tages højde for 3D effekter i grundvandet og omkring dræn foruden 2D-effekterne i de øvre jordlag.

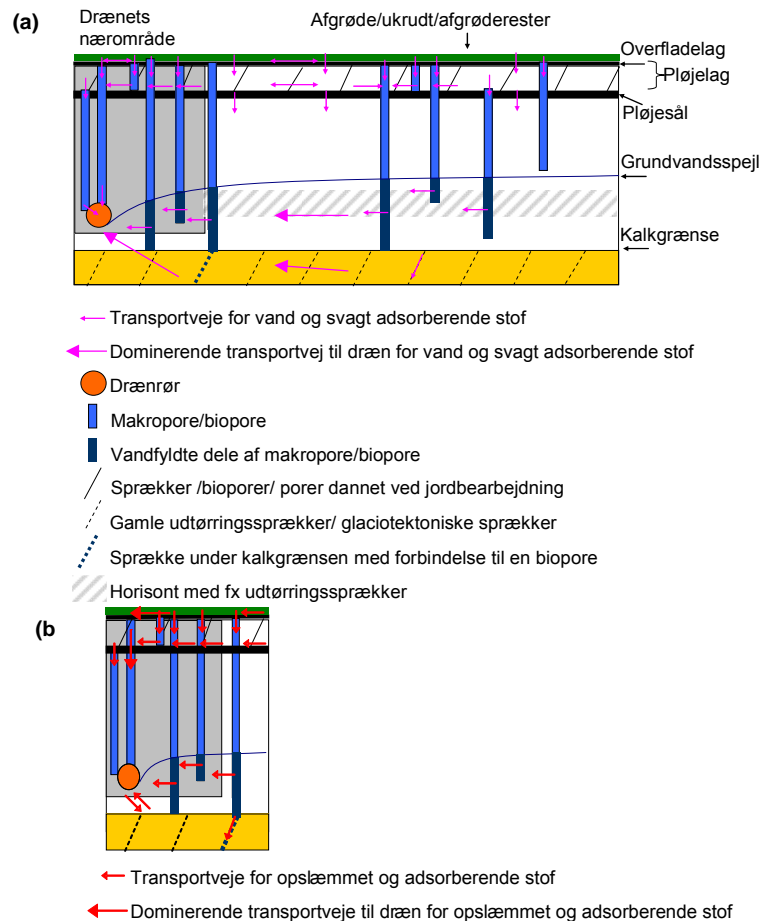
2.3 Beskrivelse af strømveje og mekanismer

Strømning i jordmatrix, dvs. den del af jordens poresystem, hvor de kapillære kræfter spiller en væsentlig rolle, beskrives ved Darcy's lov; dvs. strømhastigheden og strømrretningen afhænger af gradienten i hydraulisk potential. Det hydrauliske potential skyldes den samlede virkningen af gravitationskraften og de kapillære kræfter. Strømhastigheden afhænger også af størrelsen af jordens hydrauliske ledningsevne, K . Størrelsen af K afhænger især af størrelsen og kontinuiteten af jordens største, vandfyldte porer. Der eksisterer ofte en betydelig rumlig variation i K . Systematisk variation i K ses mellem forskellige zoner i jorden. En drænet markjord vil typisk kunne inddeles i følgende hydrauliske zoner (se Figur 2.1):

- Jordens horisonter
- Pløjesål og evt. overfladelag med lav K pga. jordpakning og slæmning
- Drængroft

Endvidere påvirker jordens makroporer (f.eks. bioporer, sprækker og inter-aggregat porer) den hydrauliske ledningsevne. Øverst i profilen (i pløjelaget) varierer makroporestrukturen under indflydelse af vejrlig, jordbearbejdning og biologisk aktivitet (Petersen et al. 1997 a,b; Petersen et al. 2001; Daraghmeh et al., 2008). I den øvre del (0-2 m) af jorden kan der både findes bioporer og sprækker. Bioporerne er skabt ved biologisk aktivitet (primært af planterødder og regnorme). Sprækkerne er primært skabt enten som udtørnings-sprækker (som følge af opfugtnings- og udtørningscykler) eller pga. frysning (gentagne frost/tø hændelser). I den nedre del af 2m jordlaget kan der også findes glaciotektiske sprækker, der er dannet på grund af pres fra den glacielle is (Ullum, 2001; Klint, 2004). Ydermere kan der her findes tektoniske sprækker, der kan have en udbredelse dybere ned i jorden, som det f.eks. angives i Rosenbom et al., (2008). I nogle dybtgående sprækker kan der være rodkanaler fra tidligere tiders trævegetation, som kan udgøre dominerende transportveje for vand samt for sporstof tilført i 3 m dybde (Jørgensen et al., 2002). Sprækkesystemerne er potentielt af stor betydning, da sprækkerne

typisk besidder stor kontinuitet. Men også sprækkernes åbningsgrad har afgørende betydning. Sprækker med en apertur større end 30 μm vil typisk bidrage betragteligt til jordens hydrauliske ledningsevne. Sprækketætheden spiller formentlig en mindre fremtrædende rolle.



Figur 2.1. Konceptuel model af vigtige strukturelementer med indikation af transportveje ved vandmættede forhold i drændybde. (a): Transportveje for vand og svagt adsorberende stof, (b): Transportveje for opslæmmet og stærkere adsorberende stof.

2.3.1 Strømning i makroporer

Strømning i jordens makroporer, dvs. porer med kun ubetydelig kapillarvirkning, skyldes hovedsagelig gravitationskraften. Kapillarvirkningen i en pore bestemmes af dens størrelse. Der findes forskellige angivelser af, hvor stor en pore mindst skal være for at blive benævnt som en "makropore". Definitioner varierer mellem diametre på 75 μm (Bouma, 1991) og 1000 μm (Luxmore, 1981). Jarvis (2007) angiver grænsen ved en ækvivalent porediameter på 0,3-0,5 mm i erkendelse af, at porer større end denne grænse spiller en afgørende rolle for transporten af adsorberende stoffer i jord ("non-equilibrium flow"). Grænsen er vigtig, idet de lidt mindre porer (der altså i dele af litteraturen fortsat benævnes som "makroporer") typisk vil modvirke kortslutning af jordens filterfunktion ved at reducere den trykopygning, der finder sted i forbindelse med nedbør. Børgesen et al. (2006) viste, at funktioner, der beskriver danske jordes hydrauliske ledningsevne som funktion af ækvivalent diameter af største vandfyldte pore, ofte udviser et dramatisk knæk ved en diameter på ca. 0,75 mm. Mange forsøg med det relativt

svagtadsorberende farvesporstof Brilliant Blue har vist, at farvedetrængning i meter-skala kun finder sted gennem porer med diameter større end ca. 0,5 -1 mm (fortrinsvis regnormegange og/eller store rodkanaler). På den baggrund definerer vi grænsen for hvad der benævnes som makroporer ved en ækvivalent porediameter på ca. 0,5-1,0 mm.

Med denne definition er makroporer i jord ofte af biologisk oprindelse, dvs. bioporer dannet af regnorme og de større planterødder (termen makroporer bruges derfor som synonym for bioporer i det følgende). Roddybden afhænger bl.a. af plantarten. I underjorden finder man ofte mange større planterødder (bl.a. fra kornafgrøder) i regnormegangene, idet betingelserne for dyb rodudvikling typisk er bedre her end i jordmatrixen. Rod- og regnormegange er ofte fundet ned til ca. 1,5 meters dybde (f.eks. Klint, 2004; Petersen et al., 2004). Andre har rapporteret, at kanaler lavet af stor regnorm (*Lumbricus terrestris*) kan række fra jordoverfladen og ned i 2,4 meters dybde (Edwards og Bohlen, 1996).

Strømretningen i disse porer bestemmes typisk af porernes orientering, der ofte er vertikal. Strømning i makroporerne kan foregå som en filmstrømning langs porevæggene eller som en puls, der bevæger sig ned gennem poren (Tofteng et al., 2002; Gjettermann et al., 2004). Strømhastigheden i makroporerne afhænger typisk af tilførselsraten. Da makroporerne kun besidder ubetydelig kapillareffekt, kræves det, at den omgivende jordmatrix har et positivt trykpotential et eller flere steder langs med makroporen for at makroporestrømning initieres. Når makroporestrømning er etableret, opbygges en hængende vandsøjle, der giver et negativt trykpotential i makroporen. Tilstrømning til makroporen fortsætter herefter indtil trykpotentialet i makroporen overstiger potentialt i den omgivende jordmatrix. Strømning fra en vandfyldt makropore til jordmatrix foregår, når trykpotentialt et eller flere steder langs makroporen overstiger potentialt i jordmatrix. Strømhastigheden bestemmes her af forskellen mellem de to potentialer og jordmatrixens - specielt overgangzonens (makroporerens vægge) - hydrauliske egenskaber.

Udvekslingen af vand mellem makroporer og matrix kan være stærkt reduceret af coatings (belægninger) på makroporerens vægge. Belægningerne kan f.eks. bestå af ler og humusrige partikler (Petersen et al., 2001; Rosenbom, 2005) og af jern- og aluminium-gel (Robert & Terce, 1989). Jern og aluminium kan f.eks. være afsat på makroporerens vægge ved redoxprocesser (Lee, 1985). Endvidere afsætter regnormene proteinrigt slim, der får partiklerne på regnormenes vægge til at hænge sammen (Lee, 1985).

Vandstrømningen i makroporerne er meget irregulær i tid såvel som rum og er ofte afgrænset til en lille fraktion af makroporerne (Villholth et al., 1998). I forsøg med farvesporstoffer tilført med relativ høj intensitet på dansk moræneler er det fundet, at bioporer (primært ormegange) dominerer sporstoffernes migration i de øverste 1-1,5 m (Petersen et al., 1995, 1997a, 1997b, 2001; Gjettermann et al., 1997). Lokalt i pløjelaget og ved furebunden kan sporstoffernes transportveje være domineret af strukturer dannet i forbindelse med jordbearbejdning og jordpakning, og bearbejdnings-induceret præferentiel transport i pløjelaget kan påvirke aktiveringen af bioporer i større dybder (Petersen et al., 1997a, 1997b). Forskellige former for jordbearbejdning kan påvirke omfanget af makroporestrømning; således fandt Petersen et al. (2001) i forsøg med vinterhvede 5 gange flere strømningsaktive makroporer i 30-100 cm dybde efter minimal jordbearbejdning end efter

pløjning suppleret med intensiv sekundær jordbearbejdning. Jordbearbejdningen ødelægger de eksisterende bioporer, og nye bioporer vil først blive gendannet efter nogen tid. Den biologiske aktivitet har derfor grundlæggende indflydelse på makroporekontinuiteten og dermed transportforholdene i dyrket jord.

Rosenbom (2004) iagttog, at når jorden var våd, var det kun bioporer, som blev videreført i sprækker, som bidrog til migration af farvesporstof. Resultaterne understreger betydningen af, at store bioporer øverst i profilen må finde afløbsmulighed, for at kunne lede meget store mængder af vand og stof. I andre forsøg med udbringning af farvesporstof har det således vist sig, at ikke alle makroporer, der var blevet farvet, også var tømt for vand i perioden mellem vanding og udgravning. Vi har observeret, at sådanne porer kunne stå vandfyldte i flere timer efter vanding.

Ovenstående synes at vise, at transporten i makroporer i højere grad afhænger af makroporekontinuiteten samt spørgsmål om tilløb og afløb, end af antallet af makroporer. Makroporekontinuiteten påvirkes foruden af de nævnte faktorer (specielt jordbearbejdning og biologisk aktivitet) af naturlige processer som frost/tø og opfugtning/udtørring.

2.3.2 Transportveje for kolloider og stærkt adsorberende stoffer

Der er generel enighed om, at transporten af mobiliserede kolloider og stærkt adsorberende stoffer foregår ad præferentielle strømningsveje såsom bioporer og større sprækker eller inter-aggregat porer. Det vil sige at den vandstrøm, der kan transportere kolloider og adsorberende stoffer hurtigt og over relevante afstande i jorden (ca. 1 m eller mere), formodes at bevæge sig uden om matrix (Jarvis, 2007; Lægdsmands et al., 1999; Schelde et al., 2002; Petersen et al., 2001; Villholth et al., 1998; Ryan et al., 1998).

Normalt vil kun en mindre del af jordens system af makroporer være effektivt forbundet med drænene. Dette system findes i området ved drængrøften. Set i denne markskala findes der sædvanligvis ikke horisontalt orienterede, kontinuerede makroporer i underjorden omkring drændybden, hvilket bl.a. afspejles i dræningsbehovet. Afhængigt af bl.a. jordbearbejdning og biologisk aktivitet kan makroporeforbindelser nå helt op til jordoverfladen og derved lokalt ved drængrøften skabe en effektiv transportvej for jordkolloider og udbragte adsorberende stoffer fra overfladen til dræn, vandløb og søer. Længere væk fra drængrøften er der ikke i samme grad sikkerhed for, at makroporerne kan få effektivt afløb til drænet. Dette vil eksempelvis gælde under forhold med høj grundvandsstand. Den manglende forbindelse med drænene bevirker, at underjordens makroporer i området mellem drænene har mindre betydning for transporten af jordpartikler og adsorberende stoffer til dræn.

I litteraturen findes der betydelig støtte for konceptet med særligt effektive transportveje for opslæmmede og adsorberende stof i drænets næromgivelser (f.eks. Shipitalo & Gibbs, 2000; Uusitalo et al., 2001; Stamm et al., 2002; Petersen et al., 2004; Fox et al., 2004; Montagne et al., 2009; Nielsen et al., 2010).

2.4 Daisy

Udgangspunktet for nærværende modelarbejde er jord-plante-atmosfære-modellen Daisy. Daisy er en endimensional (1D), deterministisk og dynamisk model med indbygget mulighed for distribueret anvendelse.

Modellen drives af vejrdata, og den kræver parametre for henholdsvis jord og vegetation, samt data om dyrkningspraksis, herunder sædskifte, gødsning, sprøjtning, vanding og jordbehandling. Som vist i Figur 2.2 omfatter Daisy tre moduler, dvs. et bioklimatisk modul; et vegetationsmodul; og et jordmodul.

2.4.1 Det bioklimatiske modul

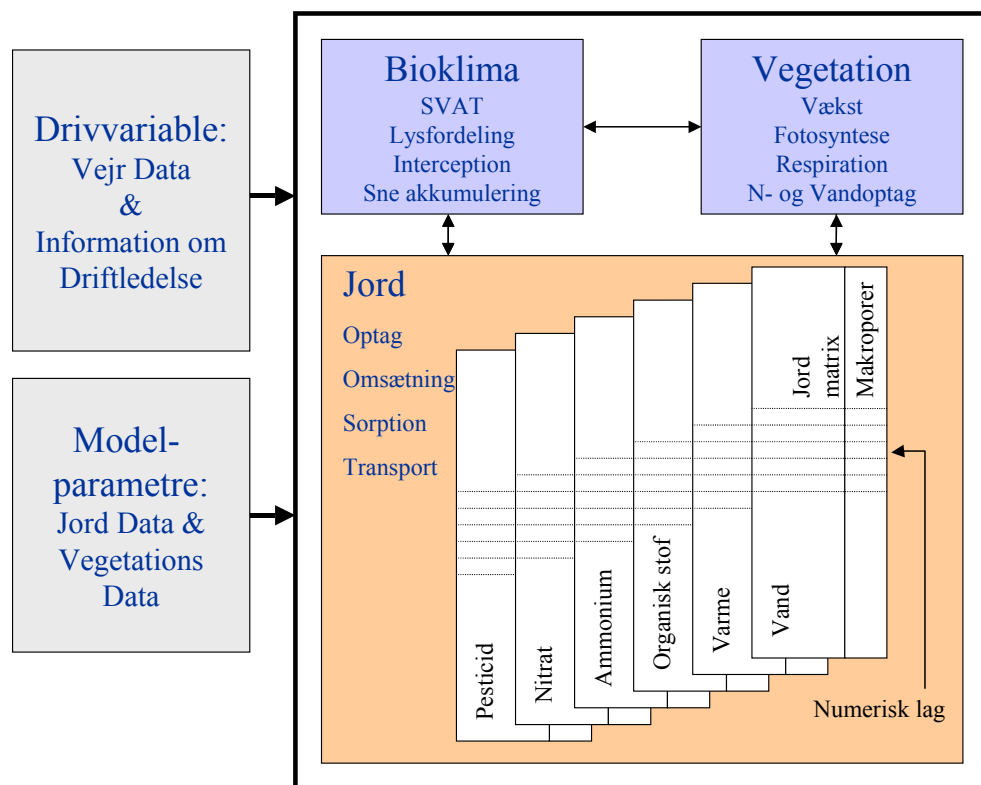
Det bioklimatiske modul håndterer:

1. udvekslingen af vand, kuldioxid, kvælstof og pesticider mellem jord-vegetation og atmosfære,
2. interception af fotosynteseaktiv stråling i vegetationen
3. overfladeprocesser såsom akkumulering af sne, snesmeltning samt,
4. magasinering af vand, kvælstof, pesticider og organisk stof på jordoverfladen.

Vand tilføres systemet (det bioklimatiske modul) som nedbør (regn, vanding, sne) og forlader systemet som evapotranspiration (fordampning), overfladeafstrømning eller infiltration. Evapotranspiration omfatter transpiration fra vegetation, evaporation af jordvand, evaporation af vandmagasinet på jordoverfladen, på overfladen af vegetationen eller i et snedække.

En jord-vegetation-atmosfære transfer model (SVAT) beregner de forskellige evaporative fluxe mellem jord-afgrøde og atmosfære. Daisy understøtter forskellige modelbeskrivelser, idet såvel en omfattende netværksmodel med transportmodstande såvel som en simpel approksimativ modelløsning er implementeret. Det bioklimatiske modul vekselvirker med vegetationsmodul gennem vegetationsdækket (canopien), som kan bestå af en vegetation af en eller flere plantearter (intercropping).

Udsprøjtede pesticider kan opfanges (intercepteres) i canopien (bladdækket), hvor de kan nedbrydes (beskrevet ved en 1. ordens proces og en dissipationskoefficient), adsorberes til bladoverfladerne eller vaskes af. Sidstnævnte processer beskrives ved en simpel "wash-off-coefficient". Afvaskede pesticider og pesticider, der udsprøjtes direkte på jordoverfladen, overføres til jordmodul.



Figur 2.2. Skematisk præsentation af Daisy-modellen

2.4.2 Vegetationsmodulet

Vegetationsmodulet inkluderer et antal forskellige afgrødemodeller. De aktuelt implementerede modeller simulerer fotosyntese i vegetationen, assimilatfordeling og respiration. Vigtige karaktertræk for afgrødemodellerne er, at de er i stand til at beregne variationer over tid i bladarealindex (LAI), roddybde, rodlængdetæthed, tørstofproduktion, og afgrødens kvælstofbehov, idet disse informationer er nødvendige i andre dele af Daisy-modellen.

2.4.3 Jordmodulet

Jordmodulet i Daisy omfatter dynamiske modeller for jordvand, jordvarme, organisk stof i jord (kulstof og kvælstof), nitrat, ammonium og pesticider. Jordprofilen omfatter et antal horisonter, som hver er karakteriseret ved et antal jordparametre. Derudover er jordprofilen opdelt i et antal (numeriske) lag karakteriseret ved jordparametre for den horisont, som de hver især tilhører, og desuden karakteriseret ved deres indhold af vand, varme, organisk stof, ammonium og pesticid. Jordvand, nitrat, ammonium og pesticid kan transporteres og optages af planterne.

Modellen for jordvarme tager højde for transport af varme dels ved konduktion og dels ved konvektion. Organisk stof, nitrat og ammonium såvel som pesticid i jorden kan undergå transformationsprocesser.

Modellen for transformation af organisk stof opererer med tre forskellige typer af organisk stof, nemlig:

1. nyligt tilført organisk stof (AOM),
2. levende mikrobiel biomasse (SMB), og

3. naturligt ikke-levende organisk stof (SOM).

Modellen beregner CO₂-afgivelse, ammonifikation, og immobilisering af nitrat og ammonium. Derudover beregnes adsorption og nitrifikation af ammonium, og denitrifikation af nitrat.

Nedbrydning af pesticider beskrives ved 1. ordens kinetik, hvor nedbrydningshastigheden bl.a. afhænger af jordtemperaturen og jordens fugtighedsforhold udtrykt ved jordvandets trykpotential eller pF. Nedbrydningshastigheden kan desuden gøres afhængig af den biologiske aktivitet udtrykt ved CO₂-udviklingen, som simuleres af omsætningsmodellen for organisk stof; ligesom nedbrydningshastigheden kan gøres afhængig af koncentrationsniveau og/eller dybden under terræn. Modellen tillader også introduktion af en "lag"-faktor, der forsinker starten af nedbrydningen i forhold til udbringningstidspunktet.

Sorption af pesticider kan beskrives ved de gængse sorptionsisotermer, dvs. en lineær isotherm, en Langmuir isotherm og en Freundlich isotherm. Sorptionsparametre regnes som funktioner af jordens indhold af organisk C, jordens lerindhold og brugerdefinerede parametre, som f.eks. jordens jern- og aluminiumindhold. I den oprindelige version betragtedes adsorption som en momentan reaktion, men sideløbende med nærværende projekt er en modelkomponent for simulering af adsorptionskinetik blevet udviklet (Gjettermann et al., 2008).

Modellen for vand og stoftransport simulerer transport i såvel jordmatrixen som i makroporer.

Forholdene i bunden af jordprofilen (de nedre grænsebetingelser) vil kunne influere på transportprocesser i jorden. Den mest almindeligt forekommende nedre grænsebetingelse for transport skal derfor specificeres, f.eks. interaktion med grundvand eller en betingelse karakteriseret ved gravitationsstrømning, når grundvand ikke influerer på strømningen i den betragtede jordprofil.

Særlige beregninger foretages i situationer med drænledninger, og i tilfælde af højtliggende grundvand skal positionen af dette være kendt. Modellen kan opfattes som en samling af processer, og for at anvende modellen skal de enkelte procesmodeller initialiseres og parameteriseres. Ud fra modellens resultater kan der opstilles balancer for henholdsvis vand, organisk stof (kulstof og organisk kvælstof), nitrat, ammonium og pesticider.

I nærværende projekt videreudvikles Daisy til at omfatte transport af vand, varme og stof i 2 dimensioner (2D), med særlig henblik på at beskrive forholdene omkring markdræn. 1D-modellens funktionalitet overføres til 2D-versionen. Desuden udvikles et modul til beskrivelse af kolloid-faciliteret transport.

3 Feltforsøg

Svagt adsorberende såvel som stærkt adsorberende stoffer og mobiliserede kolloider med eller uden adsorberede stoffer, kan transporteres gennem jorden til dræn eller dybereliggende jordlag. Der er generel enighed om at specielt stærkt adsorberende stoffer og mobiliserede kolloider altovervejende transporteres via præferentielle strømningsveje som bioporer og sprækker. Det vil sige at den vandstrøm, der transporterer stærkt adsorberende stoffer og kolloider formodes at bevæge sig uden om matrix (f.eks. Lægdsmand et al., 1999; Schelde et al., 2002; Petersen et al., 2001; Villholth et al., 1998, Ryan et al., 1998). I modsætning hertil foregår transporten af svagt adsorberende stoffer såvel i matrix som ad præferentielle strømningsveje.

Formålet med feltforsøgene er at karakterisere biopore- og sprækkesystemer i en drænet mark. Derudover vil koncentrationerne af de påførte sporstoffer bromid, Brilliant Blue og fluorescerende 1 μm melanin resin mikrosfære (MS) blive målt i prøver udtaget på baggrund af forekomster af Brilliant Blue (jf. Petersen et al., 2011). De observerede forhold i felten skal efterfølgende benyttes i videreudviklingen af Daisy 2D.

3.1 Lokaliteten

I forbindelse med dette projekt er der udført 3 sporstofforsøg (A: forår 2007, B: efterår 2007 samt C: sommer 2008) på det Biovidenskabelige Fakultets (KU) forsøgsjorde ved Taastrup (Figur 3.1). Forsøgsjorden er en drænet Agrudalf (Petersen et al., 2004) udviklet i en moræneaflejring (1-2 m dyb) fra Weichsel glaciationen hvor tegldrænet i 1960'erne er lagt i ca. 1,2 m dybde. Generelt varierer tykkelsen af A-horisontens fra 25 til 40 cm, mens lernedslemning har ført til dannelsen af en B_t-horisont (Argillic). Det specifikke feltområde på marken i Taastrup er valgt på baggrund af informationer på et EM38kort over området. Kortet viser at det valgte område er mindre sandet end naboområderne. I de tre forsøg er der taget 79 teksturprøver (15 i A, 60 i B og 4 i C). Jorden ved forsøgsarealerne A og B er klassificeret som en lerjord (FK 5, JB 7) på kanten til en fin sandblandet lerjord (FK 4, JB 6) i A-horisonten mens den entydigt er klassificeret som lerjord (FK 5, JB 7) i B- og C-horisonten. Teksturen ved forsøgsarealet C adskiller sig fra områderne A og B ved at A-horisonten er en grov lerblandet sandjord (FK, 3 JB 3) på grænsen til en grov sandblandet lerjord (FK 4, JB 5). Herunder findes en E-horisont af grov sandblandet lerjord (FK 4, JB 5) mellem 25 cm og 30-60 cm. Under E-horisonten er teksturen som ved A og B en lerjord (FK 5, JB 7). Teksturen i drængrøften er mere heterogen end den, der er målt i resten af profilerne.

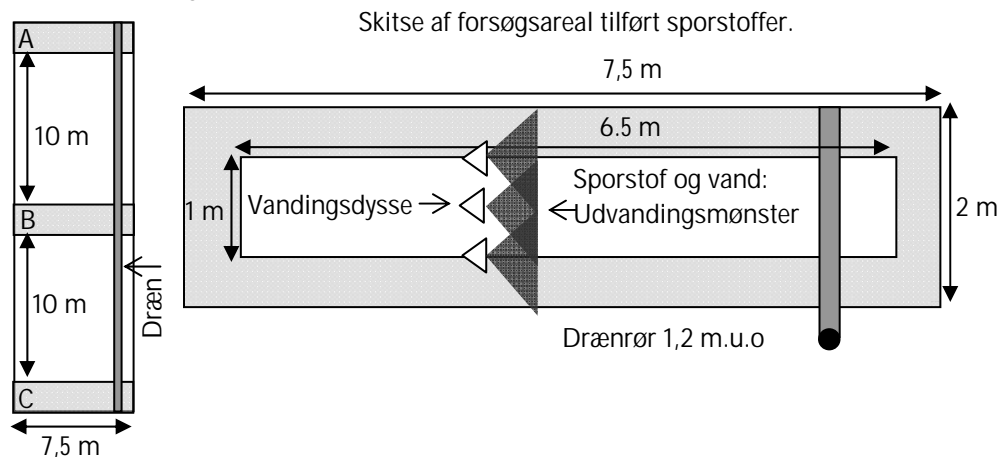
For at teste jordens volumenvægt er der udtaget 167 volumenvægtsprøver fra de tre områder. I område A er der udtaget 57 prøver, hvoraf de 35 er i udtaget i 145 cm dybde. Der er udtaget 100 prøver i område B med særlig fokus på drængrøften og 10 prøver i område C. Generelt var volumenvægten i niveauet 1,6–1,8 g/cm³, hvilket indikerer, at det er en forholdsvis tæt jord. Volumenvægten i 145 cm dybde (under kalkgrænsen – i et område med horisontale sprække) var generelt højere (1,7–2,0 g/cm³, 1,9 g/cm³ i

gennemsnit) end i de øvrige horisonter. I område B var volumenvægten i 30-50 cm dybde 5 m fra drænet (sektion 5, Tabel 3.3) kun 1,4-1,6 g/cm³ mens teksturen ikke skilte sig ud. Af de ti prøver i område C blev fem udtaget i blåfarvet jord og fem i ufarvet jord i 30 cm dybde. Volumenvægten var som i majoriteten af prøverne mellem 1,6 g/cm³ og 1,8 g/cm³.

Under moræneaflejringen findes en sandlinse. Ingen af udgravningerne har dog været så dybe, at de har nået sandlinsen. Derimod har alle tre udgravninger været dybde nok til, at kalkgrænsen kunne identificeres. Kalkgrænsen blev i dette studie, som i tidligere studier fra området, oftest fundet mellem 1 og 2 m under jordoverfladen. At kalkgrænsen er lokaliseret over sandlinsen har gjort det muligt at erkende sprækker, der kan være af glaciotekonisk oprindelse (pers. komm. Klint, 2006). Sådanne glaciotekonisk sprækker kan ikke erkendes i sandlinsen.

Jorden, hvor forsøget er udført, har tidligere været pløjet, men er ikke blevet det i forsøgsperioden. Årsagen til dette er et ønske om at bibeholde de makroporer, der er blevet skabt i overjorden siden sidste pløjning (september 2005). En måned før tilførsel af tracer til område C blev jorden såbedsharvet, da der var dannet en svag skorpe pga. dråbeerosion på jordoverflade. Skorpedannelsen betød at forsøgsarealet før behandlingen ikke længere fremstod som en almindelig landbrugsjord. Vegetationen på forsøgsområderne blev skåret ned til jordoverfladen før vanding.

Forsøgsarealernes interne placering



Figur 3.1. Skitser af forsøgsarealerne (A, B og C) set ovenfra. Forsøgsarealernes interne placering er angivet i skitsen til venstre. På skitsen til højre er der zoomet ind på et enkelt forsøgsareal. Her er dimensionerne af forsøgsarealet samt udvandingsmønsteret for sporstoffer og vand angivet. Forsøgsarealerne A og B (vist) var 0,5 m længere end forsøgsareal C. På begge skitser er placeringen af det begravede drænrør angivet på jordoverfladen.

3.2 Metoder og materialer

3.2.1 Vanding, sporstof og bioporetælling

Bruttoforsøgsarealet var i forsøg A og B 15 m² og i forsøg C 14 m², mens nettoforsøgsarealet var henholdsvis 6,5 m² og 6 m² (Figur 3.1).

Forsøgsarealerne var placeret på tværs af et dræn. Der var 10-15 m mellem forsøgsarealerne A og B og mellem B og C. Bruttoforsøgsarealet var afgrænset

af en lille jordvold, der havde til formål at minimere risikoen for overfladeafstrømning ud af det opvandede område (Figur 3.1). I situationer, hvor det blev vurderet at risikoen for overfladeafstrømning var overhængende, blev vandingen standset i en periode. Dette skete oftest i forsøg B. Med disse pauser kunne udvandingen af de 50 mm vand udføres på mellem 4 og 8 timer. Udvangingsvandet var tilført 2,2 g/L af det svagt adsorberende, anioniske farvestof Brilliant Blue i alle tre forsøg, henholdsvis 0,09 g Br /L i forsøg A og 0,14 g Br /L i forsøg B og C samt $1,34 \times 10^{10}$ caboxylerede fluorescerende melamine-resin - mikrosfære (MS) partikler pr L i forsøg C. MS-partiklerne er sfæriske med en diameter på $0,98 \mu\text{m} \pm 0,06\mu\text{m}$. De er farvet med Sulforhodamin B mono-natrium salt og har en densitet på $1,51 \text{ g/cm}^3$.¹

I forsøgsområde A var der dannet tydelige udtørningssprækker i overjorden (Figur 3.5A). Disse formodes delvist at have mindsket nedstrømningen i de cirkulære bioporer. For at undgå denne situation i forsøg C blev forsøgsarealet vandet op med 20 mm vand en måned inden det egentlig forsøg blev påbegyndt. Efter udvandingen blev arealet dækket med en presenning for at mindske fordampningen fra området. At denne procedure havde effekt var tydelig, da forsøgsområdets topjord var fugtig ved udvanding, mens den omkringliggende bare jord var udtørret ved starten af selve sporstofforsøget. I forsøg B var det ikke nødvendig at opvande overjorden for at undgå udtørring, da overjorden som udgangspunkt var fugtigere. Dette udsagn underbygges af at nedbørsmønstrene i ugen op til udvanding i forsøg A og B var meget forskelligt. I forsøg A regnede det 9 mm en uge før udvandingen, ellers var det tørt. I forsøg B regnede det derimod 20 mm i løbet af ugen før, hvor de 8 mm faldt dagen inden udvanding.

Bortset fra i de allerøverste cm af profilen var jordens vandindhold forholdsvis ens før forsøgsudførelsen (Tabel 3.1). Der var måske en tendens til at jorden var lidt mere tør i 30 cm's dybde i forsøg C end i de to første forsøg. Grundvandsspejlets beliggenhed var i alle tre tilfælde under den givne udgravnings bund (Tabel 3.1).

Tabel 3.1 Fugtighedsforholdene ved forsøgsområderne før de tre sporstofforsøg A, B og C

Forsøg	A	B	C
Grundvandspejl m†	~1.9	~1.7	>1.9
θ i 30 cm‡	0.30 og 0.32	0.30 og 0.35	0.29 og 0.27
θ i ~110 cm‡	0.35 og 0.36	0.33 og 0.35	0.35 og 0.35

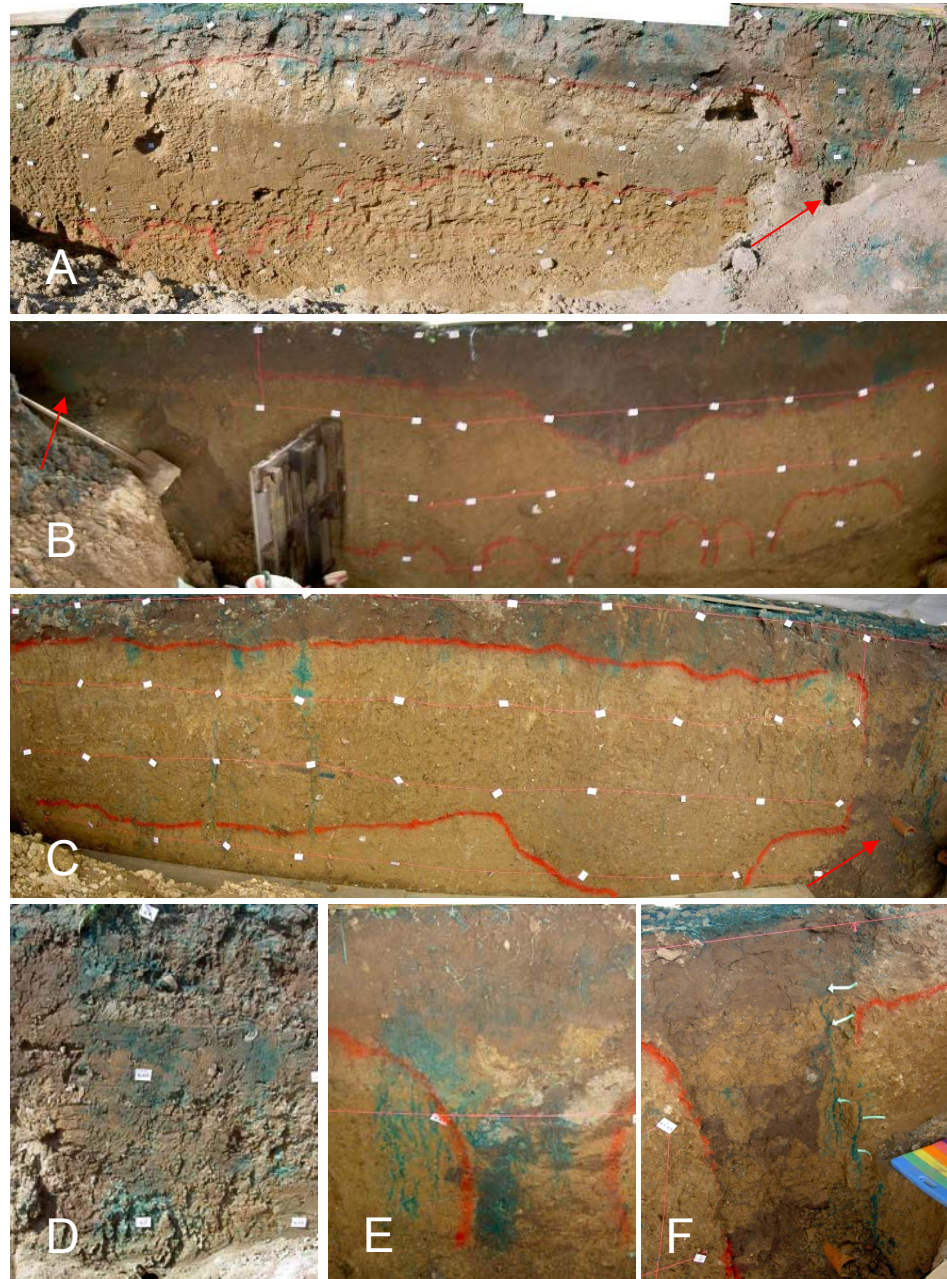
† målt med grundvandspejlefløjte

‡ Volumetrisk vandindhold målt i 2 rør med neutronmeter (503DR Hydroprobe Moisture Gauge) og korrigeret.

Efter udvandingen stod forsøgsarealerne overdækket en uge, inden en rendegraver blev benyttet til at grave en profilvæg fri. I forsøg A var udgravningen ca. 1,8 m dyb, mens den i B og C var ca. 1,6 m dyb. Denne forskel skyldes blandt andet, at risikoen for indtrængen af grundvand i efteråret skulle mindskes og at udgravningen var under kalkgrænsen selv ved de 1,6 m. Efter udgravning blev forsøgsarealet overdækket for at undgå fordampning og opvanding med naturlig nedbør.

¹ I forsøg A og B blev der tilført 10^{10} polystyren Fluoresbrite YG microsphere (PS)/L (diameter på $0,5 \mu\text{m}$). Som det fremgår af Nielsen (2010) var der store problemer med at genfinde PS. Dette medførte brug af MS som i Burkhardt et al., (2008). Analysemetoden for genfindning af MS er ikke forsøgt anvendt på PS.

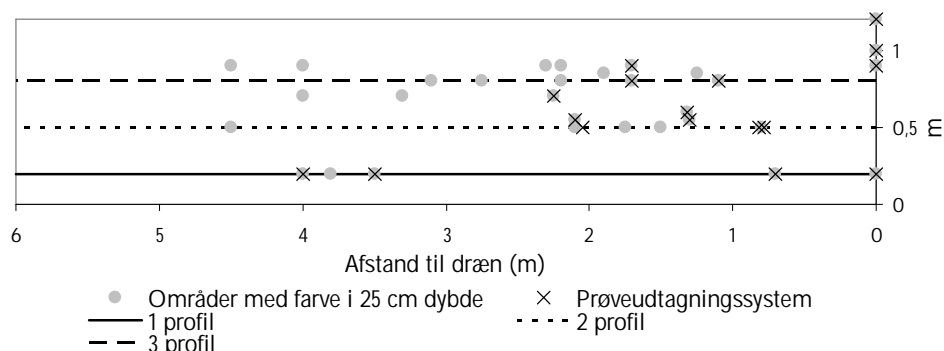
I områderne A og B blev der talt bioporer på tværs af profilerne i et 15-30 cm's brede bælte. Ved optælling blev profilet delt op i 0,5 m lange sektioner, hvorved arealet af den horisontale tælleflade i hver sektion blev henholdsvis 0,075 m² (A) og 0,15 m² (B). Efterfølgende blev antallet af optalte bioporer per sektion normaliseret pr m². Optællinger blev udført i op til otte dybder (Tabel 3.2 og Tabel 3.3). I forsøg C blev udgravningsstrategien omlagt. I stedet for udgravning af én profilvæg blev der blotlagt 3 profilvægge. Ændringen bundede i et ønske om at kunne blotlægge de blå bioporer i vertikal retning. Ændringen medførte dog også, at der ikke var mulighed for at tælle bioporerne på horisontale flader.



Figur 3.2 Profilvægge og drængrøfter fra forsøg A (A og D), forsøg B (B og E) og forsøg C (C og F). De hvide markeringer er brugt til at inddеле profilet i et grid med celler på 0,5 x 0,5 m. De røde pile markerer drænenes placering i profilerne. I forsøg A og B er der en massiv farvning af jorden lige over og omkring drænet samt i bioporer lige udenfor drængrøften (hvh. billeder D og E). Drænrørene er dog ikke farvet indvendigt. I forsøg C er der kun nogle få

blå porer, der fører ned til drænet. Disse porer var lokaliseret lige udenfor selve drængrøften. Her var drænrørene farvet indvendigt (F).

Profilvæggene fra forsøgene A, B og den første profilvæg i forsøg C kan ses i Figur 3.2A, B og C mens nærbilleder af de tre drængrøfter er gengivet i Figur 3.2D, E og F. De to øvrige profilvægge fra forsøg C er uden A-horisont, da A-horisonten blev skrabet af, således at de områder, der var mest blåfarvede fremstod tydeligt. På baggrund af den fundne farvetegning, blev det valgt at udgrave henholdsvis den 2. og den 3. profilvæg 50 cm og 80 cm inde i forsøgsarealet (Figur 3.3). Drængrøften i forsøg C blev undersøgt manuelt ved at tippe jorden væk med en kniv (1,2 m dybde, 0,5 m bredde og 1,25 m længde).



Figur 3.3 Placering af de 3 beskrevne profilvægge samt af prøveudtagningssteder (forsøg C). Endvidere er vist lokaliteter med farve i 25 cm dybde fundet i forbindelse med udgravningen. Alle lokaliteter er vist på en horisontal flade (1,2 m x 6,0 m) i 25 cm dybde startende lige over drænet (punktet (0,0)). At der ikke er taget prøver i alle de blåfarvede områder skyldes, at der i nogle områder ikke blev fundet yderligere farvning i større dybde.

3.2.2 Jordprøver og analyser

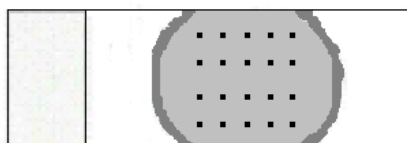
Der er i alle tre forsøg udtaget prøver til måling af bromid, Brilliant Blue og i forsøg C til bestemmelse af mængden af fluorescerende mikrosfære (MS). Udtagningen af prøver er foretaget ved at skrabe den ønskede prøvetype ned i en lille pose, hvor prøven efterfølgende er opbevaret indtil analyse i laboratoriet. I forsøg A og B er der taget prøver af mange forskellige mikrosites i udgravningen (biopore, sprækker, matrix, interne catchments m.m.). Erfaringerne angående udtagning fra disse forsøg blev udnyttet ved prøveudtagningen i forsøg C (se Nielsen, 2010). I forsøg C er der udtaget prøver langs væggene fra blå bioporer. Prøverne består af 1 mm tykke afskrab af 10 – 15 cm farvede bioporevægge. Mængdeforholdet af jord fra makroporeoverflade og matrix i de enkelte prøvetagninger vil have en vis betydning for resultaterne af de målt koncentrationer. Usikkerheden er dog forsøgt minimeret ved at begrænse afskrabets tykkelse. I 2 bioporer fra det uforstyrrede område mellem drænene (tillen) er prøveudtagningen startet ved overfladen og stoppet i dybden, hvor den blå farve forsvandt. Derudover er der udtaget materiale fra 10 porer fra 35 cm's dybde til farvningen stoppede. I drængrøften blev der fundet 4 blå bioporesystemer af betydning (hermed menes at de førte farve ned til mere end 30 cm's dybde). Den synlige farvning af porerne med Brilliant Blue stoppede mellem 0,6 m og 0,75 m i 3 af disse poresystemer (det var muligt at følge 2 af disse fra overfladen), mens det fjerde system fortsatte til og havde kontakt med drænet.

I laboratoriet er jorden tørret ved 21 °C i 24 timer og knust i en morter. 100 mg af jordprøverne fra forsøg C blev anvendt til genfindning af MS mens resten af jordprøven blev anvendt til måling af bromid og Brilliant Blue.

3.2.3 Genfindning af partikler (MS)

Ved genfindingen af MS blev en modificeret Burkhardt et al. (2008)-protokol anvendt. Som i Burkhardt et al., (2008) blev 100 mg af den tørrede og knuste jordprøve overført til en 100 ml målekolbe, som herefter blev fyldt med vand til mærket. Målekolberne blev placeret i et ultralydsbad, hvor jorden blev dispergeret i 15 min. Herefter blev der udtaget 10 ml væske i fuld pipette. Disse 10 ml blev overført til et sort polycarbonatfilter (diameter 47 mm, pore størrelse 0,22 µm). Filtreringssystemet består af en 1L vakuumglasflaske tilsluttet sug. På toppen er flasken var en glasfilterholder samt en glastragt monteret omkring filteret.

Protokollen blev herefter modificeret og tilpasset det anvendte mikroskop, kamera og billedbehandlingsprogram. Filtrene blev således efter endt filtrering forstørret 125 gange (okular 10x, objektiv, 10x og tubusfactor 1,25x) og undersøgt under et mikroskop (Zeiss III RS) med kviksølvlampe. På objektglassene blev der tilført en dråbe Zeiss Immersol 518N for at øge klarheden ved mikroskopering. Der blev taget 20 billeder af hvert filter (Figur 3.4) med et Nikon Coolpix 3,34 mega pixel, uden blitz, lukketid ½' og blænde f4. Hvert billede udgjorde et areal på 0,39 mm² mens det aktive filter areal var 907 mm² – svarende til at 0,9% af filteret blev talt.



Figur 3.4 Objektglas med filter. Der er taget 20 billeder af hvert filter. Fordelingen af billeder på filteret er markeret med sorte prikker.

Herefter blev der foretaget en sammenligning af tælling af MS manuelt og ved brug af billedbehandlingsprogrammet ImageJ ved forskellige antal af MS pr billede. Ved under 5 MS pr. billed var den manuelle tælling bedst egnet, mens ImageJ blev anvendt når der var mere end ca. 5 MS pr. billed. Endvidere blev forskellige opsætnings betydning for resultatet af tællingerne i ImageJ testet på filtre med 15-50 MS pr billede. I den endelige protokol underestimerer ImageJ antallet af MS, men de partikler der tælles er MS.

Den endelige procedure for tælling i ImageJ blev som følgende: Den gule farve blev justeret til 100 enheder (i intervallet 0-255) for at minimere farveforstyrrelser fra andre kilder. Billedet blev transformeret til et 8 bit-billede med en tærskelværdi på 15 i den grå skala (0-255) og endeligt blev de cirkulære partikler med størrelse mellem 5 og 55 pixels talt.

I forbindelse med tællingerne af MS blev det undersøgt, om der var en sammenhæng mellem beregnede og talte koncentrationer i niveauet 10⁶-10⁹ MS pr. g jord. For at opnå overensstemmelse mellem de beregnede og talte koncentration blev en korrektionsfaktor benyttet da genfindingen var 37% ± 3% (gennemsnit ± SE).

3.2.4 Måling af bromid og Brilliant Blue

Jordprøverne til brug for måling af bromid og Brilliant Blue blev rystet i jordvand forholdet 1:1 i 16 timer, og herefter centrifugeret i 30 min ved 1341,5 x g. Supernatanten blev analyseret for bromid ved brug af ion kromatografi (Dionex, DX 500 HPLC). Ved den anvendte metode er detektionsgrænsen vurderet til at være 1 µg/g jord. Når der var supernatant tilbage efter bromidmålingen, blev farvemængden målt ved brug af et spektrofotometer (Shimadze UV-160A) ved 630 nm. Detektionsgrænsen ved den anvendte metode vurderes til at være 0,5 µg/g jord.

3.3 Resultat og diskussion fra sporstofsforsøgene

3.3.1 Farvede bioporer og andre præferentielle strømningsveje

I de følgende afsnit beskrives de farvede strømningsveje, der er fundet i de udførte feltforsøg, herunder fordelingen af bioporer og farvede bioporer, sprækker samt andre farvede strømningsveje.

3.3.1.1 Bioporer

I forsøg A er der talt bioporer i hele profilets bredde i otte dybder (Tabel 3.2). Fra 50 cm's dybde blev de blåfarvede porer ligeledes talt. I forsøg B blev antallet bioporer og blå bioporer større og mindre end 3 mm registreret i otte dybder (Tabel 3.3). Tællingerne i forsøg B blev udført i seks sektioner valgt på baggrund af densiteten af blå bioporer i 15 cm's dybde. Sektion 1 repræsenterer et naboområde til drængrøften med blå bioporer tæt på drænet. Sektion 2 repræsenterer drængrøften. Sektionerne 3 og 5 blev udvalgt som eksempler på till, hvor der var få eller ingen farvede bioporer, mens sektionerne 4 og 6 blev valgt på baggrund af relativ høj densitet af blå bioporer. Det viste sig dog, at der kun var i sektion 4 var kontinuerte blå bioporer til større dybde.

Tabel 3.2: Antal af bioporer pr. m² og farvede bioporer pr. m² talt i tillen i forsøg A. Derudover er gennemsnittet (μ) og standardafvigelsen (σ) for antallet af bioporer og farvede bioporer pr. m² i tillen angivet. Kolonnen med overskriften "drængrøft" refererer til antallet af biopore pr. m² i den 0,5 m bredde drængrøft

Dybde (cm)	Interval	Till		Drængrøft Antal
		μ	σ	
		Bioporer pr. m ² †		
15‡	213-480	371	87	360
30	360-720	487	101	680
50	507-987	715	147	453
75	200-613	386	139	628
100	194-508	299	89	453
125	120-480	255	111	147
150	0-267	62	91	13
175	0-187	34	59	0
		Farvede bioporer pr. m ² ‡		
50	0-833	150	181	160
75	0-613	143	125	211
100	0-446	107	138	320
125	0-480	81	90	53
150	0-213	29	26	0
175	0-178	22	16	0

† 5,5 m blev talt i sektioner af 0,5 m; n = 11

‡ 5,0 m blev talt i sektioner af 0,5 m; n = 10

Hvis man sammenholder målingerne af volumenvægtene fra forsøg B i 30 cm's dybde med de talte blå bioporer, er der en tendens til, at det er i området, hvor der er færrest aktive bioporer, at volumenvægten er lavest. Dette kan eventuelt forklares ved, at der i dette område er større porøsitet, hvilket medfører, at vandet kan refordes i matrix, og derfor ikke strømmer i bioporerne. Dette underbygges dog ikke umiddelbart af volumenvægtsprøver udtaget i forsøg C. Det er dog væsentligt i denne anledning at notere, at jorden i denne dybde i forsøg C har en grovere tekstur end i forsøg B, samt at det i felten blev observeret at fordelingen af de blå bioporer i forsøg C adskilte sig fra "klynge-fordelingen" i forsøg A og B.

Tabel 3.3: Antallet (n) af biopore og farvede biopore pr. m² i forsøg B for 6 sektioner. "%" angiver procentdelen af bioporer med større diameter end 3 mm i forhold til det totale antal bioporer pr. m². Sektion 2 er drængrøften, her markeret med en stjerne.

dybde (cm)	Sektion											
	1		2*		3		4		5		6	
m ²	n	%	n	%	n	%	n	%	n	%	n	%
	Bioporer pr.											
15	497	10	627	8	287	2	400	3	256	0	497	0
30	864	14	673	23	417	3	847	12	253	26	864	7
50	807	29	747	12	956	9	1089	18	727	28	807	18
75	553	36	527	15	653	38	1114	30	740	33	553	58
100	585	21	520	37	633	21	648	26	473	40	585	27
125	500	23	281	0	419	14	450	15	526	3	500	10
150	500	10	550	0	217	3	430	5	227	0	500	0
	Farvede bioporer pr. m ²											
15	63	27	53	51	20	35	100	13	0	0	56	0
30	88	27	147	41	42	0	227	18	0	0	60	12
50	53	25	360	9	11	0	322	16	0	0	0	0
75	87	31	173	4	0	0	152	57	0	0	0	0
100	59	37	160	42	0	0	48	100	0	0	8	0
125	50	0	59	0	0	0	58	29	0	0	33	21
150	42	0	330	0	0	0	150	13	53	0	40	0

I begge forsøg var antallet af bioporer pr. m² ofte maksimalt i 50 cm's dybde. I forsøg B var antallet af farvede porer også maximalt i denne dybde i sektionerne med flest farvede bioporer (sektion 2 og 4). Dette indikerer, at der under pløjelaget findes ældre porer, der er afskåret fra overfladen, formentlig på grund af at jordbearbejdningen i de øvre lag bryder makroporenes kontinuitet. I en model som Daisy 2D bør det derfor som minimum være muligt at indsætte makroporer, der starter ved overfladen, såvel som makroporer, der starter under pløjelaget.

Af Tabel 3.2 og Tabel 3.3 fremgår det endvidere, at der ikke er flere farvede bioporer pr. m² i drængrøften, end der er fundet i dele af tillen, men i modsætning til fordelingen i tillen, hvor der i store områder ikke blev fundet blå bioporer er der fundet blå bioporer i og ved drængrøften i alle tre forsøg. I modsætning til de to første drængrøfter fremstod drængrøften ikke blå i forsøg C. I dette forsøg blev der i den undersøgte del af drængrøften kun fundet nogle enkelte bioporer, der havde kontakt med både jordoverfladen og indirekte med drænet. På trods af, at der ikke var så omfattende farvning af drængrøften i forsøg C som i A og B, var jorden omkring drænrøret tydeligt farvet af Brilliant Blue. Når dette sammenholdes med, at der netop i forsøg C blev konstateret omfattende transport af sporstof i drænet (se nedenfor), må vi konstatere, at volumen af farvet jord i drængrøften ikke afspejler omfanget af sporstoftransport til drænet.

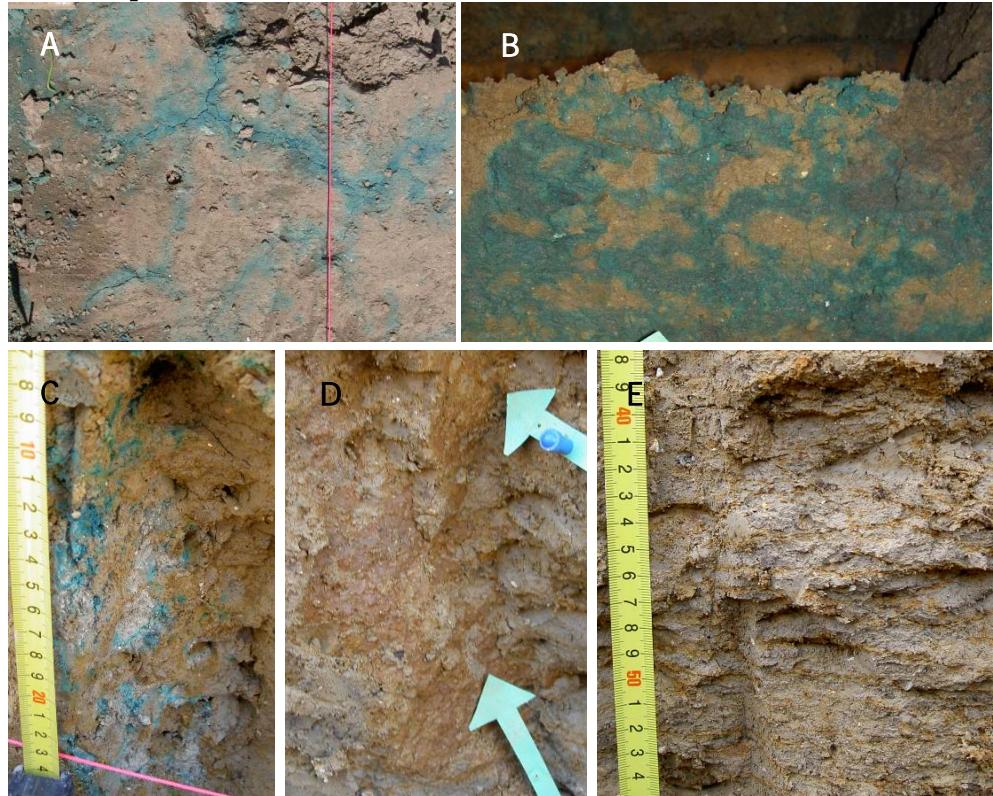
Det blev observeret, at de blå bioporer uden for drænet i forsøg A og B oftest blev fundet i klynger, hvilket kan simplificeres til, at der enten var mange blå bioporer i et område, og ellers var der slet ingen. Ofte blev disse klynger af blå bioporer videreført i sprækker under kalkgrænsen. I modsætning til i forsøg A og B blev de farvede porer i forsøg C ikke fundet i klynger, når der var en E-horisont, men derimod som "individuelle" porer. Når strømmingen af Brilliant Blue kom under ca. 30 cm's dybde i forsøg C, strømmede det farvede vand i flere tilfælde ud i blandt andet rodnetværk. Ofte stoppede farvetegningen her, men i flere tilfælde strømmede det farvede vand videre i individuelle bioporer, hvor farvningen af siderne langsomt blev mindsket. I få porer endte farvningen i udtørningsprækker over kalkgrænsen.

Endvidere var der flere blå bioporer i sektionen med fleste blå bioporer i forsøg A sammenlignet med antallet i sektionen med flest blå bioporer i forsøg B. Et forhold der evt. kan være betydningsfuldt i forhold hertil, er forskellen i fugtighed. Dette underbygges af, at det i Rosenbom et al., (2008) blev fundet, at kun bioporer med forbindelse til andre makroporesystemer blev tændt i efteråret, mens der i en sommersituation også blev fundet farvede bioporer, der endte i matrix. Forskellen blev her forklaret ved, at bioporer, der ender i matrix i en nær-mættet profil (om efteråret), vil have tendens til at være fyldt med vand, hvorved der ikke vil være mulighed for nedtrængning af mere vand fra f.eks. sporstofforsøg, dog skal det noteres at denne forskel i fugtighed ikke blev målt med neutronproben i nærværende forsøg.

Under kalkgrænsen blev de blå bioporer kun fundet i forbindelser med vertikale sprækker (system 1 og 2), mens der i områder med frost/tø sprækker (system 3) ikke blev fundet nogen bioporer og derfor heller ingen blå bioporer.

Tællingerne af porer med diameter over og under 3 mm indikerer, at der skal være en mulighed for at indføje forskellige diametre af bioporer i makroporemodulet i Daisy 2D (Tabel 3.3). Dette vil primært have betydning for makroporerens kapacitet.

3.3.1.2 Sprækker

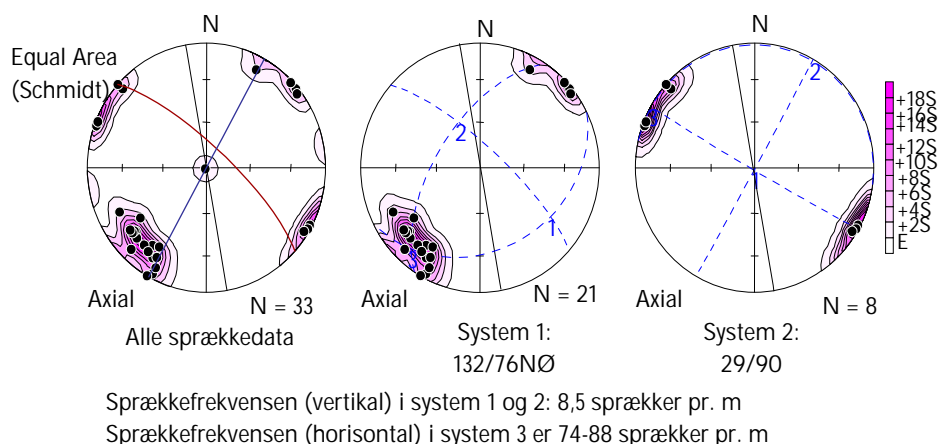


Figur 3.5: A: Udtørningsprækker i overfladen. B: Udtørningsprække/tryksprække over kalkgrænsen i forbindelse med drængrøften C: Formodentlig glaciotekttonisk sprække under kalkgrænsen, med blåfarvede bioporer. Kalken er opløst lokalt omkring sprækken (system 1 eller 2), D: Formodet glaciotekttonisk sprække under kalkgrænsen, kalkrig, (system 1 eller 2). E: Frost-tø sprækker under kalkgrænsen, (system 3).

I forsøg A blev de første blåfarvede sprækker observeret i jordoverfladen. Disse sprækker er udtørningsprækker, der orienterer sig i polygoner (Figur 3.5A). Dybere i profilet er der også fundet blå sprækker over kalkgrænsen. Disse er højst sandsynligt udtørningsprækker (Figur 3.5B). I sprækker, hvor sprækkevæggene er delvist blå, er de født af en blå biopore, hvorfra vandet med farven flyder ud på sprækkefladen. Sådanne farvninger af sprækkevægge er fundet i en horisontal afstand på op til 15 cm fra den blå biopore. Strømningen kan fortsætte til større dybde i bioporer under kalkgrænsen. Disse strømningsaktive biopore er altovervejende lokaliseret i sprækker (Nielsen et al., 2010; Jørgensen et al., 2002).

Under 1,4 m dybde, svarende til under kalkgrænsen, findes tre veludviklede sprækkesystemer i forsøg A. Der er målt hældning/strygning på alle tre systemer og disse er plottet ind i en stereografisk projektion (Figur 3.6). I samarbejde med Knud Erik S. Klint fra GEUS er sprækkesystemerne tolket til at være henholdsvis: System 1: Belastningsprækker f.eks. glacial - systematisk sprækkesystem. System 2: Udtørnings - eller systematiske glaciale sprækker (Figur 3.5C, D kan både være system 1 og 2 sprække, da det i felten ikke var muligt at adskille de to typer). System 3: Horisontale forskydningsprækker, der reaktiveres og udvikles af frost/tø processer (Figur 3.5E).

I forsøg B og C er der fundet udtørings- og system 1 eller 2-sprækker som i Figur 3.5B og C. I forsøg C er der fundet færre farvede sprækker i forhold til i de to første forsøg.



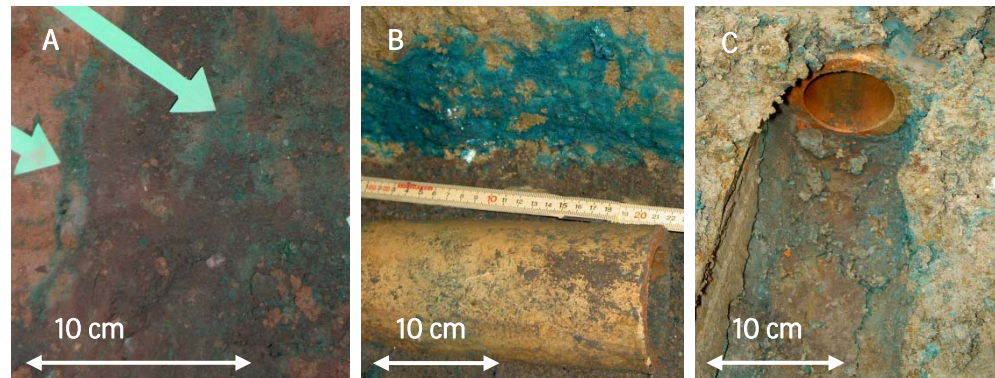
Figur 3.6 Stereografisk projektion af de opmålte sprækker i Forsøg A samt sprækkefrekvenser i systemerne.

På baggrund af ovenstående kan det konstateres at sprækkesystemerne på forsøgsfeltet ikke adskiller sig væsentligt fra sprækkesystemer fundet på andre undersøgte lokaliteter i Danmark af tilsvarende geologisk oprindelse (Pers. Komm. Klint 2007). Sprækkerne under kalkgrænsen var sjældent blå. Når den blå farve blev observeret i denne dybde var det oftest i en biopore i sprækken (Figur 3.5C), hvilket stemmer overens med observationer fra større dybde (Jørgensen et al., 2002)

3.3.1.3 Strømning i drængroften

Ved konstruktionen af dræningssystemet er der dannet nogle særlige strømningsveje i drængrofterne. Disse kan hverken beskrives som bioporer eller sprækker. Strømningen finder derimod sted på grænsen mellem forskellige fyldmaterialer, der i tilfældig rækkefølge er benyttet til at fylde grøfterne op med, efter endt drænedlæggelse, f.x på grænsen mellem materiale fra en gammel organisk-rig A-horisont og materiale fra B-horisonten (Figur 3.7A). Dette viser med alt tydelighed at drængroften er langt mere heterogen også med hensyn til strømningsvejene end den øvrige mark. I forsøg A og B er det i høj grad disse strømningsveje, der får drængrofterne til at fremstå som kraftigt farvede, og de bør derfor ikke ignoreres i tolkningen af strømninger og stoftransport til dræn generelt. I forsøg C blev denne type strømningsveje ikke fundet med farve.

På væggen mellem drængørft og till og i vertikale tryksprækker, der formentlig er dannet i forbindelse med drænedlæggelsen på grænsen mellem drængørft og till, er det endvidere fundet Brilliant Blue i dybden omkring drænrøret i forsøg B og C (Figur 3.7B). Endvidere er der i hulrum og små tryksprækker omkring drænrørene (Figur 3.7C) fundet Brilliant Blue i alle tre forsøg. Kombinationen af disse strømningsveje med de vertikale bioporer udgør således veludviklede kontinuerede strømningsveje, der kan lede vandet mere eller mindre direkte til dræn.



Figur 3.7. A: Farvet strømningsvej mellem A og B horisont materiale (Forsøg A og B). B: farvning af væggen mellem till og drængørft (forsøg B og C). C: Farvning i tryksprækker på undersiden af drænrøret (Forsøg A, B og C). Understregningen angiver i hvilket forsøg billedet er taget

3.3.2 Modelkoncept

Observationerne af de blåfarvede strømningsveje i de tre forsøg er lagt til grund for makroporemodul i Daisy 2D.

Observationerne og tællingerne i felten viste, at det kun var i drængørften, der blev fundet kontinuert strømningsveje, der ledte farvestof og vand fra overfladen til drænrøret. For at simulere forholdene under en kraftige nedbørshændelse, er det nødvendigt i Daisy 2Ds makroporemodul at kunne adskille drængørft fra området mellem dræne. Ved denne opdeling opnår man, at kun makroporer i drængørften kan have afløb direkte i drænrøret. Denne model er valgt, fordi vi i nærværende umættede forsøg ikke fandt, at de horisontale præferentielle strømningsveje bidrog til transporten til dræn. Endvidere er det nødvendigt at simplificere virkelighedens komplekse strømningsveje i drængørften, så de repræsenteres af cirkulære makroporer som i området mellem drængørfterne.

Endelig skal det være mulighed for at indsætte bioporer med forskellige start- og slutdybde. For eksempel skal der kunne indsættes porer med start under pløjesålen jvf. at maksimum i poreantal blev fundet i 50 cm's dybde. Bioporerne skal også kunne ende i matricen i forskellige dybder samt under kalkgrænsen, hvor de kan ende i modellens sprækkedomæne. Derudover skal det være muligt at justere på densiteten af makroporer i forskellige sektioner af den opsatte model og angive forskellige diametre på de angivne bioporer.

3.3.3 Sporstofkoncentrationer

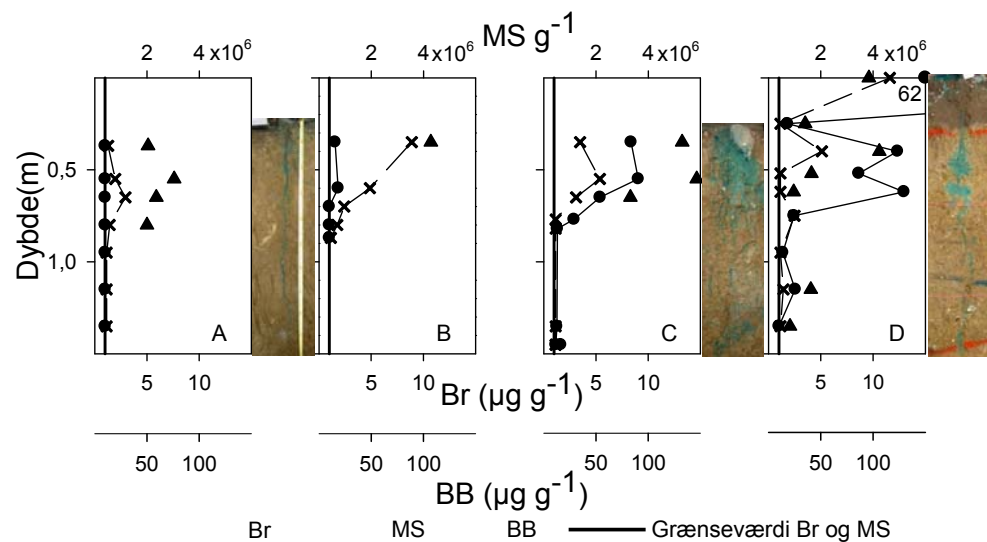
3.3.3.1 Baggrundskoncentrationer

Til brug for baggrundsmålinger af sporstofkoncentrationer i forsøgsområderne blev der udtaget prøver i forskellige typer af ufarvet materiale efter udvandingen af sporstofferne. I forsøg A blev der udtaget 14

prøver fra ufarvet matrix i 6 dybder, hvoraf der blev målt bromid i alle prøver og Brilliant Blue i 10 prøver. Derudover blev der analyseret for bromid i tre prøver fra ufarvede bioporer. I forsøg B blev 8 prøver fra ufarvede sprækker som f.eks. Figur 3.5C og D analyseret for bromid og 6 for Brilliant Blue derudover blev 3 prøver fra matrix bag disse sprækker analyseret for både bromid og Brilliant Blue. Koncentrationerne af både bromid og Brilliant Blue var i alle prøver under detektionsgrænserne. Det betyder at ufarvede prøver, der ikke er udtaget i nærheden af farvede områder er nulprøver. Endvidere blev der ikke fundet MS i jordprøver taget fra marken til brug for standardkurven.

3.3.3.2 Koncentrationen af tre sporstoffer langs strømningsveje i till

De 12 undersøgte bioporer i tillen i forsøg C udviser stor variation i sporstofkoncentration med dybden fra pore til pore. Som nævnt i metodeafsnittet er der en vis usikkerhed på koncentrationerne, men vi vurderer, at det ikke ændrer ved hovedkonklusionerne. Overordnet kan variationen i koncentrationsmønstrene beskrives med udgangspunkt i fire af de undersøgte bioporer (Figur 3.8).



Figur 3.8 Koncentrationerne af MS, bromid (Br) og Brilliant Blue (BB) i fire biopore fra tillen i forsøg C samt fotos af de tilsvarende biopore. Disse fire biopore præsenterer variationen i koncentrationsmønstrene i de tolv undersøgte biopore i tillen samt i de tre blå biopore fra drængrøften der ikke var farvet til drænrørsdybde.

Biopore A repræsenterer koncentrationsprofiler fra tre bioporer i tillen, hvor koncentrationen af MS er lav ofte under detektionsgrænsen, på trods af at bioporen er tydeligt farvet af Brilliant Blue. I biopore A er der et maksimum i koncentrationen af MS og Brilliant Blue i dybdeintervallet 0,5-0,7 m. Dette antyder, at hvis MS stadig findes i det strømmende vand, vil det til en vis grad følge adsorptionsmønstret for Brilliant Blue. Det skal dog noteres at Brilliant Blue sagtens kan farve jorden blå, uden der er tilknyttede MS. Dette ses for eksempel i biopore D i 1,1-1,2 m's dybde.

I biopore B følger koncentrationerne af bromid og MS ikke det samme mønster med dybden. Mens MS er fundet i et relativt stort antal er der kun målt et meget lille indhold af bromid i prøverne. Dette mønster er fundet i fire af de undersøgte bioporer i tillen. Den højeste koncentration er målt i E-horisonten (0,35-0,45 m), hvilket også er tilfældet i biopore C (0,5-0,7 m). Her følger farven ikke en distinkt pore men har en horisontal udbredelse.

Udstrømningen skyldes ikke nødvendigvis kun teksturen, men kan også skyldes et netværk af små rodkanaler.

I modsætning til i biopore B beskriver bromid samme koncentrationsmønster med dybden som Brilliant Blue og MS i biopore C (repræsenterer tre biopore i tillen), mens det i Biopore D er bromid, der som det eneste sporstof har et lokalt koncentrationsmaksimum i tilknytning til E-horisonten (0,6-0,65 m). Biopore C ender på væggen af en udtørringssprække i 1,3-1,5 m dybde. Her er koncentrationen af både MS og bromid mindre end de respektive detektionsgrænser, hvilket korresponderer med den begrænsede farvning, der medførte, at der kun kunne udtages små prøvemængder, hvilket i sidste ende førte til at Brilliant Blue ikke kunne måles.

Den højeste koncentration af MS i disse fire prøver er fundet ved overfladen i Biopore D (repræsenterer to bioporer i tillen). Det skal dog noteres, at koncentrationen af MS næsten er lige så stor i 0,35 m's dybde i biopore B og mindre end hvad der er blevet fundet i udstrømninger i E-horisonten samt i én af de øvrige otte undersøgte bioporer.

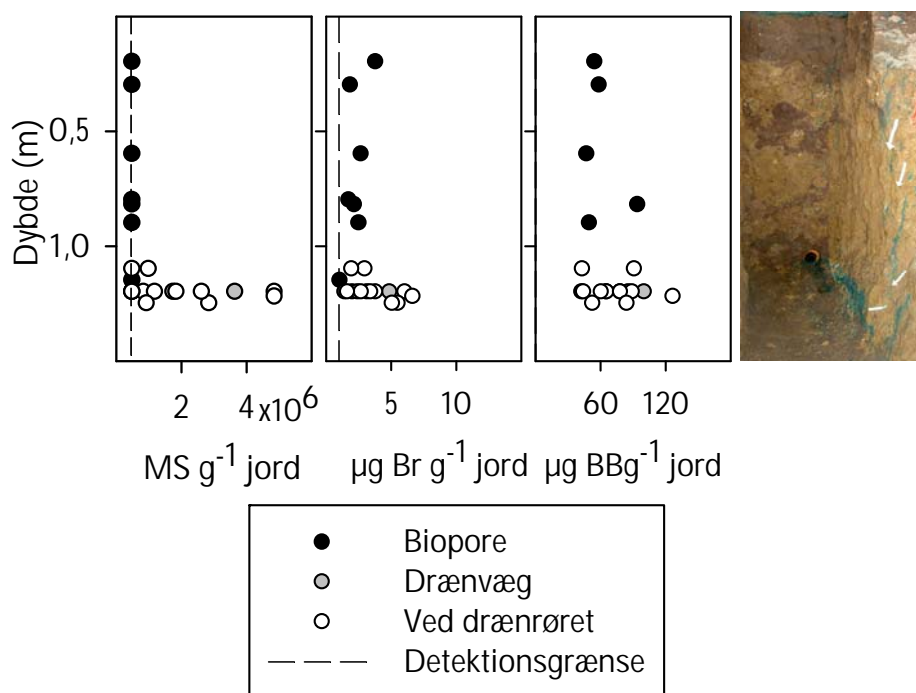
Undersøgelsen af de individuelle bioporer i tillen tyder på, at sporstofferne ofte følger samme koncentrationsmønster i de individuelle porer, når de er målbare. Koncentrationen af MS er ofte associeret med koncentrationen af Brilliant Blue, men Brilliant Blue kan være til stede uden en målbar koncentration af MS. Endeligt er de farvede strømningsveje i dette studie ofte en kombination af vertikale, farvede distinkte bioporer, hvor sporstofs-koncentrationerne er lavere end hvad der blev fundet i de tilknyttede blåfarvede E-horisonter.

En forklaring på dette mønster kan være, at vandet er strømmet hurtigt igennem en biopore i A-horisonten – her afsættes derfor kun små mængder af sporstof - under pløjesålen strømmer vandet ud i f.eks. et rodnetværk, hvilket mindsker vandets hastighed, og fører til, at stofferne absorberes, filtreres, og bromid kan diffundere ind i materialet i større mængder. Herunder kanaliseres vandet videre i enkelte bioporer og koncentrationen af sporstof mindskes yderligere. På baggrund af målingerne i dette forsøg er det ikke umiddelbart muligt at beskrive hvilket stof, der først forsvinder i vandstrømmen i bioporen. Der ses ikke en opkoncentrering i bunden af bioporerne og heller ikke i udtørringssprækkerne.

3.3.3.3 Koncentrationen af tre sporstoffer langs strømingsveje i drængrøften

I drængrøften er der fire farvede bioporesystemer, der når til en større dybde end 35 cm. Men i tre af disse systemer er der ikke nogen farve under 75 cm's dybde (en ligner biopore A og en biopore D i Figur 3.8 og i en tredje stoppede farvningen allerede ved 50 cm).

Det fjerde system bestod af op til 10 farvede bioporer, der var lokaliseret inden for et område med en diameter på ca. 10 cm. Dette område lå på kanten af udgravningen, så det var ikke muligt at afgøre præcis hvilken eller hvilke af bioporerne, der var aktive i transporten af farvestoffet til væggen mellem drængrøften og tillen (Figur 3.9). Derimod er det sandsynligt, at disse porer var de eneste porer, der har bidraget til farvningen omkring drænrøret. I Figur 3.9 udgøres biopore-prøverne af prøver fra to bioporer i denne samling af bioporer. MS over detektionsgrænsen er kun påvist i en af prøverne fra disse bioporer. Koncentrationen af bromid er lav og mindskes fra toppen af jorden og nedefter. Brilliant Blue-koncentrationen er næsten konstant, når der ses bort fra en prøve med høj koncentration i dybden 0,75 m. Dette kunne tyde på hurtig strømning gennem porerne uden mulighed for stofafsætning. Når prøverne er udtaget under 1 m's dybde øges indholdet af sporstoffer 1,5-10 gange afhængigt af type (MS > Br > BB). Prøverne med øget indhold af sporstoffer er udtaget fra væggen mellem drængrøft og till samt langs og under drænrøret. Her har der formentlig været en opstuvning af vand, inden drænet i dette forsøg begyndte at løbe.



Figur 3.9 Koncentrationerne af MS, bromid (Br) og Brilliant Blue (BB) i det bioporesystem i drængrøften i forsøg C, der førte til dræanafstrømning.

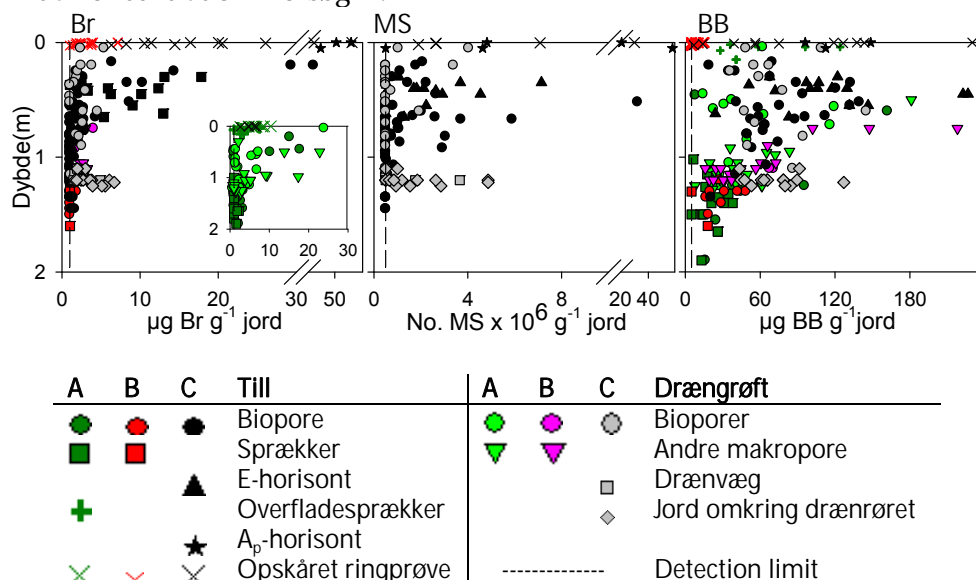
I modsætning til i forsøg A og B er drænet blevet aktiveret på trods af, at der er færre farvede områder i forsøgs C's drængrøft. Den spand, der var sat under drænet 10 m nedstrøms, modtog ca. 2 L drænvand. Koncentrationen af bromid i drænvandet 10 m fra hullet (122 mg/L) var stort set identisk med den initiale koncentration (140 mg/L). Det samme var gældende for koncentrationen af Brilliant Blue, hvor den initiale koncentration var 2,2 g/L, mens der var 2,0 g/L i drænvandet. Der blev fundet 30 gange så mange MS i vandet fra dysserne ($2,8 \times 10^9$ MS pr. L) som i drænvandet ($8,7 \times 10^7$ MS pr.

L). MS i vandet fra dysserne var dog allerede reduceret med en faktor 5 i forhold til den initiale koncentration ($1,34 \times 10^{10}$ MS pr. L). Det vil sige at Brilliant Blue og bromid stort set er strømmet direkte igennem jordsøjlen og ud i drænet, mens MS er blevet filteret. Der er dog stadig en betragtelig mængde MS, der er nået ud i drænsystemet (Nielsen et al., 2011).

3.3.3.4 Sporstofsfordeling med dybden i forsøg A, B og C: Bromid

Med undtagelse af overfladeprøverne er bromidkoncentrationerne i de udtagne blå prøver i forsøg B og C af samme størrelsesorden (Figur 3.10). Det skal dog noteres, at der kun er udtaget blå prøver under 0,8 m i forsøg B. Koncentrationerne i forsøg A kan ikke sammenlignes direkte med koncentrationerne i de to øvrige forsøg da initialkoncentrationen kun var to tredjedel i forhold til forsøg B og C (Figur 3.10 indsat). I alle tre forsøg er der prøver, der har samme koncentration som koncentrationerne målt i de individuelle forsøgs overfladeprøver. De fleste af prøverne med højt indhold af bromid findes i 0,2–1 m. Ved brug af Fisher's exact test er det undersøgt, om der er signifikant flere af prøverne fra tillen end fra drænet, der indeholder mere bromid end 2 gange detektionsgrænsen ($2 \times DG$) i de enkelte forsøg og samlet. I ingen af testene blev der fundet en signifikant forskel mellem dræn- og tillprøver i dybdeintervallet 0,2-1 m.

I dybdeintervallet 1-1,25 m er der et lokalt maksimum i bromidkoncentrationen i alle tre forsøg. Prøverne fra dette dybdeinterval er testet for, om der er signifikant større andel af prøver fra dræn end fra till, der indeholder mere end $2 \times DG$. I modsætning til i dybdeintervallet 0,2-1 m er der i alle tre forsøg signifikant større chance for at udtage en blåfarvet prøve med en Br-koncentration på mere end $2 \times DG$ i drængrøften end i tillen ($p=0,04$ i forsøg A; $p=0,01$ i forsøg B og $p=0,005$ i forsøg C, A, B og C samlet $p=0,000003$). I den samlede test er der ikke taget hensyn til den lavere initialkoncentration i forsøg A.



Figur 3.10 angiver sporstofskoncentrationer i jordprøver mod dybden fra forsøgsarealerne A, B og C. Til venstre vises bromidkoncentrationerne ($\mu\text{g g}^{-1}$ jord) målt i prøver fra forsøgsareal B og C. Bromid koncentrationerne fra forsøgsareal A er indsat i en graf for sig, da forsøgsareal A blev tilført en lavere bromidkoncentrationer end forsøgsarealerne B og C. Den centrale graf viser antallet af MS (No. g^{-1} jord) i jordprøver fra forsøgsareal C. Grafen til højre viser Brilliant Blue-koncentrationerne ($\mu\text{g g}^{-1}$ jord) i jordprøver fra forsøgsarealerne. Når sporstofskoncentrationerne var under de respektive detektionsgrænser, er de afbilledet ved detektionsgrænsen.

3.3.3.5 Sporstofsfordeling med dybden i forsøg C: MS

MS er kun målt i forsøg C. Antallet af MS pr. g jord aftager ikke entydigt med dybden (Figur 3.10). I 25-50 cm dybde er det signifikant ($P=0,007$) større sandsynlighed for at udtage en prøve i tillen med større indhold af MS end $2x_{DG}$, end det er i drængrøften. Med kun 5 prøver i denne dybde i drængrøften er testen dog ikke særlig robust.

I dybden 1-1,25 m er der i modsætning til i 25-50 cm signifikant ($p=0,01$) større sandsynlighed for at udtage en blå prøve i drængrøften med mere end $2x_{DG}$, end det er i tillen.

3.3.3.6 Sporstofsfordeling med dybden i forsøg A, B og C: Brilliant Blue

I alle prøver med materiale nok til Brilliant Blue-måling er der målt Brilliant Blue. Der er en tendens til at till-prøverne bliver underrepræsenteret i forhold til prøverne fra drængrøften, da det kun var muligt at måle Brilliant Blue i 57% af de blå till-prøver mens det var muligt i 86% af de blå drænpøver. Andelen af prøver, hvori der er nok materiale til måling af Brilliant Blue er mindst i till-prøverne fra forsøg A (A 52%, B 83% og C 57%) og drængrøft-prøverne fra forsøg C (A 89%, B 90% og C 78). Der er forskellige årsager til de manglende mængde prøve i A og C. I forsøg A var det ikke meningen, at der skulle måles Brilliant Blue på prøverne; fokus var på forskellige mikrosites' indhold af bromid, hvilket medførte prøvetagning af meget små blå prøver. I forsøg C er manglen på prøvemateriale mere et billede af, at der er indsamlet så meget materiale som muligt, men at det alligevel ikke rakte. Som det fremgår af ovenstående, er det ikke relevant at udføre en Fisher's exact test på forskellen i Brilliant Blue. På Figur 3.10 kan det observeres, at koncentrationen af Brilliant Blue aftager med dybde med et lille lokalt maksimum omkring drændybde. Koncentrationsmaksimummet er ikke lige så tydeligt for Brilliant Blue, som det er for bromid og MS (Figur 3.10).

På baggrund af den visuelle tolkning er det væsentligt at pointere, at udbredelsen og mængden af Brilliant Blue er størst i forbindelse med drængrøften. Koncentrationen af Brilliant Blue i jord kan bestemmes optisk, jf Ewing et al. (1999) og Forrer et al. (2000), hvilket underbygger validiteten af den visuelle tolkning i felten.

Der er således ikke fundet nogen generel sammenhæng mellem indholdene af de tre sporstoffer med dybden. Derimod er der i alle tre forsøg fundet ophobning af sporstoffer i drængrøften i 1-1,25 m dybde. Der er således en opkoncentrering af stof her, som evt. kan frigives ved fremtidige kraftige nedbørshændelser, eller når grundvandsniveauet når drænrøret.

4 Modelbeskrivelse af Daisy2D

4.1 Grundlæggende modelkoncepter

Konceptuelt opdeles jordens vandindhold i tre overordnede domæner:

1. Det primære domæne, i.e. vand i matrix,
2. Det sekundære domæne, i.e. vand i jordens sprækkesystem,
3. Det tertiære domæne, i.e. vand i jordens store makroporer (bioporer).

I det primære domæne beskrives transport af opløst stof vha. advektions-dispersions-ligningen. En væsentlig forudsætning for denne beskrivelse er, at der kan regnes med lokal ligevægt i jordvandet koncentration af opløst stof, dvs. det forudsættes, at der lokalt sker en hurtig udveksling af stof på tværs af middel-strømretningen. I tilfælde hvor vandbevægelsen er langsom, vil denne betingelse ofte være opfyldt. I det sekundære og tertiære domæne vil der normalt ikke opstå lokal ligevægt med den omgivende jord pga systemets struktur. I disse tilfælde regnes med ren advektion.

Stof i jorden (f.eks. sporstof, pesticid eller nedbrydningsprodukt) er til stede i jorden som:

- Opløst stof i de forskellige jordvandsdomæner
- Adsorberet stof på jordmatrixens partikler
- Adsorberet stof på mobiliserede eller mobiliserbare kolloider

4.2 2D Vandtransport

4.2.1 Transport i matrix

I umættet jord påvirkes vand af gravitationskraften og af kapillære kræfter. Strømning i jorden optræder, når jordvandet påvirkes af en resulterende kraft. I klassisk jordfysik beskrives effekten af disse kræfter ved henholdsvis et stedsafhængigt gravitationspotential (h_g) og et tidsafhængigt og stedsafhængigt trykpotential (h_p). Forskellen i potentialer mellem 2 punkter udtrykker i denne teori den energi, der er til rådighed til at bevæge jordvand fra det ene punkt til det andet.

I mættet jord påvirkes vand af gravitationskraften og af trykkræfter. Tilsvarende den umættede situation optræder der strømning i jorden, når jordvandet påvirkes af en resulterende kraft. Igen beskrives effekten af disse kræfter ved henholdsvis et stedsafhængigt gravitationspotential og et tidsafhængigt og stedsafhængigt trykpotential. De 2 situationer kan således beskrives ved en fælles teori, selv om de bagvedliggende kræfter ikke er helt identiske.

I 2D beskrives strømning af vand i jord vha. af en strømningsvektor:

$$\mathbf{q} = (q_x, q_z) \quad (4.1)$$

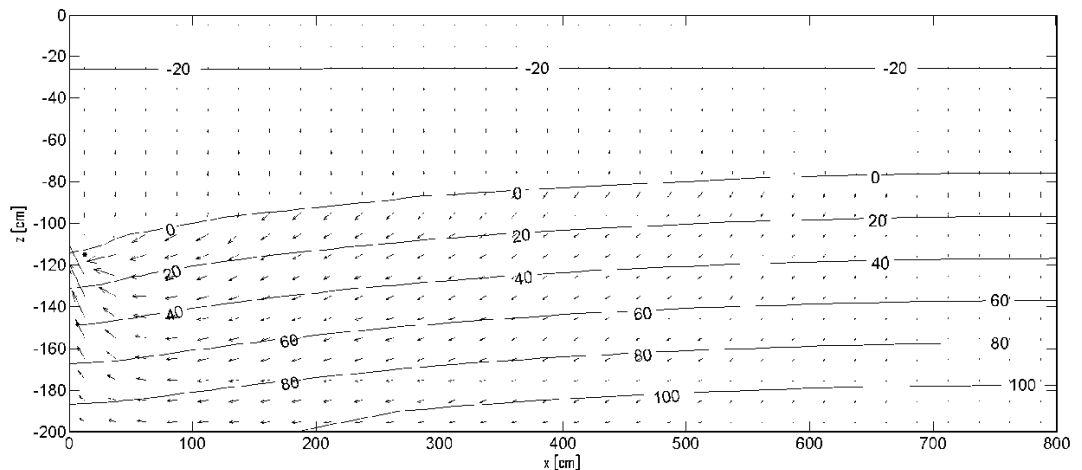
hvor q_x og q_z betegner henholdsvis den vandrette (\mathbf{x} -retningen) og lodrette (\mathbf{z} -retningen) strømningskomponent udtrykt som fluxtætheder [$\text{m}^3 \text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$ eller m s^{-1}]. Figur 4.1 viser equi(tryk)potentiallinier (-20, 0, 20, 40, 60, 80, 100 cm vandsøjle (vs.)) med tilhørende strømningsvektorer. Equipotentiallinien med

trykpotentialet 0 cm vs. svarer til grundvandsspejlet. Dræn er i eksemplet placeret i koordinaten (0,-110). Det bemærkes at strømmingen i den umættede zone primært er nedadgående og strømhastigheden er lille. Under grundvandsspejlet ses i store dele af strømningsfeltet en betydelig vandret komponent samtidig med at strømhastigheden vokser, når vi nærmer os drænet.

Strømningsvektoren kan beregnes vha. Buckingham-Darcy's lov:

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} q_x \\ q_z \end{pmatrix} = - \begin{bmatrix} k_{xx}(h_p) & 0 \\ 0 & k_{zz}(h_p) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial h_p}{\partial x} \\ \frac{\partial h_p}{\partial z} + 1 \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

idet $\partial h_p / \partial z = 1$ og $k_{xx}(h_p)$ og $k_{zz}(h_p)$ [m s^{-1}] er den hydrauliske ledningsevne i henholdsvis x -retningen og z -retningen (der her er regnet positiv opad) ved trykpotentialet, h_p [cm], som her er udtrykt ved en trykhøjde. Den hydrauliske ledningsevne er et mål for jordens evne til at transportere vand. En lille hydraulisk ledningsevne betyder, at der kræves megen energi til at drive vandstrømmen gennem jorden.



Figur 4.1 Equipotential linier (-20, 0, 20, 40, 60, 80, 100 cm vs.) med tilhørende strømningsvektorer. Equipotential linien med trykpotentialet 0 cm vs. svarer til grundvandsspejlet. Dræn er placeret i koordinaten (0,-110).

Kombineres (4.2) med massebevarelse fås Richards ligning:

$$\frac{\partial \theta(h_p)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[k_{xx}(h_p) \frac{\partial h_p}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[k_{zz}(h_p) \frac{\partial h_p}{\partial z} + 1 \right] + \Sigma S \quad (4.3)$$

hvor $\theta(h_p)$ er jordens volumetriske vandindhold ved h_p og ΣS er summen af kildeled [$\text{m}^3 \text{m}^{-3} \text{s}^{-1}$ eller s^{-1}]. S -ledene er positivt for en tilførsel og negativ for en fraførsel og kan omfatte:

- planters vandoptag (beregnes vha. Daisy's generelle funktionalitet),
- drænastrømning (placeret i dræncellen),
- kildeled, der simulerer tilstrømning fra naboer (placeret ved den rand hvor tilstrømningen sker),
- udveksling af vand med makroporedomænet.

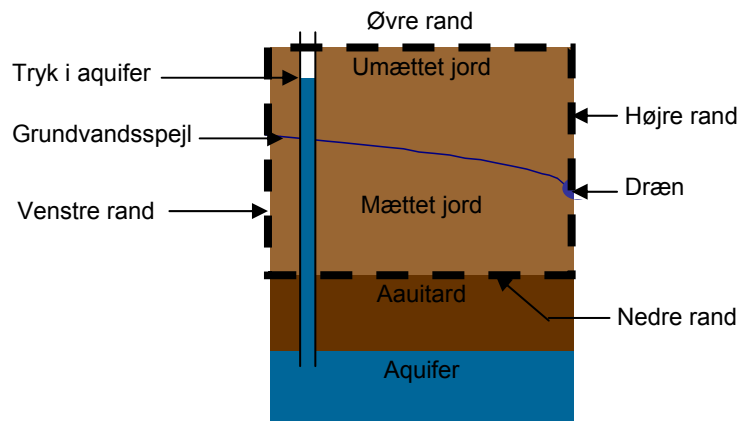
I kombination med een initialbetingelse og fire randbetingelser løses ligning (4.3) numerisk, hvorefter h_p kendes som funktion af tid og rum (t, x, z), og

strømningsvektoren kan beregnes. Figur 4.1 viser en sådan løsning til ligningen til et givet tidspunkt.

Initialbetingelsen beskriver systemets tilstand ved simuleringens begyndelse udtrykt ved θ eller h_p . Ved højre og venstre rand antages det, at der ikke sker strømning hen over randen. I tilfælde, hvor der sker tilstrømning til beregningsområdet fra højereliggende områder gennem højre eller venstre rand, simuleres dette ved at indlægge kildeled (s -termen i (4.3)) ved den pågældende rand. Forhold ved øvre rand bestemmes af vejret (nedbør / fordampning) og simuleres af Daisy's bioklima-modul. Nedre rand kan beskrives enten som en trykrand eller en fluxrand.

For drænedede marker vil nedre rand ofte kunne beskrives ved et grundvandsmagasin, en såkaldt aquifer, der er karakteriseret ved et givet potential i grundvandet. Dette kan eventuelt variere i tid. Denne aquifer vil typisk være overlejret af et lag med lav hydraulisk ledningsevne, en såkaldt aquitard. Dette aquifer/aquitard system, Figur 4.2 kan beskrives i modelkoden.

Selve drænledningen simuleres som et punktdræn, da drænets fysiske udstrækning er beskeden i forhold til strømningsdomænets udstrækning. Drænet aktiveres, når trykpotentialet, i den beregningscelle drænet befinder sig i, bliver større eller lig med nul. Under drænafstrømning antages potentialet i beregningscellen at være lig med 0. Drænafstrømning ophører, når trykpotentialet i beregningscellen bliver negativt.



Figur 4.2. Skematisk fremstilling af aquifer / aquitard system.

Som i Daisy1D er det muligt at vælge mellem typer af randbetingelser for den nedre rand. Der kan enten angives gravitationstrømning, svarende til et dybt beliggende grundvandsspejl, eller der kan angives en trykbetingelse. Trykket kan enten angives på selve randen eller i bunden af en aquitard beliggende under selve randen. Trykbetingelser muliggør, at der er i nogle områder foregår en opadgående vandtransport (f.eks. nær dræn), mens der i andre områder foregår en nedadrettet transport.

Der er også implementeret en øvre randbetingelse, der kan beskrive såvel nedbør som fordampning fra jordoverfladen. Under regnvejr tages der f.eks. hensyn til, om jordens infiltrationsevne er mindre end nedbørsintensiteten. I så fald opmagasineres det overskydende vand på overfladen. Overskrides overfladens magasin kapacitet i et givet punkt, kan vand evt. strømme af til nabopunkter. Sidstnævnte afhænger af hvordan "vandstanden" er fordelt på overfladen.

Jorden er karakteriseret ved sine hydrauliske egenskaber, m.a.o. retentionskurven ($\theta(h_p)$ eller $h_p(\theta)$) og de hydrauliske ledningsevnekurver ($k_{xx}(h_p)$; $k_{zz}(h_p)$ eller $k_{xx}(\theta)$; $k_{zz}(\theta)$). Ved denne beskrivelse anvendes Daisy's almindelige funktionalitet, dvs. alle i jordfysik almindeligt anvendte beskrivelser kan anvendes. Jorden kan opdeles i zoner karakteriseret ved specifikke hydrauliske egenskaber. Der kan eksempelvis specificeres særlige hydrauliske egenskaber for pløjesimal, overfladelag og drængrøft.

En detaljeret teknisk beskrivelse af 2D vandtransport i matricen findes i SAFIR (2009a), Annex 3.1. Her er den anvendte numerik også verificeret.

4.2.2 Transport i sprækkesystemet

Grundlæggende antages det, at vandtransport i sprækkedomænet kan beskrives som en del af transporten i jordens matrice, dvs. ligning (4.2) og ligning (4.3) anvendes, hvorefter løsningen til ligningerne inkluderer den kombinerede transport i matrixdomænet og sprækkedomænet.

Forudsætninger for ovenstående er at:

1. Den anvendte retentionskurve beskriver den samlede retention af jordvand i de to domæner,
2. Den anvendte hydrauliske ledningskurve repræsenterer jordens evne til at lede vand i begge domæner.

Yderligere antages det, at sprækkedomænet kan beskrives ved et simplificeret sprækkesystem, som karakteriseres af en sprækkeapertur med tilhørende karakteristisk sprækketæthed.

Generelt har jordens sprækkesystem aperture, der er så små, at de besidder kapillaritet, dvs. sprækkedomænet besidder retentionsevne. Ydermere gælder, at sprækkeporøsiteten normalt kun udgør en lille fraktion af den samlede porøsitet og således kun har ringe indflydelse på retentionskurven. Ved måling af jordens retentionsevne med almindeligt anvendte målemetoder vil både matrixens retentionsevne og sprækkesystemets retentionsevne almindeligvis bidrage. Følgelig vil retentionskurven repræsentere den samlede retentionsevne i de to domæner.

Pga. den høje grad af kontinuitet i sprækkedomænet giver dette ofte anledning til en betydelig stigning i den hydrauliske ledningsevne ved trykpotentialer, der modsvarer sprækkernes aperture. Antagelsen om sprækkedomænet kan beskrives ved et enkelt sprækkesystem med en enkelt karakteristisk aperture, svarende til et enkelt karakteristisk trykpotential h_a , og med tilhørende sprækketæthed medfører, at hydrauliske ledningsevnefunktioner kan beskrives af bimodale funktioner med en betydelig stigning i ledningsevnen ved et trykpotential, der modsvarer den karakteristiske sprækkeapertur. En fremtrædende retning i sprækkeorientering kan beskrives ved anisotropi i den hydrauliske ledningsevne (variation i $k_{xx}(h_p)$ og $k_{zz}(h_p)$ i henholdsvis \mathbf{x} -retningen og \mathbf{z} -retningen).

Efter løsningen af ligning (4.3) giver ligning (4.2) den samlede vandflux i det kombinerede matrix- og sprække-domæne. Hvis strømmingen foregår ved potentialer under det trykpotential, der modsvarer sprækkedomænets karakteristiske aperture, h_a , antages det at al strømning foregår i matrixdomænet. I modsat fald fordeles strømfluxen efter nedenstående nøgle:

$$\begin{pmatrix} f_x \\ f_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \min \left\{ 1, \frac{k_{xx}(h_a)}{k_{xx}(h_p)} \right\} \\ \min \left\{ 1, \frac{k_{zz}(h_a)}{k_{zz}(h_p)} \right\} \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

og følgelig:

$$\mathbf{q}_f = \begin{pmatrix} q_{f,x} \\ q_{f,z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-f_x \\ 1-f_z \end{pmatrix} \mathbf{q} ; \quad \mathbf{q}_m = \begin{pmatrix} q_{m,x} \\ q_{m,z} \end{pmatrix} = \mathbf{q} - \mathbf{q}_f \quad (4.5)$$

hvor \mathbf{q}_f og \mathbf{q}_m er strømningsvektoren i henholdsvis sprække- og matrix-domænet.

4.2.3 Transport i makroporesystemet

Makroporedomænet består primært af vertikalt orienterede bioporer uden betydende kapillaritet (jf. kap. 2 og 3). Dette domæne beskrives ved at introducere et antal makroporeklasser (se kap. 3). Hver klasse er karakteriseret af:

- Makropore-(klasse)-apertur,
- Makropore-(klasse)-porøsitet,
- Dybden, hvor makroporeklassen begynder,
- Dybden, hvor makroporeklassen ender,
- Hvordan makroporeklassen ender:
 - I drænrør,
 - I jordmatricen.

Hver makroporeklasse fordeles i x -aksens retning. Heraf følger som for de hydrauliske egenskaber, at jorden kan opdeles i zoner karakteriseret af særegne egenskaber, dvs. der kan tages særligt hensyn til en eventuel drængroft og til hvorvidt makroporerne er i kontakt med jord med eller uden sprækkepermeabilitet.

Modellering af makroporestrømning består af følgende trin:

1. Aktivering af makroporestrømning,
2. Estimation af den hastighed hvormed aktive makroporer fødes,
3. Estimation af den hastighed hvormed aktive makroporer tømmes,
4. Estimation af vandbalance for aktive makroporer,
5. Estimation af trykpotentiale i aktive makroporer,
6. Deaktivering af føddning af aktive makroporer.

Ad. 1. For at vand skal strømme ind i en makropore, der ikke besidder kapillaritet, skal trykpotentialet i den omgivende jord principielt overskride 0 cm vs. Af modeltekniske årsager antages det, at det er tilstrækkeligt at trykpotentialet overskrider et negativt trykpotentiale tæt ved det teoretiske grænsepotential (0 cm vs.). Det reelle grænsepotential er en modelparameter, der typisk estimeres som $h_{p,\text{lim}} = -0.5 \Delta z$, hvor Δz er højden af den numeriske celle.

Ad. 2. Ved beregning af tilstrømningen til en makropore betragtes denne som en brønd. Dvs. tilstrømningen afhænger af trykpotentialet og den hydrauliske ledningsevne i det område af jorden, der føder makroporen, samt af makroporetrykpotentialet i makroporen.

Ad. 3. Den fyldte del af en makropore tømmes med en hastighed, der afhænger af makroporetrykpotentialet i tømningssonerne. Ydermere afhænger tømningshastigheden af trykpotentialet og den hydrauliske ledningsevne i den omgivende jord, herunder en særlig modstand, der afspejler makroporevæggens hydrauliske egenskaber.

Ad. 4. Strømhastigheden i aktive makroporer regnes stor i sammenligning med de hastigheder, hvormed makroporerne henholdsvis fødes og tømmes. Dvs. at man tilnærmelsesvis kan regne med at makroporer momentant fyldes fra bunden. "Vandstanden" i en makropore beregnes ud fra en simpel vandbalance på makroporen, dvs. at forskellen mellem tilstrømning og tømning bestemmer magasineringen i makroporen og dermed "vandstanden".

Ad. 5. Makroporetrykpotentialet i en aktiv makropore varierer med dybden, idet det regnes proportionalt med afstanden fra "vandstanden". Over "vandstanden" er makroporetrykpotentialet negativt (proportionalitetsfaktor -1) og under "vandstanden" er det positivt (proportionalitetsfaktor 1). Makroporetrykpotentialet kan dog aldrig blive lavere end det kritiske trykpotentiale, der deaktiverer tilstrømningen (punkt 6).

Ad. 6. Tilstrømning til en makropore deaktiveres, når trykpotentialet i en fødezone kommer under en given kritisk grænseværdi (modelparameter).

Makroporedomænet udveksler vand med matrix-sprækkedomænet gennem S -termene i ligning (4.3). For at opnå numerisk stabilitet er makroporemodellen fuldt integreret i den numeriske løsning til (4.3). En detaljeret teknisk beskrivelse af modellen findes i SAFIR (2009a), Annex 3.1.

4.3 2D stoftransport

4.3.1 Transport i matrix

Opløst stof transporteres i jord med vandet (advektion). Transport i vandet (diffusion) er normalt af ringe betydning. Da den transportaktive del af jordens poresystem er meget uregelmæssig både i størrelse og form, giver transporten i poreskala anledning til meget forskellige transporthastigheder i forskellige dele af poresystemet og dette giver anledning til opblanding af vand med forskellige koncentrationer af opløst stof. Ved en fuldstændig opblanding kan dette fænomen beskrives ved dispersion, der er en analog proces til diffusion. I mange tilfælde er opblandingen ikke fuldstændig, men kun delvis. For at beskrive disse tilfælde opdeles jorden typisk i domæner, der behandles individuelt og som udveksler opløst stof med hinanden.

Transport af opløst stof i jordmatrix domænet beskrives i 2D vha. en transportvektor:

$$\mathbf{J}_m = (J_{m,x}, J_{m,z}) \quad (4.6)$$

hvor $J_{m,x}$ og $J_{m,z}$ betegner transporten i henholdsvis den vandrette (\mathbf{x} -retningen) og lodrette (\mathbf{z} -retningen). Transporten udtrykkes som fluxtætheder [$\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$]. Transportvektoren kan beregnes som:

$$\mathbf{J}_m = \begin{pmatrix} J_{m,x} \\ J_{m,z} \end{pmatrix} = - \begin{bmatrix} D_x & D_T \\ D_T & D_z \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial C_m}{\partial x} \\ \frac{\partial C_m}{\partial z} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} q_{m,x} \\ q_{m,z} \end{pmatrix} C_m \quad (4.7)$$

hvor D_x , D_z og D_r er den effektive longitudinale dispersions-koefficient i henholdsvis x -retningen og z -retningen samt den effektive transversale dispersionskoefficient [$m^2 s^{-1}$]. Tilsvarende er $q_{m,x}$ og $q_{m,z}$ henholdsvis den vandrette (x -retningen) og lodrette (z -retningen) strømningskomponent i det mobile vand udtrykt som fluxtætheder [$m^3 m^{-2} s^{-1}$ eller $m s^{-1}$] og C_m er koncentrationen af opløst stof i det mobile vand i matrixdomænet [$kg m^{-3}$]. Det bemærkes, at der her regnes med fuld opblanding i domænet.

Kombineres (4.7) med massebevarelse for opløst stof i det mobile vand fås advektions-dispersions ligningen (AD-ligningen):

$$\frac{\partial \theta_m C_m}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_x \frac{\partial C_m}{\partial x} + D_r \frac{\partial C_m}{\partial z} - q_{m,x} C_m \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_z \frac{\partial C_m}{\partial z} + D_r \frac{\partial C_m}{\partial x} - q_{m,z} C_m \right] + \Sigma \Gamma_m \quad (4.8)$$

hvor θ_m er jordens volumetriske indhold af mobilt vand og $\Sigma \Gamma_m$ er summen af kildeled [$kg m^{-3} s^{-1}$]. Γ_m -ledene er positive for en tilførsel og negative for en fraførsel og kan omfatte:

- Planteoptag,
- Nedbrydning,
- Produktion,
- Adsorption (momentant eller med kinetik),
- Desorption (momentant eller med kinetik),
- Udveksling med andre domæner (f.eks. vand i sprækker, vand i makroporer).

Planteoptag, nedbrydning, produktion, adsorption, og desorption beskrives ved Daisys eksisterende funktionalitet.

Udveksling mellem domæner beskrives som en simpel lineær proces:

$$\Gamma_{d1 \rightarrow d2} = \alpha_{d1 \rightarrow d2} (C_{d2} - C_{d1}) \quad (4.9)$$

hvor $\Gamma_{d1 \rightarrow d2}$ er overførslen fra domæne 1 til domæne 2, $\alpha_{d1 \rightarrow d2}$ er en overførselskoefficient [s^{-1}], samt C_{d1} og C_{d2} er koncentrationerne af opløst stof i henholdsvis domæne 1 og 2.

Efter at ligning (4.8) er løst, kan stoffluxene af opløst stof i vand bestemmes ved hjælp af ligning (4.7).

4.3.2 Transport i sprækkesystemet

Ved stoftransport i sprækkesystemet regnes udelukkende med advektion, hvorefter den til ligning (4.8) svarende ligning reduceres til:

$$\frac{\partial \theta_f C_f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [q_{f,x} C_f] - \frac{\partial}{\partial z} [q_{f,z} C_f] + \Sigma \Gamma_f \quad (4.10)$$

hvor θ_f er jordens volumetriske indhold af vand i sprækkedomænet, C_f er koncentrationen af opløst stof i sprækkedomænet [$kg m^{-3}$] og $\Sigma \Gamma_f$ er summen af kildeled [$kg m^{-3} s^{-1}$]. Efter at ligning (4.10) er løst, kan stoffluxene af opløst stof i sprækkedomænet udregnes som ren massestrømning ($J_{f,x} = C_f q_{f,x}$ og $J_{f,z} = C_f q_{f,z}$).

Ligning(4.8) og (4.10) løses numerisk som angivet i SAFIR (2009a), Annex 3.1.

4.3.3 Transport i makroporesystemet

Vandtransporten i makroporesystemet vil typisk foregå under turbulent strømning. Derfor antages det at der indenfor hvert tidsskridt sker en fuldstændig opblanding af opløst stof i makroporen. Tilførsel af opløst stof til makroporen antages at ske ved ren advektion, dvs. den bestemmes af vandtilførslen og koncentrationen af opløst stof i det vand, der bidrager til tilførslen.

Tømning af makroporen beskrives også ved ren advektion, hvor koncentrationen af opløst stof antages at være resultatet af ovennævnte fuldstændige opblanding.

4.4 Kolloider

Ved kolloid-faciliteret transport forstås den proces, hvorved et adsorberende stof (f.eks. et pesticid) adsorberes til en jordpartikel, hvorefter denne mobiliseres, dvs. løsrives fra jordmatrix, og derefter transporteres med en vandstrøm ned gennem jordprofilen. Ud over adsorptionen til kolloidet (jordpartiklen) afhænger kolloidfaciliteret transport af følgende delprocesser:

1. Generering af mobile kolloider,
2. Transport af mobiliserede kolloider,
3. Filtrering af mobiliserede kolloider.

Modelleringen af disse tre processer beskrives i det følgende.

4.4.1 Generering af kolloider

Modellering af overflademobilisering af kolloider er behæftet med en betydelig usikkerhed. Vi har derfor valgt at implementere to forskellige beskrivelser, nemlig beskrivelsen i MACRO (Jarvis et al., 1999, Villholth et al., 2000) og en modificeret version af beskrivelsen i MACRO (Baun et al., 2007). Begge modeller er af semi-empirisk natur. Sidstnævnte er lidt mere detaljeret og derfor også mere parametertung.

Fælles for de to beskrivelser er, at de tager udgangspunkt i begrebet "mængden af dispergerbare (bevægelige) partikler" ($\rho_s z_i M_s$):

$$\rho_s z_i \frac{dM_s}{dt} = -\alpha D + R \quad (4.11)$$

hvor ρ_s er jordens volumenvægt (kg/m^3), z_i er dybden af topjorden (også kaldet mixing-dybden), der påvirkes af løsrivelse og dispergering (m), M_s er en massefraktion af dispergerbare partikler (g/g jord), α er den del af partiklerne, der faktisk transporteres væk fra jordoverfladen ($0 \leq \alpha \leq 1$), D er partikelløsrivelsesraten ($\text{kg/m}^2/\text{s}$), og R er raten, hvormed mængden af dispergerbare partikler gendannes ($\text{kg/m}^2/\text{s}$). Ligning (4.11) udtrykker en massebalance på mængden af dispergerbare partikler. I begge beskrivelser afhænger såvel D som R af M_s . Specielt beskrivelsen af D afviger mellem de to modelbeskrivelser. Fælles er, at D afhænger af nedbørsintensiteten. I Baun et al. (2007) kan D afhænge af enten dråbernes kinetiske energi eller dråbernes moment. I MACRO afhænger D af nedbørsintensiteten, den kinetiske energi i nedbøren og af massefraktionen af dispergerbare partikler:

$$D = k_d E P M_s \quad (4.12)$$

hvor P er nedbørsintensiteten (mm/h), $E = 29\{1 - 0,72 \exp(-0,05P)\}$ er et mål for den kinetiske energi i nedbøren og k_d er en "løsrivelses" koefficient (g/l). Fælles for beskrivelserne er også estimeringen af R :

$$R = k_r \left(1 - \frac{M_s}{M_{s,max}} \right) \quad (4.13)$$

hvor $M_{s,max}$ beskriver en max værdi af M_s som systemet vil tendere at bevæge sig imod, og k_r er en "gendannelses rate" koefficient (g/m²/h).

4.4.2 Transport af kolloider

Transporten af kolloider beskrives som omtalt i afsnit 4.3. Øvre randbetingelse er en fluxbetingelse, hvor fluxen er givet ved αD (kg/m²/s). Hvis vandindtrængen foregår i flere strømningdomæner, regnes med samme kolloidkoncentration i det indtrængende vand i de enkelte strømningdomæner.

4.4.3 Filtrering af kolloider

Det antages, at der ikke finder filtrering af partikler sted i bioporedomænet. I matrix- og sprækkedomænerne beskrives filtreringen ved:

$$\Gamma_{fit} = f_c \cdot c \cdot q \quad (4.14)$$

hvor Γ_{fit} er en filtreringsrate (kg/m³/s), f_c er en domæneafhængig filterkoefficient (1/m), q er vandfluxen i domænet (m/s), og c er kolloidkoncentrationen i domænet (g/m³). Γ_{fit} indgår i $\Sigma\Gamma$ i ligning (4.8) og (4.10) for henholdsvis matrix- og sprækkedomænet.

4.4.4 Kolloid-faciliteret transport

Hvert stof der skal transporteres med kolloider, kan optræde i tre former:

- 1) Opløst i jordvand,
- 2) Bundet til jordmatricen,
- 3) Bundet til kolloider.

Modellen holder styr på hvor meget af stoffet, der optræder i hvert af de tre former. Den første og sidste form kan transporteres i alle tre jorddomæner. I forhold til transportligningerne vil stof bundet til kolloider indgå med de samme transportegenskaber som kolloiderne (se afsnit 4.4.2).

Stof kan skifte mellem alle tre former. Det opløste stof er i dynamisk ligevægt med de to adsorbere former. Der er anvendt lineære ligevægtsrelationer:

$$c_s = Kc_l \quad (4.15)$$

hvor c_s er koncentrationen af bundet stof (g/m³) – partikler eller jordmatrix -, c_l er koncentrationen af opløst stof i væsken (g/m³), og K er en ligevægtskoefficient, der er givet som:

$$K = \frac{K_d \rho_b f_e}{\theta} \quad (4.16)$$

hvor ρ_b er jordens volumenvægt (g/m³), K_d er en fordelingskoefficient (m³/g), f_e er en såkaldt berigelsesfaktor, der er forskellig for partikler og jordmatrix ($f_e = 1.0$ for jordmatrix), θ er volumetrisk vandindhold. K_d kan afhænge af jordens indhold af ler og organisk stof (lineær relation). Berigelsesfaktoren udtrykker, at et molekyle af det sorberende stof har en væsentlig større

sandsynlighed for at binde sig til et frit kolloid end til et kolloid bundet i jordmatrix. For ligevægt med jordmatrixen indgår kun vand og stof i det primære domæne. For ligevægt med kolloider indgår vand og stof for det primære og sekundære domæne, og ligevægtsrelationen gælder også for vand i pytter på jordoverfladen.

Modellen regner ikke med adsorption eller desorption i det tertiære domæne.

Kinetiken er bestemt af en adsorptions- og en desorptionsrate, der ikke behøver være ens. De to rater angives selvstændigt for jordmatrixe og for kolloider.

Ved filtrering af kollider flyttes stof fra at være bundet til kolloider til at være bundet til jordmatrixen. Ved generering af kolloider flyttes stof den anden vej. De to transformationer følger kolloiderne. Det vil sige, at hvis 10% af kolloiderne filtreres, vil 10% af det relevante stof i kolloidbundet form skifte til matrixbundet form, og hvis 1% af jordmatrixen bliver frigivet som kolloider, vil 1% af det relevante stof skifte fra matrix til kolloidbundet form.

4.5 2D varmetransport

Modellen for varmetransport bygger på kontinuitetsligningen og tager både varmetransport ved varmeledning og advektion (dvs. varmetransport med vandstrømningen) i regning. Varmetransporten beskrives vha. en vektor:

$$\mathbf{q}_H = \begin{pmatrix} q_{H,x} \\ q_{H,z} \end{pmatrix} = -K_H \begin{pmatrix} \frac{\partial T}{\partial x} \\ \frac{\partial T}{\partial z} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} q_x \\ q_z \end{pmatrix} T \quad (4.17)$$

hvor $q_{H,x}$ og $q_{H,z}$ betegner transporten i henholdsvis den vandrette (\mathbf{x} -retningen) og lodrette (\mathbf{z} -retningen). Varmetransporten udtrykkes som fluxtætheder [W m^{-2}]. K_H er jordens varmeledningsevne [W m K^{-1}], q_x og q_z er henholdsvis den vandrette (\mathbf{x} -retningen) og lodrette (\mathbf{z} -retningen) strømningsskomponent udtrykt som fluxtætheder [$\text{m}^3 \text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$ eller m s^{-1}] og T [K] er jordens temperatur.

Kombineres (4.17) med energibevarelse fås:

$$\frac{\partial C_s T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K_H \frac{\partial T}{\partial x} - c_w \rho_w q_x T \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_H \frac{\partial T}{\partial z} - c_w \rho_w q_z T \right] + \Sigma S_H \quad (4.18)$$

hvor C_s er jordens volumetriske varmekapacitet [J m^{-3}], c_w er vands specifikke varmekapacitet [J kg^{-1}], ρ_w er vands massefylde [kg m^{-3}] og ΣS_H er summen af kildeled [$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$], som redegør for tilførsel og tab af varmeenergi som følge af vandtilførsel (f.eks. drypvanding) og tab af vand (f.eks. planters vandoptag). Jordens volumetriske varmekapacitet og varmeledningsevne afhænger af jordens vandindhold og estimeres på samme måde som i den oprindelige Daisy-kode. En mere detaljeret teknisk beskrivelse af modellen findes i SAFIR (2009a), Annex 3.1.

4.6 Kodeludvikling

4.6.1 Datalogiske principper for modeludvikling

Udviklingen af Daisy begyndte i slutningen af 80'erne som en del af NPO-programmet, og har været i gang med varierende intensitet siden da under mange forskellige projekter. En enkelt omskrivning blev det til i midten af 90'erne. Ved nærværende projekts start var kildekoden til Daisy på knap 100.000 linier, hvilket er ti gange mere end den oprindelige version fra 1990. Daisy kan simulere ca. 100 forskellige processer med dobbelt så mange modeller.

Alt dette repræsenterer en kompleksitet, som det er en udfordring at holde styr på. En tommelfingerregel er, at man med brug af struktureret programmering kan holde styr på et program på ca. 10.000 linier kode, hvis man er godt inde i det. Dette var også den oprindelige størrelse af Daisy. Derefter voksede programmet efterhånden som der var behov for udvidelser i forbindelse med diverse projekter, indtil det blev uoverkommeligt at tilføje de nye faciliteter, der var behov for, uden at risikere at ødelægge nogle af de eksisterende faciliteter. Dette er ikke en atypisk udvikling for videnskabelige applikationer, og man ser da også at nogle applikationer deler sig fra samme kerne til projektspecifikke versioner. Det er en måde at reducere kompleksiteten, men gør det vanskeligt for de forskellige projekter at drage nytte af hinandens erfaringer. I midten af 90'erne valgte forskningsnetværket Dina at finansiere en omskrivning af Daisy, baseret på datalogiske principper.

Inden for faget datalogi er der udviklet en række værktøjer til håndtering af kompleksitet. Det vigtigste af disse er "del og hersk" princippet. Hvis det er muligt, kan man prøve at opdele et stort og uoverskueligt problem i en række mindre og overskuelige problemer. For at fungere kræver det, at man kan fokusere på et enkelt delproblem, uden at skulle inddrage viden om de øvrige delproblemer. Princippet kommer til udtryk mange steder inden for datalogien, for eksempel i modulbegrebet. Et modul vil typisk indeholde både data og funktioner, i en simuleringsmodel vil data bestå af oplysninger om systemets tilstand, og funktionerne udgøre en beskrivelse af de processer, der fører systemet fra en tilstand til en anden.

Et enkelt modul vil være beskrevet ved et interface og en implementation. Interfacet er den del, de andre moduler vil kunne se, mens implementationen er den del af modulet, der er skjult for de øvrige moduler. Et godt programdesign efter "del-og-hersk" princippet er således en opdeling af programmet i moduler, hvor interfacet til hvert modul er så minimalt som muligt. Jo mindre interfacet er, jo mindre skal man tage hensyn til de øvrige delproblemer, når man implementerer det delproblem, som det aktuelle modul repræsenterer. "Del og hersk" princippet er ikke det eneste princip, man skal tage hensyn til, når man designer et program. For eksempel skal hvert modul i en simuleringsmodel også helst repræsentere et begreb, der er genkendeligt fra den verden, der simuleres. Ellers bliver der for stor forskel på "sproget" i programmeringsverdenen og i den verden, der bliver modeleret, med tilhørende oversættelsesproblemer. Men "del og hersk" princippet er det, der har direkte at gøre med håndteringen af kompleksitet.

Ovenstående beskrivelse af moduler indeholder to opdelinger, der hver leder til to tricks indenfor datalogien. Den første opdeling er mellem data og funktion. Modulets data varierer gennem programkørslen, mens funktionerne er de samme. Det betyder, at man kan have flere sæt af data fra samme modul

"aktive" på samme tid. Dette trick kaldes objekt-baseret programmering. I Daisy er det netop dette trick, der gør, at man kan regne på to søjler på samme tid. Det er simpelthen to instanser (forekomster) af samme modul, hvor hver instans har sin egen tilstand.

Den formelle skelnen mellem interface og implementation i moduler leder yderligere hen til et af de mest populære trick i datalogiens verden, nemlig at have flere implementationer af det samme interface. I en simuleringsmodel vil det svare til at flere forskellige modelbeskrivelser af den samme fysiske proces. Dette trick kaldes (når det kombineres med objekt-baseret programmering) for objekt-orienteret programmering (OOP), og er i dag langt den mest populære måde at strukturere sine programmer på. Med OOP skifter terminologien også, moduler bliver til klasser, men repræsenterer stadig data og funktioner. Når en klasse bliver instantieret (man laver nyt kopi af klassens data) kaldes instansen et objekt, deraf navnet OOP.

Ved omskrivningen i midten af 90'erne blev Daisy da også designet omkring objekt-orienteret programmering. Når Daisy, som nævnt tidligere, i dag har dobbelt så mange modeller som processer, så skyldes det, at hver proces repræsenteres af et interface, og hver model af en implementation af et sådant interface. OOP tillader således at vi har flere implementationer (modeller) af hvert interface (proces). Et eksempel er transport af vand, hvor man kan vælge mellem en simpel model, hvor hvert lag i jorden har en fast kapacitet, samt en mere kompleks, men fysisk mere korrekt beskrivelse ved Richards ligning. Transport af vand regnes her for en proces, og "fast-kapacitet" og Richards ligning for to forskellige modeller for denne proces. I denne udgave af Daisy kan brugeren vælge hvilken model, han ønsker for en given proces ved at angive navnet på modellen i en opsætningsfil, samt hvilke parametre han ønsker at anvende. For at gøre Daisy anvendelig for folk der ikke lige har alle 100 processer og 200 modeller i hovedet, samt overblikket til at vælge mellem dem, har vi valgt at lade Daisy bruge de modeller, vi generelt har mest tillid til, når brugeren ikke angiver andet.

Dette design, hvor brugeren vælger delmodel, har gjort det muligt for Daisy at vokse i forbindelse med diverse projekter, uden at bryde sammen i kompleksitet eller blive opdelt i flere varianter. De enkelte projekter har ofte enten brug for en ny model til en eksisterende proces, eller for at tilføje en ny proces. For en ny proces vil vi så oftest sørge for at implementere en triviel model, der anvendes, hvor intet andet angives, således at de øvrige processer ikke påvirkes.

Dette design er ikke uden en pris; generelt bruges halvdelen af koden i Daisy på at vedligeholde den fleksibilitet, som er beskrevet ovenfor. En given projekt-specifik funktionalitet vil kunne implementeres dobbelt så hurtigt, hvis man dropper kravet om, at det skulle kunne indgå i den fælles Daisy kode på lige fod med funktionalitet implementeret i forbindelse med andre projekter. Synergien mellem funktionaliteten i de forskellige projekter gør dog, at denne pris i høj grad er værd at betale.

Når man bruger OOP, bliver et nyt princip relevant for designet af programmet, nemlig at hvert modul vælges, så det svarer til de funktioner, man kunne ønske at udskifte. Eftersom man ofte ikke ved det på forhånd, betyder det, at et kontinuerligt redesign af programmet er ønskværdigt, efterhånden som det udvikler sig.

4.6.2 Daisy2D redesign

Udvidelsen af Daisy til at regne i to dimensioner ændrer det grundlæggende design på to punkter.

For det første er geometrien ikke længere blot en lodret opdeling af jorden i numeriske lag. I Daisy var geometrien repræsenteret ved et modul, det vil altså sige et interface med en enkelt implementation. Første punkt ved Daisy2D-omdesignet var at konvertere dette til en klasse med et interface, der var generelt nok til at klare en opdeling af jorden i arbitrære 2D eller 3D polygoner, hvilket skulle fremtidssikre denne. I første omgang blev der så implementeret den klassiske 1D geometri, og en 2D rektangulær geometri. På sigt er det meningen at udvide med en trapez-geometri til f.eks. at modellere kamme.

Det andet punkt var transportprocesserne, der traditionelt var knyttet til de enkelte stoffer, som skulle transporteres, og til omsætningsprocesserne. I forbindelse med Daisy2D projektet var denne opdeling uhensigtsmæssig. I stedet var det en fordel at knytte transportprocesserne tæt til valget af geometri (de modeller man bruger til transport er generelt stærkt geometriafhængige), og samtidig justere omsætningsprocesserne så disse var uafhængige af valget af geometri.

Dette medfører et omfattende restruktureringsarbejde, da næsten alle moduler er påvirket, men også at brugere af 1D Daisy kun vil blive minimalt påvirket, da al 2D arbejdet kommer til at foregå i et separat modul. Kun hvis brugerne har været inde og eksplicit vælge en transportmodel, hvilket hører til sjældenhederne, vil de blive påvirket.

Samtidig betyder det, at hele omsætningsdelen fortsat vil være fælles mellem 1D og 2D Daisy, og at alle forbedringer af denne derfor vil komme brugere af begge geometrimodeller til gode. Det samme gælder generelle forbedringer i programmets "infrastruktur", såsom læsning af opsætningsfiler, generering og behandling af resultatfiler, samt dokumentation.

4.6.3 Numeriske metoder

Transport af vand, varme og opløste stoffer beskrives i Daisy vha. partielle differentialligninger. Der findes analytiske løsninger til transport-ligningerne, men kun for simple tilfælde af konceptuel karakter. Disse lever ikke op til Daisys krav til generalitet, med komplicerede randbetingelser, varierende jordtyper og hvor løsningen af ligningerne er indbyrdes afhængige. Transportligninger skal derfor løses vha. numeriske metoder.

For at løse de aktuelle differentialligninger anvendes oftest en af følgende 3 numeriske metoder: Finite Difference Method (FDM), Finite Element Method (FEM) eller Finite Volume Method. Den eksisterende 1-dimensionelle version af Daisy bygger på FDM. FDM udmærker sig ved at være matematisk simpel og intuitiv. Ulemperne ved FDM er at Neumann (flux) randbetingelser kun approksimeres. Yderligere skal kurvede beregningsnet (for multidimensionale simuleringer) transformeres til ortogonale strukturerede net i kartesiske koordinater. FEM er betydeligt mindre matematisk intuitiv end FDM. Både FEM og FVM udmærker sig ved at kunne benytte komplicerede geometrier og ustrukturerede beregningsnet. I forbindelse med heterogen jord og ikke horisontale jordoverflader anses modellering med FEM eller FVM for at være at foretrække.

I FVM deles domænet (aktuelt 'jordsøjlen') op i et antal kontrolvoluminer. For FVMs vedkommende sikrer overfladeintegraler af fluxe, vinkelrette på kontrolvoluminer, at massebalancen for det transporterede bliver overholdt for hver enkelt kontrolvolumen og dermed automatisk også på globalt niveau.

For at sikre en kobling, hvor eksisterende Daisy komponenter i videst mulig omfang kan benyttes, er der valgt en metode, hvor henholdsvis vandindholdet, temperaturen og opløste stoffer regnes for at homogent fordelt i hver enkelt celle (cellecenteret FVM skema). Dette bevirker, at de nuværende beregningsrutiner i Daisy til beregning af omsætning mm. kan benyttes for hver enkelt celle. Ligeledes kan principperne i Daisys reservemodel for vandtransport benyttes direkte. Reservemodellen tages kun i anvendelse, når løsningen af Richards ligning (transportligning for vandtransport) ikke konvergerer. Ved reservemodellen transporteres vandet - såfremt jorden er tilstrækkeligt våd - vertikalt ned svarende til ren tyngdestrømning (negligerer af kapillære kræfter). For at undgå (netafhængig) lateral strømning kræves der at to af celledsiderne er vertikalt orienterede.

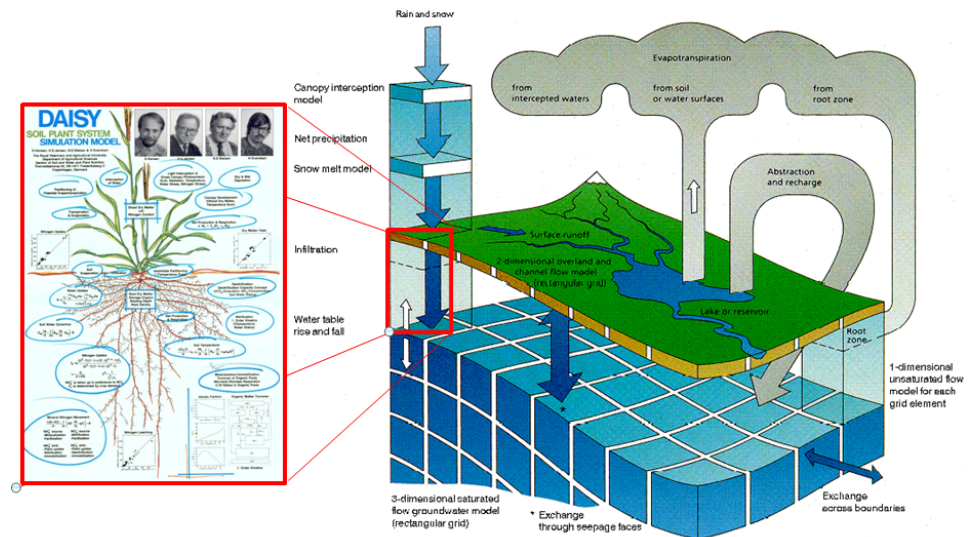
I Daisy beskrives vandstrømningerne i matricen med Richards ligning. For at løse Richards ligning anvendes som tidligere nævnt cellecentreret finite volumen-teknik. For løsningen i tidsdomænet er Backward Euler-skemaet anvendt. Backward Euler anvendes ofte i forbindelse med Richards ligning, hvad enten det drejer sig om finite difference-, finite element- eller finite volumen-koder, da skemaet ud over at være relativt simpelt også er yderst robust. For at overvinde ikke-lineariteterne i Richards ligning er der benyttet Picard iterationer. En nærmere beskrivelse og verifikation af den implementerede numerik findes i SAFIR (2009a), Annex 3.1.

4.6.4 Kobling af Daisy2D og MIKE SHE

MIKE SHE er et hydrologisk modelværktøj baseret på en avanceret, fleksibel ramme for beskrivelse af strømnings- og transport processer på oplandsskala (Graham og Butts, 2006). Det indeholder en fleksibel blanding af avancerede og enkle procesbeskrivelser af de forskellige hydrologiske processer (Butts et al. 2004; Graham & Butts 2006; Butts & Graham 2008), samt en fuld suite af præ-og post-processing værktøjer (Refsgaard & Storm, 1995). MIKE SHE omfatter de vigtigste processer i det hydrologiske kredsløb herunder procesmodeller for fordampning, overfladisk, umættet og grundvandsstrømning, samt strømning i vandløb og deres indbyrdes interaktion. Hver af disse processer kan være repræsenteret på forskellige niveauer af rumlig fordeling og kompleksitet i henhold til de overordnede mål for modelleringsundersøgelsen, tilgængeligheden af feltdata og modellørens opsætningsvalg og antagelser (Butts et al., 2004).

Motivationen til kobling af Daisy og MIKE SHE er at opskalere Daisy-simuleringer fra markskala til oplandsskala. Mens de landbrugsrelaterede processer med Daisy kan beskrives på markskala, foregår vandressource- og vandkvalitetsforvaltning på oplandsskala. For at bestemme effekterne af landbrugets brug af hjælpestoffer (pesticider og næringsstoffer) på oplandsskala, er det nødvendigt at vurdere virkningerne på kvaliteten af både drænvand, grundvand og overfladevand. Vandets veje igennem jord til recipienter via grundvand og igennem dræn-systemer skal beskrives. Den valgte fremgangsmåde er at koble Daisy modellen til MIKE SHE, en oplandsskala hydrologisk model.

MIKE SHE er blevet bredt anvendt i mange hydrologiske regimer og for mange forskellige vandressourcer og miljømæssige problemstillinger, lige fra rensning af grundvand og overfladevand, forurening fra affaldsdepot, afvandingsområdeplanlægning, flodslette undersøgelser og virkningen af arealanvendelse samt klimaændringer på vandressourcerne. En nyere oversigt over offentliggjorte applikationer kan findes i Graham & Butts (2006), sammen med en oversigt over modellen. En mere detaljeret beskrivelse findes i modellens brugervejledning (DHI, 2011).



Figur 4.3. Kobl ing af Daisy og MIKE SHE hvor hver søjle i MIKE SHE's umættede zone erstattes af en ækvivalent Daisy-søjle

Den konceptuelle model af en typisk net-baseret MIKE SHE model, er vist i Figur 4.3. Strømningsprocesser i vandløb og kanaler er repræsenteret ved et en-dimensionelt vandløbsnetværk, strømning på land er repræsenteret i to dimensioner. Strømning igennem den umættede zone er repræsenteret som en én-dimensionel vertikal strømning, og grundvandsstrømning er enten to- eller tre-dimensionel. Da MIKE SHE og Daisy begge simulerer vandstrømning og transportprocesser i den lodrette umættede jordkolonne, er kobling mellem de to modeller opnået ved at erstatte hver kolonne i MIKE SHE's repræsentation af umættede zone med en Daisy model for den pågældende kolonne, som vist i Figur 4.3.

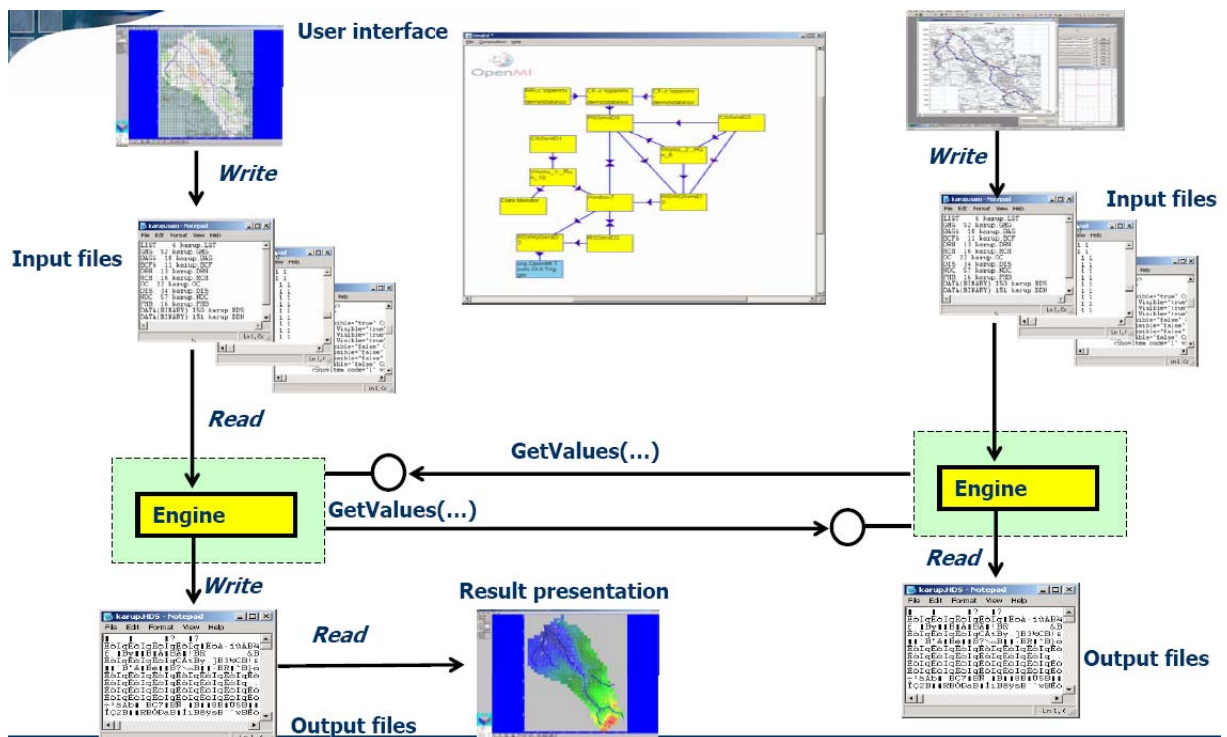
Kobling er baseret på OpenMI (Open Modelling Interface) dvs. et åbent modelleringsinterface (Gregersen et al., 2007). MIKE SHE og Daisy er udviklet af forskellige organisationer og i forskellige udviklingsmiljøer. Generelt ville kobling af sådanne modeller være nemt eller svært, afhængig af den underliggende arkitektur. For de fleste modelsystemer ville dette kræve adgang til den bagvedliggende kode. OpenMI er udviklet inden for vandsektoren lige netop med det formål at kunne forbinde modelkomponenter fra forskellige oprindelser.

OpenMI blev oprindeligt udviklet under EU-projektet HarmonIT med det formål at tillade kobling af vandrelaterede modeller. Formålet med OpenMI er, at gøre det lettere at koble hydrologirelaterede modeller ved hjælp af et standardiseret sæt af interfaces, der udveksler data på tidsbasis. Da de fleste

eksisterende modeller ikke er forberedt til at udveksle data på tidsskridtsbasis, er det oftest nødvendigt at modificere de modelkoder, der ønskes forberedt til OpenMI med hensyn til (Graham et al, 2006):

- At tidsskridtsstyringen og perioden, som modellen skal simulere skal kunne styres udefra.
- At der skelnes mellem model-initialisering og tidsskridtsløkker, og
- Der gives adgang til interne tilstandsvariable og parametre.

OpenMI er en arkitektur, der består af koblede komponenter, der udveksler data på en forud defineret måde, i et forud defineret format (Figur 4.4). Arkitekturen er defineret sådan, at en koblet komponent kun reagerer på én forespørgsel ad gangen. Dataudveksling sættes i gang af en "GetValue"-forespørgsel. Modellen, der modtager forespørgslen, skal derefter udlevere de data, der er spurgt om. Dette gør systemet meget fleksibelt, fordi den komponent, der spørger, ikke har nogen krav til, hvordan de data, den modtager, er opnået. Det er udviklerens ansvar at sikre, at de relevante data kan leveres, når der bliver spurgt om dem. Anmodningen sendes simpelt fra en modelkomponent til en anden, og modtageren skal derefter svare – med en aktuell værdi, en interpoleret værdi eller en ekstrapoleret værdi.

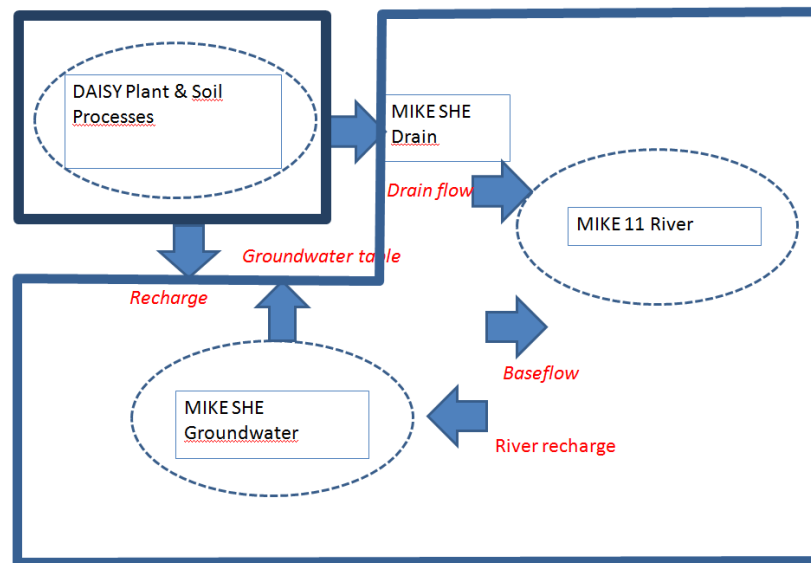


Figur 4.4. Oversigt over interaktionen mellem to modeller (grundvand og vandløb). OpenMI-koblingen foregår kun mellem modellerne "motorer" (Graham et al, 2006).

Den store fordel ved OpenMI er, at modeller kan kobles uafhængigt af deres underliggende arkitektur. Det eneste krav er, at modellerne skal modificeres for at overholde OpenMI's udvekslingsprotokoller, (Gregersen et al., 2007). Understøttelse af OpenMI i MIKE SHE og Daisy blev implementeret som del af SAFIR projektet (<http://www.safir4eu.org/>). I nærværende projekt er koblingen mellem MIKE SHE og Daisy yderligere udviklet og afprøvet.

Vandudvekslingsprocesser mellem Daisy og MIKE SHE er vist skematisk i Figur 4.5. Grænsefladen blev valgt så nedre rand for Daisy svarer til øvre rand for MIKE SHE.

Daisy leverer perkolation og drænaftstrømning samt udvaskning af pesticider igennem jord og i dræn gennem den fælles rand til MIKE SHE. MIKE SHE leverer hydraulisk tryk samt koncentration af pesticider ved den fælles rand til Daisy. Hver celle i MIKE SHE's overfladegrid er koblet til en separat Daisy-søjle. En nærmere teknisk beskrivelse af kobling findes i SAFIR (2009b), afsnit 3.4. Tidligere har Daisy og MIKE SHE været kørt sammen var med en sekventiel kobling uden feedback fra grundvandet og floden til rodzonen, Hansen et al. (2007).



Figur 4.5. Udveksling mellem Daisy, MIKE SHE og MIKE 11.

Hovedlinjen i de nye modeludviklinger i denne undersøgelse er implementering og evaluering af et nyt model koncept (afsnit 2.3) for præferentiel strømning og transport i store biopores samt udviklingen af en omfattende model for strømning og pesticid transport for de øverste 1-2 m jord der inddrager bioporer, sprækker, markdræn og kolloidfaciliteret transport. Biopore modelkonceptet som er implementeret her, er i overensstemmelse med arbejdet i Tofteng et al. (2002) og Fox et al. 2004. Forfatterne til denne rapport kender ikke andre modeller, der bruger denne fremgangsmåde.

Der eksisterer andre formuleringer af præferentiel strømning og transport. F.eks. findes der mange modeller af bioporer og / eller sprækker, der bygger enten på en dobbelt porøsitet konceptuel model eller adskilte (diskrete) repræsentationer af de enkelte bioporer eller sprækker til at modellere præferentiel strømning og transport. Men at repræsentere flow og transport processer i de øverste 1-2 m jord som er påkrævet for denne undersøgelse, herunder både sprække og biopores, markdræn og kolloidfaciliteret transport ville kræve betydelige ændringer af eksisterende dobbelt porøsitet koder. En fuld 3D adskilt repræsentation af de enkelte biopores og sprækker er et andet alternativ. Dette vil dog kræve en detaljeret 3D-fysisk repræsentation af

sprække og biopore geometrier samt deres flow og transport egenskaber for at opnå en korrekt formulering af problemstillingen.

Det vigtigste mål i dette arbejde har dog været at udvikle og evaluere nye koncepter, velegnet til anvendelse ved praktisk pesticidforvaltning og grundvandsbeskyttelse. Fremfor at udvikle en detaljeret tre-dimensionel adskilt (diskrete) sprække og biopore model baseret på eksisterende koncepter, hvor det ville være vanskeligt at repræsentere og parameterisere en sådan model, selv for eksperimentelle felt sites, har vi valgt at fokusere på at udvikle og evaluere nye metoder. For det første at udvikle og evaluere et nyt model koncept, der udnytter de eksisterende styrker i Daisy-modellen og som ved hjælp af en- og to-dimensionelle tilnærmelser kan reducere simuleringstiden. For det andet at udvikle og evaluere en ny, men enkel tilgang til opskalering af disse nye model koncepter udviklet til de øverste 1-2 m af jorden til oplandsskala, ved at koble Daisy-modellen til MIKE SHE. På denne måde forsøger vi at fange de væsentlige elementer i strømning og pesticid-transport problemet på en beregningsmæssigt effektiv måde.

5 Modelopsætning og parameterisering

En detaljeret gennemgang af modelopsætning kan findes i de to bilag, "Daisy 2D simulation of Silstrup and Estrup", samt "Daisy 2D simulation of Rørrendegård". I dette kapitel vil de vigtigste parametre blive beskrevet.

5.1 Vejr

Modelsimuleringerne drives af timeværdier af globalstråling, lufttemperatur, luftfugtighed (damptryk eller relativ fugtighed), vindhastighed og nedbør. Fordampningsberegningerne er baseret på den af FAO anbefalede metode til beregning af referencefordampning (Allen et al., 1998) og den i Daisy implementerede metode til beregning af vandoptagelse og aktuel fordampning (Hansen et al., 1990, Hansen og Abrahamsen, 2008).

Data anvendt ved Rørrendegård simuleringerne stammer fra klimastationen på den nærliggende Højbakkegård. Dog stammer nedbørsmålingerne i drænastrømningsperioden fra selve feltet. Data anvendt ved Estrup-simuleringerne stammer fra Askov Forsøgsstation, der ligger et par km fra forsøgsfeltet. Data anvendt ved Silstrup-simuleringerne stammer fra forsøgsstationen af samme navn. På Estrup og Silstrup er nedbøren korrigeret i henhold til DMI's anbefaling (Allerup et al., 1998). På Rørrendegård er nedbøren ikke korrigeret, da den akkumulerede nedbørsmængde er i god overensstemmelse med nedbørsmængden målt ved jordoverfladen på Højbakkegård. Nedbøren er den type vejrdata, der anses for at være behæftet med størst usikkerhed.

5.2 Landbrugsmæssig drift

På forsøgsfeltet på Rørrendegård er der dyrket ensidig vinterhvede. Afgrøden er gødet efter normerne og jordbehandlingen har været traditionel med efterårspløjning. I efteråret 1998 blev der udbragt bromid (34000 g/ha), i 1999 blev der sprøjtet med pendimethalin (2000 g aktivt stof/ha) og i efteråret 2000 blev der sprøjtet med både pendimethalin (2000 g aktivt stof/ha) og ioxynil (200 g aktivt stof/ha). I Estrup var afgrødefølgen vårbyg (2000), ært (2001) og vinterhvede (2001-2002). I 2001 var der en forårspløjning før vårbyggen blev sået og en efterårspløjning efter høst. Tilsvarende udførtes en efterårspløjning efter høst af ært. Udbringning af pesticider og bromid fremgår af Tabel 5.1. I Silstrup var afgrødefølgen foderroe² (2000) og vårbyg (2001). I 1999 var der en efterårspløjning, og en harvning før foderroen blev sået og en forårspløjning før vårbyggen blev sået. Der udførtes en efterårspløjning efter høst af vårbyggen.

² Vækst af foderroen simuleres med en vårbyg-parametrisering

Tabel 5.1 Udbringning af bromid [kg/ha] og udvalgte pesticider [g/ha] på Estrup og Silstrup

Estrup			Silstrup		
Dato	Aktivt stof	Dosis	Dato	Aktivt stof	Dosis
15-05-2000	Bromid	20,14	22-05-2000	Bromid	20,14
15-06-2000	Fenpropimorph	187,5	22-05-2000	Metamitron	700,0
15-06-2000	Dimethoat	200,0	15-06-2000	Metamitron	700,0
05-07-2000	Fenpropimorph	187,5	12-07-2000	Metamitron	700,0
15-06-2000	Dimethoat	200,0	21-06-2001	Fenpropimorph	187,5
13-10-2000	Glyfosat	1440	04-07-2001	Fenpropimorph	187,5
			16-07-2001	Dimethoat	300,0
			25-10-2001	Glyfosat	1400

Ved valget af pesticider ved Estrup og Silstrup var glyfosat selvskrevet pga. det omfattende brug. For de øvrige pesticider var kriterierne: i) de skulle helst være anvendt på begge lokaliteter, ii) de skulle have betydelig variation i nedbrydningsrater, og iii) de skulle have et betydeligt spænd i sorptionsegenskaber.

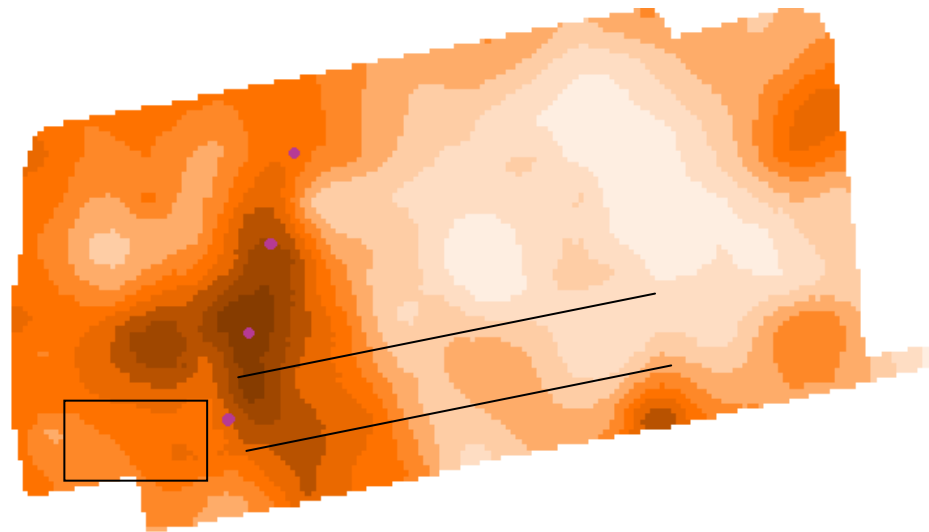
Alle driftmæssige detaljer er indsat i modelopsætningen. En kopi af opsætningen kan rekvireres fra forfatterne.

5.3 Parameterisering af jorden

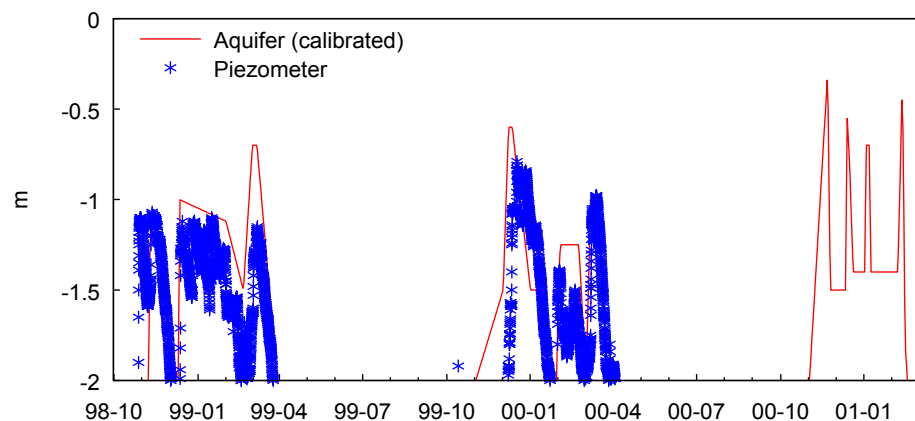
I det foregående har vi gennemgået det teoretiske grundlag for Daisy 2D modellen. Før denne model kan testes, kræves det, at den parameteriseres. Nogle modelparametre kan måles direkte, andre fremkommer ved brug af pedotransferfunktioner og andre igen fås ved kalibrering. Generelt gælder, at jordbunden typisk udviser en betydelig rumlig variation i egenskaber og dermed i de modelparametre, der bruges til at karakterisere denne. En del af variationen er kendt og inddrages i parameteriseringen. F.eks. eksisterer der ofte en erkendt forskel i jordens egenskaber mellem de forskellige horisonter og mellem drængrøft og områder uden for drængrøfterne. En anden del af variationen er erkendt, men dog ukendt. F.eks. forventes en ikke ubetydelig variation i jordens porøsitet i en B-horisont uden for drængrøften. Dette er en meget betydelig udfordring, som typisk imødegås ved at anvende såkaldte effektive parametre. Disse skal imidlertid estimeres, og med få måledata vil estimererne være behæftet med en betydelig usikkerhed. Ved vores modelparameterisering har vi inddraget tidligere erfaringer, litteraturværdier og information fra de 3 forsøgsarealer, nemlig Rørrendegård, Estrup og Silstrup. Information om Rørrendegård stammer fra tidligere projekter på lokaliteten (se f.eks. Petersen et al., 2003; Petersen et al., 2008). Information om Estrup og Silstrup stammer primært fra startkarakteriseringen af lokaliteterne (Lindhardt et al., 2001) samt fra tidligere modelleringer med MACRO (Jarvis et al., 1994) udført af Annette Rosenbom.

Forsøgsarealet på Rørrendegaard er ifølge den danske jordklassificering en fin sandblandet lerjord og er nærmere beskrevet i afsnit 3.1 i nærværende rapport. Forsøgsarealet er specielt karakteriseret ved at en meget lille del af nedbøren i afstrømningsperioden ender som drænastrømning (ca. 10 %). Dette tilskrives en sandet undergrund på en væsentlig del af det drænedes areal. På basis af tidligere feltundersøgelser, herunder et EM38 kort (Figur 5.1), skønnes at 66% af arealet har en sandet undergrund, og for den del antages fri afdræning. For den resterende del af arealet er undergrunden leret, og det antages, at den nedre rand for modelleringen for denne del af marken kan beskrives ved en aquitard (leret lag med relativ lav ledningsevne ca. 0.5 mm/h) underlejret af en aquifer, der er karakteriseret af et trykpotential.

Aquifer trykpotentialet er skønnet ud fra grundvandspejlinger på arealet og er vist i Figur 5.2. De viste grundvandspejlinger er medianværdier af målinger i pejlerør i afstanden 10 og 40 m fra målebønderne (pejlerør ved det dræn der er fjernest fra det simulerede dræn er dog udeladt).

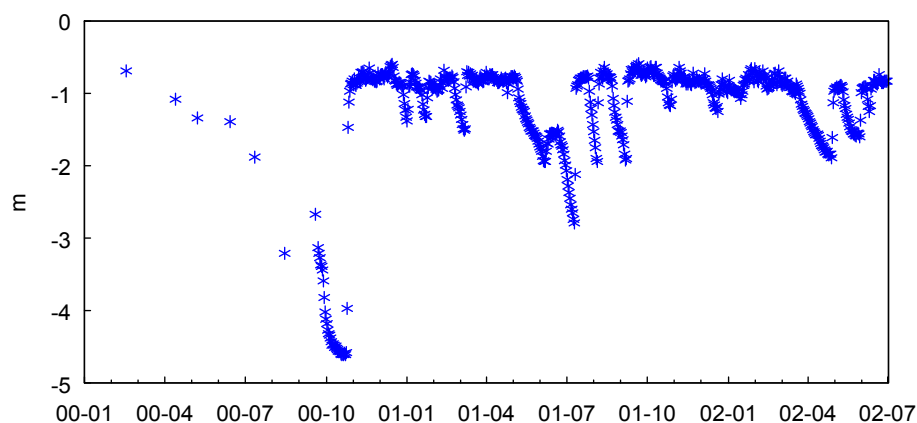


Figur 5.1. EM38 kort over forsøgsmarken på Rørrendegård. Mørke farver svarer til leret undergrund medens lyse farver svarer til mere sandet undergrund. Arealet der afvander til vores forsøgsdræn befinder sig mellem de 2 fuldt optrukne linjer, mens feltarbejdet tilknyttet dette projekt blev udført indenfor firkanten. Drænrørerne ligger med en afstand på 16 m.



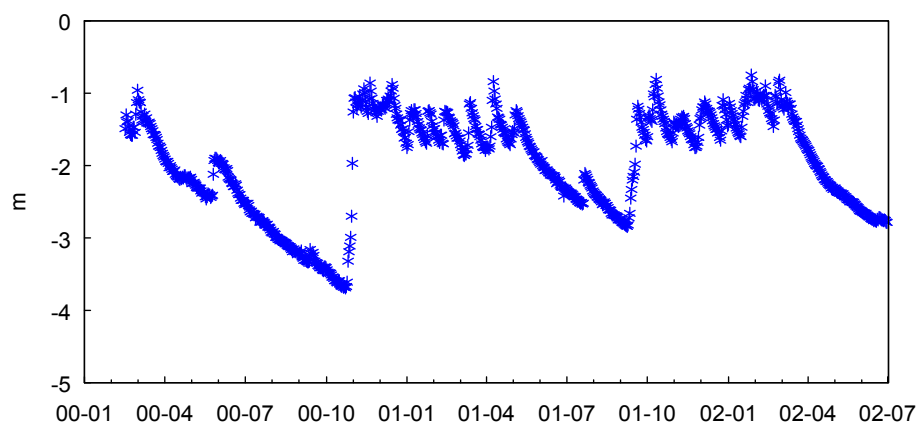
Figur 5.2 Aquifer trykpotential og grundvandspejlinger ved Rørrendegård.

Forsøgsarealet ved Estrup er karakteriseret ved stor heterogenitet. Den dominerende aflejring er moræneler, med et særdeles veludviklet sprækkesystem ned til en dybde af mindst 5,0 m.u.t. En betragtelig del af arealet er dog dækket af smeltevandssand. Mindre partier er kendetegnet ved tilstedeværelsen af smeltevandsler, dislokerede flager af kalk og tertiært ler, og i een boring er der truffet postglacial tørv. Ved modelleringen har vi ikke søgt at inddrage den store variabilitet, da den ikke er kendt i tilstrækkelige detaljer, men vi har søgt at anvende effektive parametre. En relativt stor del af årsnettonedbøren ender som drænafstrømning (73%). Den nedre rand for modelleringen udgøres af grundvandspejlinger fra marken, Figur 5.3. Da grundvandspejlingerne er foretaget i den ene ende af marken, har vi justeret disse med et "offset" på -5 cm (kalibreret på plads ved at anvende den målte drænafstrømning).



Figur 5.3 Grundvandsdybde ved Estrup.

Forsøgsarealet ved Silstrup er karakteriseret af et højt lerindhold (18 -25 % ler i pløjelaget). Den dominerende aflejring er moræneler med enkelte sandslirer og et stort indhold af kalk (ca. 40-45%). Der er fundet et svagt udviklet sprækkesystem i moræneleren ned til 4,0 m.u.t.. Ca. 47% af årsnettonedbøren ender som drænaftstrømning. Den nedre rand for modelleringen er behandlet på samme måde som for Estrup. Grundvandspejlingerne er vist i Figur 5.4; ved kalibreringen endte "offset" med at blive -4 cm.



Figur 5.4 Grundvandsdybde ved Silstrup.

5.3.1 Matrixsystem

Ved opsætning af modellen har vi fulgt Horton et. al. (1994), der anbefaler at jordprofilet opbygges af tre lagtyper: 1) et pløjelag (Ap) der udsættes for jordbehandling, 2) en pakket pløjesål, og 3) jordlag der ikke er påvirket af jordbehandling og trafik. Yderligere anbefaler de at de tre lagtyper suppleres af et overfladelag, der pga. af slæmning ofte giver anledning til skorpedannelse og derfor giver overfladelaget særlige egenskaber. I Tabel 5.2 er jordens indhold af organiske stof og jordens tekstur givet for de enkelte horisonter på de tre lokaliteter. Det bemærkes, at der i drængrøften på Rørrendegård er identificeret en B horisont med særlige egenskaber.

Tabel 5.2 Organisk stof og tekstur for lokaliteterne Rørrendegård, Estrup og Silstrup.

Lokalitet	Horisont	Organisk stof	Ler	Silt	Sand
Rørrendegård	Ap	0,030	0,107	0,222	0,671
	B	0,016	0,222	0,195	0,583
	B drængrøft ¹⁾	0,014	0,213	0,190	0,558
	C	0,010	0,207	0,235	0,558
Estrup	Ap	0,032	0,146	0,233	0,621
	B	0,008	0,217	0,179	0,604
	C1	0,002	0,268	0,143	0,590
	C2	0,002	0,257	0,222	0,521
Silstrup	Ap	0,018	0,225	0,277	0,499
	B	0,005	0,280	0,262	0,459
	C	0,001	0,263	0,209	0,529

¹⁾ Udstrækningen er 25 cm omkring drænen og fra bunden af pløjesålen til 115 cm dybde

Tabel 5.3 Horisontgrænser for lokaliteterne Rørrendegård, Estrup og Silstrup.

Rørrendegård		Estrup		Silstrup	
Dybde cm	Horisont	Dybde cm	Horisont	Dybde cm	Horisont
0-3	Ap ovrf 1)	0-3	Ap ovrf 1)	0-3	Ap ovrf 3)
3-25	Ap	3-27	Ap 4)	3-31	Ap 4)
25-33	B pløjesål 2)	27-35	B pløjesål 5)	31-39	B pløjesål 5)
33-120	B	35-55	B	39-75	B 6)
120-200	C	55-105	C1	75-113	B 4)
		105-500	C2	113-180	C 4)
				180-350	C 6)
				350-500	C

- 1) Nedsat hydraulisk ledningsevne.
- 2) Jordpakning forårsager ændringer i retention og hydraulisk ledningsevne i forhold til B horisonten. Desuden udviser pløjesålen anisotropi i hydraulisk ledningsevne (Petersen et al 2008).
- 3) Der er anvendt en dynamisk model til beskrivelse af overfladeegenskaberne.
- 4) Anisotropi i hydraulisk ledningsevne (anvendes til at beskrive effekten af sprækkesystemer/poresystemer, der giver anledning til en retningsbestemt forøgelse af den hydrauliske ledningsevne, f.eks. vandrette sprækker).
- 5) Nedsat hydraulisk ledningsevne pga. af jordpakning.
- 6) Sprækker.

I Tabel 5.3 er dybderne for de enkelte jordlag/horisont givet. Som anbefalet er Ap-horisonten opdelt i et særligt overfladelag (ovrf) og den egentlige Ap-horisont. B-horisonten er opdelt i en pløjesål, der pga. af jordpakning har hydrauliske egenskaber, der er forskellig fra den nedre del af B-horisonten. Under pløjesålen er en underopdeling af horisonterne motiveret af forskelle i sprækkestrukturer.

I Tabel 5.4 er de ved modelleringen anvendte hydrauliske egenskaber (retention og umættet hydraulisk ledningsevne) givet. Det bemærkes, at der i Silstrup, hvor overfladefænomener i meget høj grad forklarer den observerede dynamik i udvaskning af bromid og pesticider, er anvendt en dynamisk model for jordens hydrauliske ledningsevne. Modellen virker ved, at porøsiteten ændres på foruddefinerede datoer, og dette påvirker ledningsevnen (Tabel 5.4). Det generelle princip er at i forbindelse med pløjning løsnes overfladen og overfladelaget antager samme porøsitet som Ap horisonten. Efterfølgende nedsættes porøsiteten i to tempi til henholdsvis 0,35 og efterfølgende til 0,30.

Ved modellering af konvektiv-dispersiv transport af opløst stof er anvendt en dispersionskoefficient på 4 cm. Ved 2-domæne-stoftransport er grænsen mellem de 2 domæner sat til pF 3.0 i de øverste 33 cm (Ap og pløjesål) og

herunder til 2.0. Udvekslingen mellem de 2 domæner er karakteriseret af en udvekslingskoefficient som på Rørrendegård er sat til $3 \cdot 10^{-5} \text{ h}^{-1}$ i de øverste 33 cm og herunder til 10^{-4} h^{-1} , idet udvekslingskoefficienten repræsenterer en diffusionsproces. På Estrup og Silstrup er udvekslingskoefficienten sat til 0.01 h^{-1} , idet den her repræsenterer en dispersionsproces (Jaynes et al., 1995). Hvis en horisont er defineret med et sprækkesystem (Tabel 5.3) så defineres grænsen mellem de 2 domæner af den karakteristiske sprækkeåbnetur (se næste afsnit).

Tabel 5.4 Hydrauliske parametre for Mualem-van Genuchten model 1) for jordvandet retention $\theta(h_p)$ og hydrauliske ledningsevne $K(\theta)$. Den vertikale ledningsevne estimeres som $k_{zz} = K(\theta)$ og den horisontale ledningsevne estimeres som $k_{xx} = f_a K(\theta)$, hvor f_a er en anisotropi faktor.

Lokalitet / Horisont	Mualem - van Genuchten parametre							f_a	Note
	θ_r	θ_b	h_b cm	α cm ⁻¹	n	l	K_b mm/h		
Rørrendegård									
Ap ovrf	0,00	0,395	0	0,0477	1,266	-2,055	1,737	1	
Ap	0,00	0,395	0	0,0477	1,266	-2,055	17,37	1	
B pløjesål	0,00	0,340	0	0,0465	1,194	-2,929	0,925	12	
B	0,00	0,357	0	0,0565	1,148	-4,032	2,685	1	
C	0,00	0,348	0	0,0476	1,153	-3,603	15,00	1	
Estrup									
Ap ovrf	0,00	0,363	0	0,020	1,160	0,500	5,078	1	
Ap	0,00	0,360	-5	0,020	1,160	0,500	0,500	100	
B pløjesål	0,00	0,350	-15	0,010	1,140	0,500	0,030	1	
B	0,00	0,350	-15	0,010	1,140	0,500	0,300	1	
C1	0,00	0,320	-12	0,010	1,100	0,500	0,300	1	
C2	0,00	0,390	-10	0,005	1,100	0,500	0,160	1	
Silstrup									
Ap ovrf	0,00	0,393	0	0,010	1,100	0,500	22,50	1	1)
Ap	0,00	0,390	-10	0,010	1,100	0,500	1,000	100	
B pløjesål	0,08	0,380	-10	0,012	1,130	0,500	0,010	1	
B	0,08	0,380	-10	0,012	1,130	0,500	0,100	1	
B	0,08	0,380	-10	0,012	1,130	0,500	0,100	100	2)
C	0,00	0,330	-10	0,012	1,100	0,500	0,100	100	3)
C	0,00	0,330	-10	0,012	1,100	0,500	0,100	1	
$^1) \theta(h_p) = \theta_r + \frac{(\theta_s - \theta_r)}{(1 + \alpha h_p ^n)^m} \quad \text{og} \quad K(\theta) = K_s \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^l \left[1 - \left[1 - \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{1/m} \right]^m \right]^2$									
hvor $m = 1 - 1/n$ og									
$\theta_s = \theta_r + (\theta_b - \theta_r) (1 + \alpha h_b ^n)^m \quad \text{og} \quad K_s = K_b \left(\frac{\theta_b - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{-l} \left[1 - \left[1 - \left(\frac{\theta_b - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{1/m} \right]^m \right]^2$									
Noter 1) K_s er en funktion af porøsiteten, der ændres over tid. De i tabellen angivne værdier er referenceværdier, som modificeres med en faktor, der er stykvis lineære funktioner af porøsiteten og som defineres ved en række punkter (porøsitet;faktor): (0,30; 0,001), (0,35; 0,01) og (0,393; 1)									
2) Dybden 75-113 cm									
3) Dybden 113-180 cm									

Modellering af overflade-mobilisering af kolloider er baseret på implementeringen og parametrisering i Jarvis et al. (1999). Den maksimale specifikke mængde af dispergerbare partikler er estimeret efter Brubaker et al. (1992):

$$M_{s,max} = 0,0362 \cdot \text{Lerfraktion} - 0,00518 \text{ [g partikler/g jord]}$$

McGechan et al. (2002) brugte en filterkoefficient (f_c , ligning(4.14)) på 40 m^{-1} for matrixdomænet. Vi har brugt filterkoefficienter på 80 m^{-1} og 40 m^{-1} for henholdsvis det primære og det sekundære domæne.

5.3.2 Sprækkesystem

Sprækkesystemer karakteriseres ved en karakteristisk sprækkeåpning a , en gennemsnitlig afstand mellem sprækker B og en udvekslingsparameter for stof α . Det trykpotential, hvor sprækkerne bliver vandførende, bestemmes af sprækkeåpningen:

$$h_{\text{lim}} = -\frac{2\gamma \cos \beta}{\rho_w g a} \quad (5.1)$$

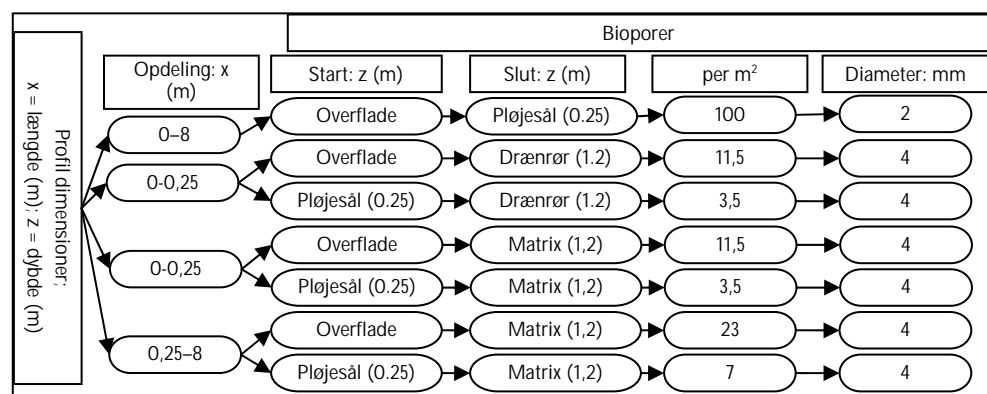
hvor γ er vands overfladespænding ($72,8 \cdot 10^{-3} \text{ N/m}$), β er kontaktvinklen (0), ρ_w er vands massefylde (992 kg/m^3) og g er tyngdens acceleration ($9,82 \text{ m/s}^2$). Tilsvarende bestemmes sprækkesystemets hydrauliske ledningsevne som:

$$K_f = \frac{\rho_w g}{12\eta} \frac{a}{2B} a^2 \quad (5.2)$$

hvor η er vands viskositet ($1,002 \cdot 10^{-3} \text{ N/s/m}^2$ ved $20 \text{ }^\circ\text{C}$). I modelleringerne er a sat til $78 \text{ }\mu\text{m}$, og B er sat til 10 cm (Jørgensen et al. 2008). Heraf følger, at sprækkerne bliver aktive ved trykpotential på -19 cm , og at deres hydrauliske ledningsevne er ca. 7 mm/h .

5.3.3 Makroporer

Makroporesystemet beskrives ved et antal makroporeklasser. Hver klasse er karakteriseret ved makroporetæthed, makroporediameter samt hvor makroporerne starter, og hvor de slutter. Figur 5.5 viser en mulig makroporeparametrisering baseret på de eksperimentelle studier på Rørrendegård.



Dybderne varierer fra opsætning til opsætning alt efter de lokalkendte forhold

Udstrækning (cm)	0-800 [*]	0-25 ^{**}				25-800 ^{***}	
Startdybde	O	O	P _m	O	P _m	O	P _m
Slutdybde	P _m	D	D	M	M	M	M
Makroporediameter (mm)	2	4	4	4	4	4	4
Makroporetæthed (per. m ²)	100	11,5	3,5	11,5	3,5	23	7

* Halv drænafast, ** halv drængrøft, *** udenfor drængrøft

O = Overflade, P_m = Pløjesål (matrix f.eks. 25 cm), D = Drænrør (f.eks. 1,2 m), M = Matrix (f.eks. 1,2 m)

Figur 5.5 Makroporemodel og parametrisering for Rørrendegård.

Rørrendegårdmodellen er anvendt på Estrup og Silstrup, dog med justeringer for dybde af pløjesål og afstand mellem dræn.

5.4 Parametrisering af pesticider

Det antages, at nedbrydning af de anvendte pesticider kan beskrives ved en 1. ordens-proces. De anvendte nedbrydningsrater er givet i Tabel 5.5. Nedbrydningen antages at være påvirket af jordtemperatur og jordfugtighed, og det antages, at påvirkningen kan modelleres på samme måde som nedbrydningen af organisk stof i Daisy. Desuden følger vi anbefalingerne fra FOCUS (2000, 2002), herunder at nedbrydning ophører under 1 m's dybde.

Tabel 5.5 Halveringstid i jord og ligevægtssorptionsparametre for anvendte pesticider (PPDB, 2009).

Pesticid	Halveringstid [d]	K_{oc} [L/kg]	K_d [L/kg]
loxynil	5,0	276	
Dimethoat	7,2	30	
Metamitron	11,1		4 ¹⁾
Glyfosat	12,0		503 ²⁾
Fenpropimorph	25,5	2401	
Pendimethalin	90,0	15744	

¹⁾ Madsen et al. (2000)

²⁾ Gjettermann et al. (2009)

Generelt antages det, at sorption/desorption ikke momentant indstiller sig på ligevægtssorptionen, men følger en 1. ordens sorptionskinetik, og at hastighedskonstanten for sorption og desorption er den samme.

Hastighedskonstanten er sat til $0,05 \text{ h}^{-1}$ undtagen for glyfosat. For glyfosat antages det, at sorptionskapaciteten (ligevægtssorptionen) kan deles i en svag sorption, der udgør 10% af kapaciteten, og en stærk sorption, der udgør 90% af kapaciteten. Hastighedskonstanterne for den stærke og svage sorption er henholdsvis $0,005 \text{ h}^{-1}$ og $0,05 \text{ h}^{-1}$. Ved sorption til mobiliserbare og mobiliserede kolloider er anvendt en berigelsesfaktor på 10000.

I Silstrup blev der ved høsten i 2001 fjernet 70 hkg kerne/ha og mindre end 30 hkg strå/ha. Dette indikerer, at en betydelig mængde planterester blev efterladt i marken og delvis dækkede jorden, da der blev sprøjtet med glyfosat den 25. oktober. For at tage højde for dette, har vi implementeret en model for interception af vand og stof i planterester på overfladen (Scopel et al. 2004). Parametriseringen af denne model er baseret på Mecena et al. (2003).

6 Modeltest

6.1 Rørrendegaard

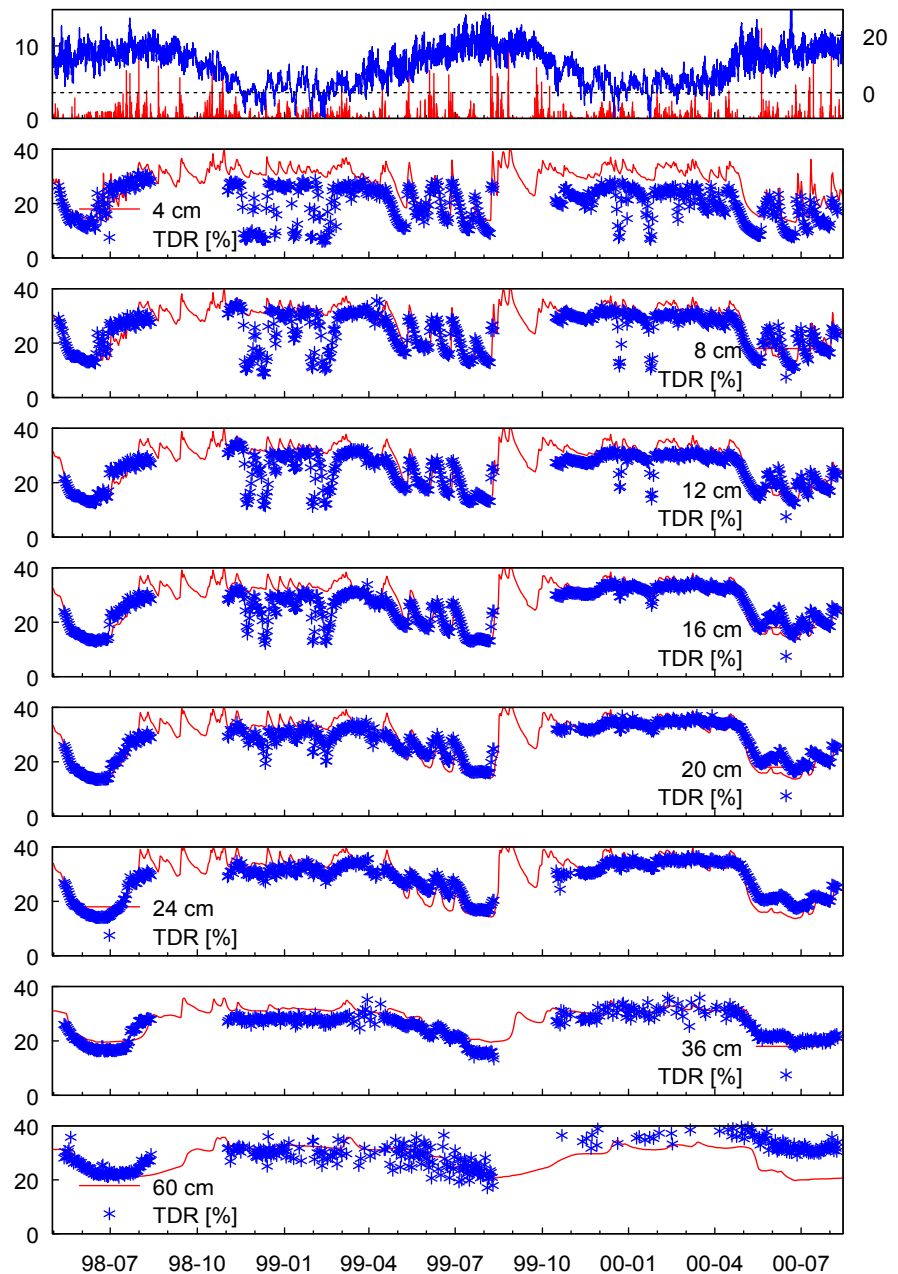
Data fra forsøgsmarken på Rørrendegård er publiceret af Petersen et al. (2001), Petersen et al. (2002) og Petersen et al. (2004).

Vi har gjort brug af følgende måledata:

- Jordens vandindhold målt med TDR i dybderne 4 cm, 8 cm, 12 cm, 16 cm, 20 cm, 24 cm, 36 cm, og 60 cm i perioden fra maj 1998 til marts 2002,
- Drænvandsmålinger,
- Koncentrationer af kolloider målt i drænvand,
- Koncentrationer af bromid målt i drænvand,
- Koncentrationer af ioxynil målt i drænvand,
- Koncentrationer af pendimethalin målt i drænvand,
- Bromidmålinger i jorden, 0-25cm, 25-50 cm, 50-75 cm og 75-100 cm.

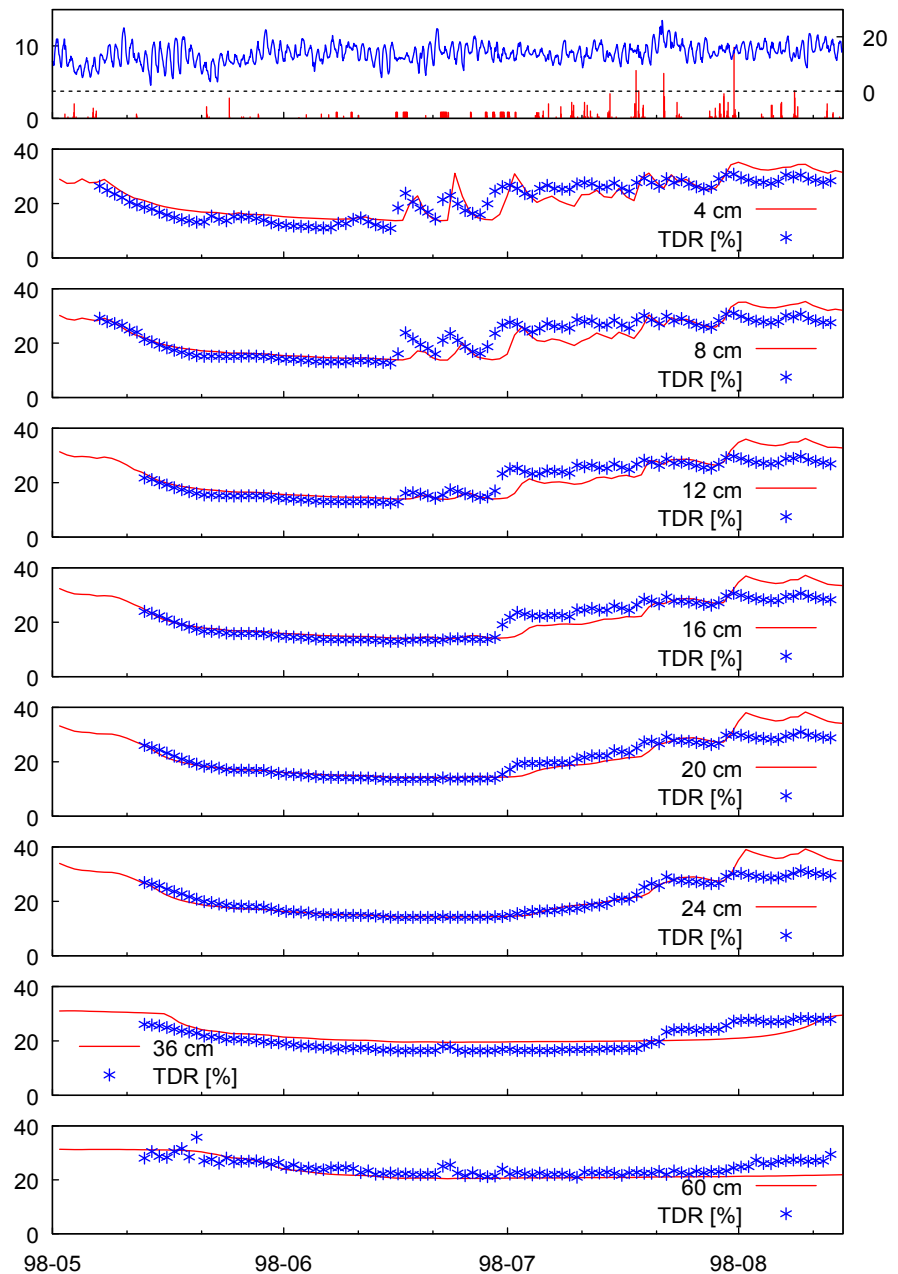
I bilaget "Daisy 2D simulation of Rørrendegård" er alle måletal angivet sammen med simulerede værdier. I dette afsnit vil de vigtigste resultater blive trukket frem.

Kvaliteten af jordvandsmålingerne er højest i begyndelsen af perioden. Vi har derfor valgt at koncentrere os om perioden maj 1998 til august 2000. Figur 6.1 viser nedbør, temperatur samt målt og simuleret jordvandsindhold i ovenfor nævnte måledybder. I figuren ses, at målingerne har været afbrudt i perioder omkring efterårspløjning og såning af vinterhveden, idet TDR-målesystemet har været afmonteret i denne periode og er først blevet reetableret efter såning. Denne procedure introducerer en vis usikkerhed, idet målingerne i de enkelte måleperioder formentligt ikke er foretaget på nøjagtigt samme sted. Målingerne i 4 cm's dybde er behæftet med særlig usikkerhed, idet frosthævning flytter TDR-stængerne (sensorerne) nærmere jordoverfladen. Dette vil give anledning til en systematisk undervurdering af vandindholdet. I vinterperioden ses pludselige fald i de målte jordvandsindhold. Dette skyldes at jorden fryser, og at TDR metoden kun måler flydende vand.



Figur 6.1. Nedbør og temperatur samt målt (TDR) og simuleret (Linie) jordvandsindhold i forskellige dybder. Periode: Maj 98 til August 00.

Sammenlignes målt og simuleret jordvandsindhold, ses det, at modellen generelt reproducerer det overordnede mønster i jordvandsindholdet. Det er lidt forskelligt, hvor godt niveauet rammes. Der skal hertil bemærkes, at dybderne ikke er kalibreret individuelt, men at horisontvis fælles jordfysiske parametre er anvendt jf. Tabel 5.3 og Tabel 5.4. Specielt ses markante afvigelser i 4 cm, jf. bemærkningerne ovenfor. Et yderligere bidrag til den generelle usikkerhed skyldes, at jordens hydrauliske egenskaber i denne dybde må forventes at variere betydeligt over året, og da denne variation for en stor del er ukendt, har vi ikke søgt at inddrage den i modelleringen. I 60 cm ses en betydelig støj på målingerne efter at følerne var blevet genmonteret i efteråret 98. Vi tilskriver denne støj måletekniske problemer. Efter genmonteringen af følerne i efteråret 99 ses det, at niveauet af målingerne flyttes. Dette tilskriver vi, at følerne er placeret lidt anderledes i forhold til tidligere.

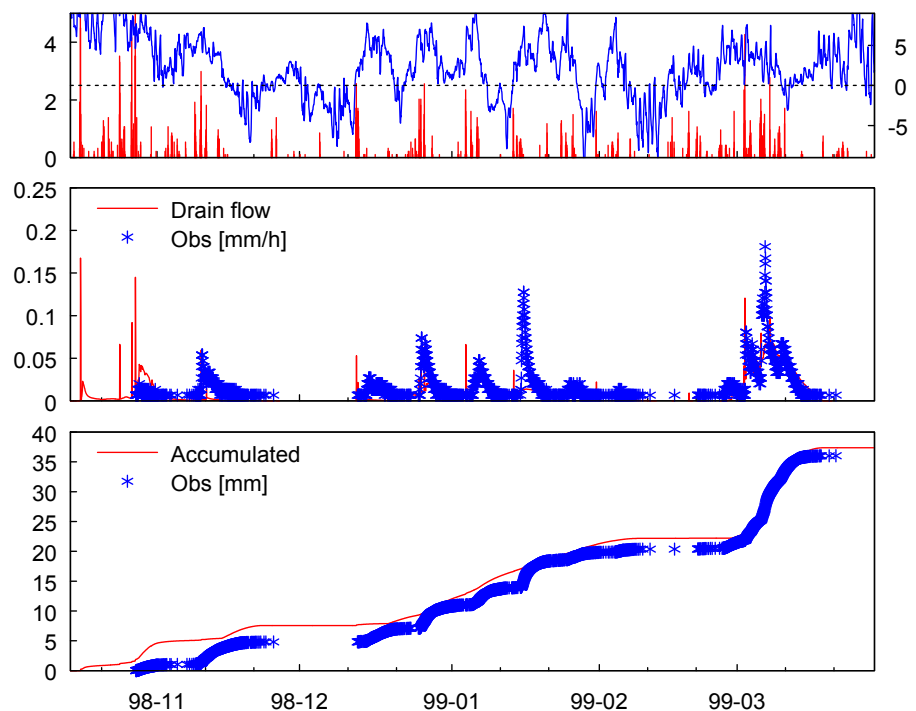


Figur 6.2. Nedbør og temperatur samt målt (TDR) og simuleret (linie) jordvandindshold i forskellige dybder. Periode: Maj 98 til August 98.

For nærmere at teste modellen og modelopsætningen har vi i Figur 6.2 zoomet ind på udtørring og genopfugtning fra den første sommerperiode. Det fremgår af Figur 6.2, at modellen generelt er i stand til at reproducere måleresultaterne. Den mest markante afvigelse ses efter en betydelig nedbørshændelse i slutningen af juli. Her er en præferentiel strømvej sandsynligvis blevet aktiveret og har ledt vand dybere ned i profilet (60 cm og dybere). Modellen har i denne situation ikke aktiveret denne strømvej. Korrekt aktivering af de præferentielle strømveje er en meget betydelig udfordring af modellen. Alene numerisk usikkerhed pga. modellens numerik og diskretisering bidrager med en betydelig usikkerhed. Hertil kommer usikkerhed, der kan tilskrives parametrisering.

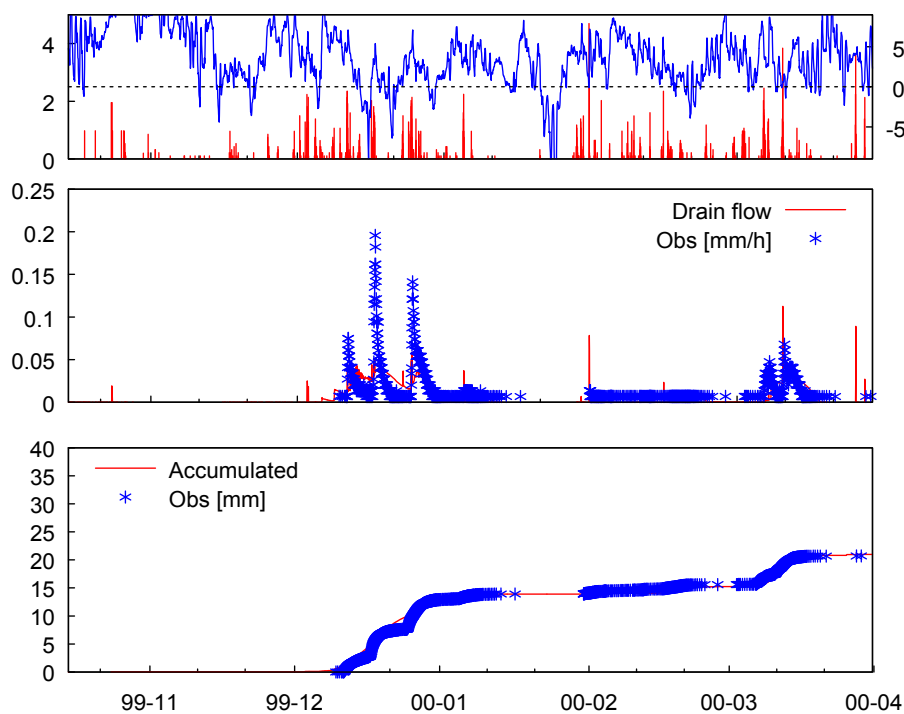
Overordnet konkluderer vi, at modellen med sin parametrisering giver en tilfredsstillende, men ikke perfekt beskrivelse af jordvandsdynamikken.

Målt og simuleret drænaflow er vist i Figur 6.3, Figur 6.4 og Figur 6.5 for henholdsvis drænsæsonen 98-99, 99-00 og 00-01. På figurerne er lufttemperatur og nedbørsintensitet (mm/h) også vist, sådan at frostperioder – og perioder med sandsynlig præferencestrømning kan identificeres. Drænaflow er vist både som en intensitet (mm/h) og som akkumuleret drænaflow (mm). I figurerne med drænaflowsintensitet ses forløb med stejle spidser og langsomt aftagende haler. Spidserne indikerer præferencestrømningshændelser, og halerne indikerer, at grundvandsstrømmen til dræne er faldende, dvs. grundvandstanden er faldende. Tilsvarende svarer en blød stigning i drænaflowstrømningen til en stigende grundvandstand og en stigende grundvandsstrøm til dræn. Præferencestrømningshændelser og en stigende grundvandsstrøm til dræn er ofte sammenfaldende, evt. ses en stigende grundvandsstrøm til dræn umiddelbart efter en præferencestrømningshændelse.

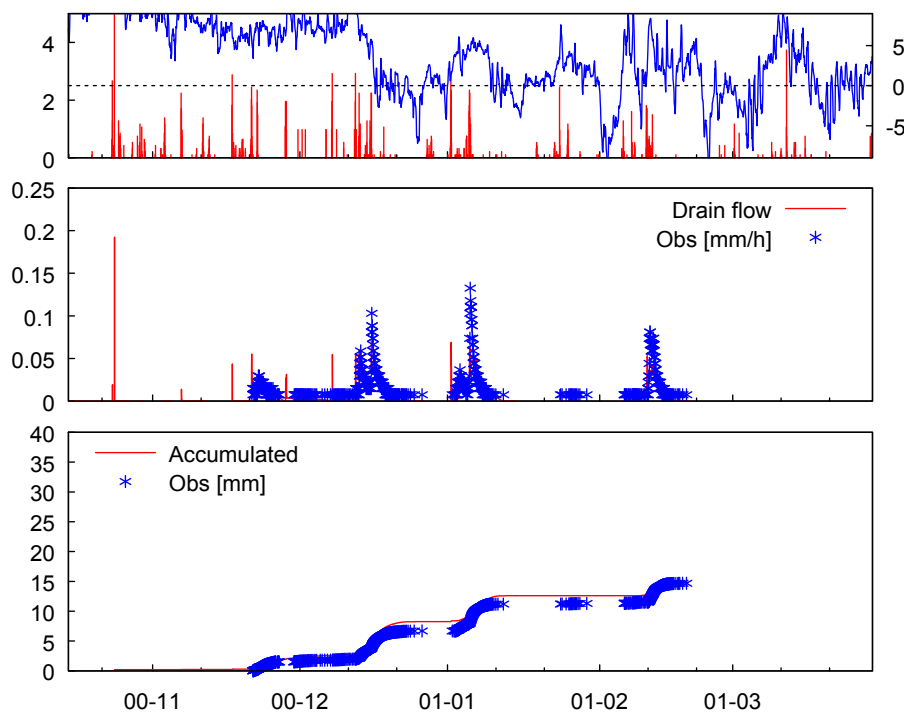


Figur 6.3 Øverst: Lufttemperatur (°C, kurve) og nedbør (mm, stave); midterst: intensitet af drænaflow (mm/h); og nederst: målt og simuleret akkumuleret drænaflow (mm). Dræningsperioderne: oktober 98 – april 99.

Generelt ses der god overensstemmelse mellem præferencestrømningshændelser og nedbørsintensiteter. Det er dog ikke muligt på alene basis af nedbørsintensiteter at forudsige, hvornår en præferencestrømningshændelse finder sted. Når vi tager i betragtning, hvor betydelig en udfordring det er at prædikere en præferencestrømningshændelse, vurderer vi, at overensstemmelsen mellem simuleringsresultater og målinger er ganske god.



Figur 6.4 Øverst: Lufttemperatur (°C, kurve) og nedbør (mm, stave); midterst: intensitet af drænvandsafstrømning (mm/h); og nederst: målt og simuleret akkumuleret drænaflow (mm). Dræningsperioderne: oktober 99 – april 00.



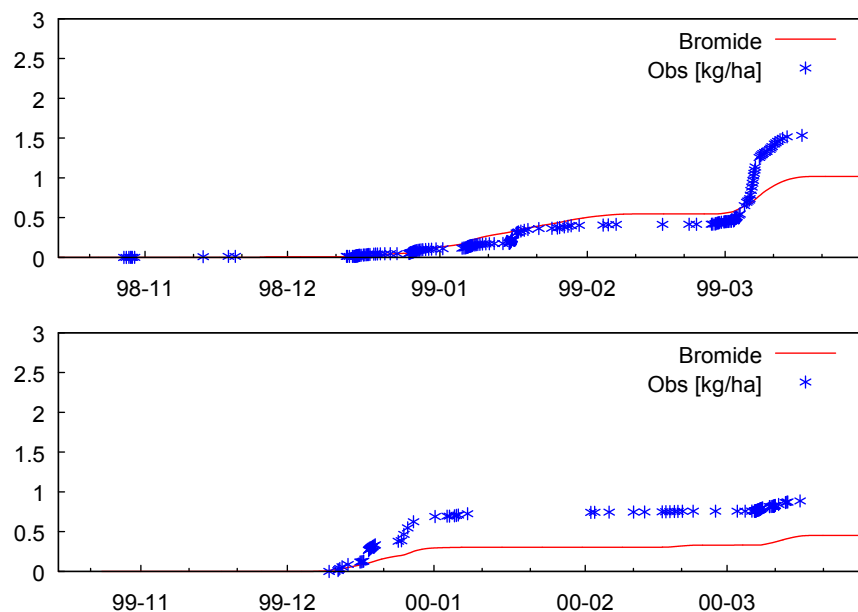
Figur 6.5 Øverst: Lufttemperatur (°C, kurve) og nedbør (mm, stave); midterst: intensitet af drænvandsafstrømning (mm/h); og nederst: målt og simuleret akkumuleret drænaflow (mm). Dræningsperioderne: oktober 00 – april 01.

Der findes dog markante afvigelser. I alle tre drænsæsoner prædikerer modellen tidlige præferencestrømningshændelser, som ikke genfindes i

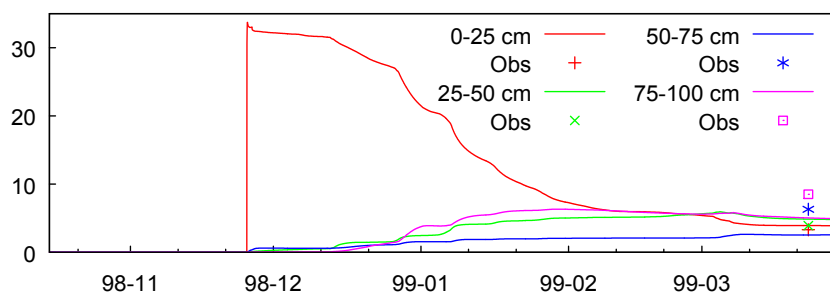
målingerne. Med undtagelse af efteråret 98, bidrager disse hændelser ikke med meget vand (se de akkumulerede kurver). Hvorvidt hændelserne har fundet sted eller ej kan ikke endeligt afgøres ud fra målingerne, idet vand kan være strømmet til drænledningerne og så efterfølgende ud igen, fordi grundvandet stod under drændybden. Hændelsen efteråret 98 er en undtagelse; her viser simuleringerne en lille, men dog ikke helt ubetydelig drænvandsafstrømning, som skyldes både præferencestrømning og grundvandstilstrømning. Følgelig er grundvandstanden i denne periode blevet overvurderet. Karakteristisk er også, at der optræder lange perioder, hvor drænafstrømningen er nul eller meget tæt på nul. Her er der generelt god overensstemmelse mellem målingerne og simuleringerne. Generelt ses en relativt god overensstemmelse mellem målt og simuleret akkumuleret drænafstrømning.

En nogenlunde korrekt beskrivelse af jordvandsdynamikken er en nødvendig, men ikke tilstrækkelig, forudsætning for en nogenlunde korrekt beskrivelse af transporten af opløst stof. Bromid er brugt som modelstof for at vurdere stoftransportdelen af modellen. Ved denne vurdering er anvendt målinger af bromidkoncentrationen i drænvand og den tilsvarende bromid flux (Figur 6.6) samt en enkelt observation af bromidindhold i jorden i 4 dybder (Figur 6.7; 0-25 cm, 25-50 cm, 50-75 cm og 75-100 cm).

På grundlag af sammenligningerne mellem målt og simuleret jordvand og nærværende sammenligning konkluderer vi at vores modellering (modelbeskrivelse og parametrisering) af jordvandets dynamik overordnet er tilfredsstillende beskrevet.



Figur 6.6 Målt og simuleret akkumuleret bromidudvaskning i drænafstrømning (mm). Øverst: Drænperioden oktober 98 – april 99. Nederst: Drænperioden oktober 99 – april 00.



Figur 6.7 Målt og simuleret bromidindhold (kg/ha) i jordlagene 0-25 cm, 25-50 cm, 50-75 cm og 75-100 cm

Bromiden (34 kg/ha) blev udbragt på frossen jord i slutningen af november, 1998. Baggrundskoncentrationen af bromid i drænvandet blev målt før udbringning og var på eller under detektionsgrænsen. Indtil en regnvejshændelse den 13. december var afdræningen meget lille og bromid blev ikke observeret i drænvandet. Perioden frem til den 13. december var præget af frost og der var enkelte mindre nedbørshændelser, muligvis i form af sne. Der hersker således en betydelig usikkerhed om, hvornår og under hvilke omstændigheder bromiden trængte ind i jorden (Petersen et al., 2004). I vores første forsøg på at modellere bromidtransporten anvendte vi konvektions-dispersionsligningen. Dette gav ikke et tilfredsstillende resultat. En forudsætning for konvektions-dispersions ligningens gyldighed er at udvekslingen mellem jordens poreklasser er så effektiv, at der under strømmingen opstår såkaldt lokal ligevægt. Denne forudsætning er formentligt sjældent om nogensinde opfyldt for jorder med struktur, som det er tilfældet for Rørrendegårdjorden.

For at forbedre modelleringen blev jordmatrix opdelt i 2 domæner med begrænset stofudveksling, dvs. der regnes med lokal ligevægt indenfor domænerne, men ikke mellem domænerne. Et af problemerne ved den valgte modelbeskrivelse er, at valget af grænse mellem de 2 domæner er arbitrær og at udvekslingsparameteren er en kalibreringsparameter. Til gunst for modelbeskrivelsen taler, at den ikke som ved konvektions-dispersions ligningen kræver lokal ligevægt. F.eks. i pløjelaget forventes den mekaniske påvirkning af jorden i kombination med inkorporeringen af planterester at danne strukturer, der fremmer præferentiel strømning og tilsvarende præferentiel transport af opløst stof. Formentligt vil der forekomme områder i jorden, der kun har ringe kontakt med det bromidrige vand. Resultatet af dette vil være en hurtigere nedadgående transport af bromid end predikteret af konvektions-dispersionsligningen. Frost, hvor jorden kun har været delvist frossen, vil kunne have fremmet denne tendens. I underliggende horisonter fremmer jordens mere eller mindre permanente strukturer en uens vandstrømning og transport af opløst stof. Konceptuelt er 2-domænebeskrivelsen altså attraktiv.

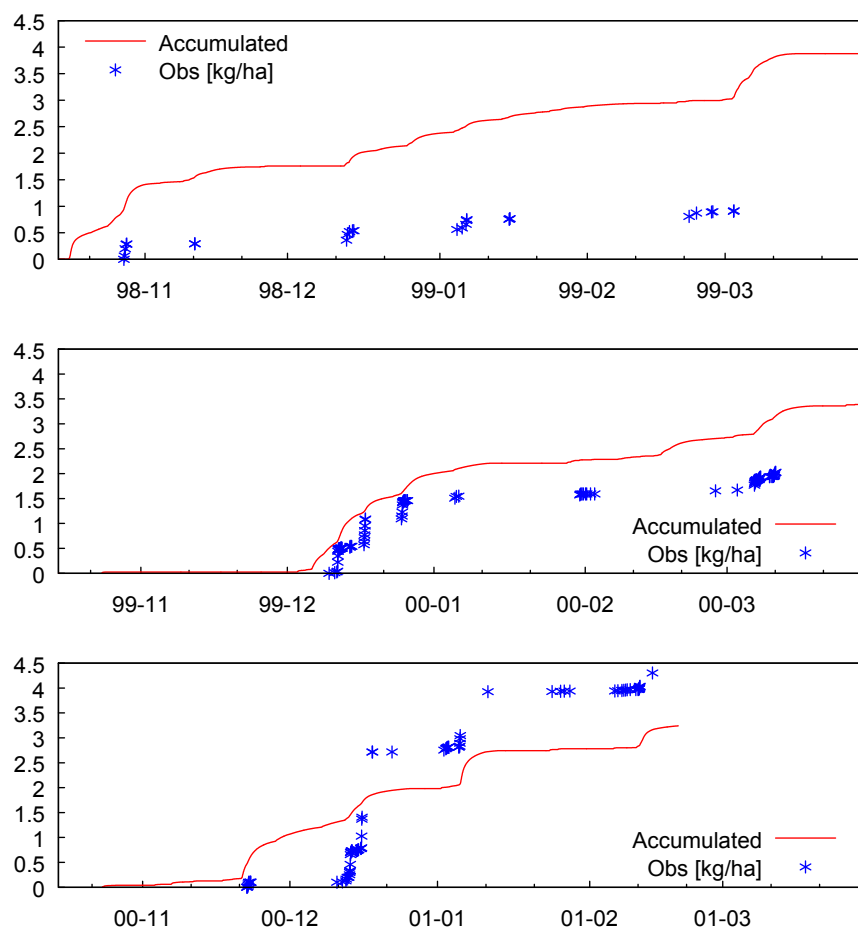
Resultatet af anvendelse af 2-domæne-beskrivelsen er vist i Figur 6.6 og Figur 6.7. På Figur 6.6 ses det at frem til marts 99 er beskrivelsen af bromid transporten tilfredsstillende, herefter ses en klar undervurdering af drænuvaskningen. Forklaringen herpå fremgår af Figur 6.7. I slutningen af marts 99 er bromidindholdet i 0-25 cm, 25-50 cm, 50-75 cm og 75-100 cm blevet målt. Modellen har prædikeret bromidindholdet i 0-25 cm og 25-50 cm tilfredsstillende, men har klart undervurderet indholdet i 50-75 cm og 75-100 cm. Altså undervurderes den totale mængde bromid i 0-100 cm. Følgelig må transporten (via store bioporer) ud af den øverste meter være overvurderet.

Figuren viser yderligere at bromidet i løbet af sidste halvdel af december og januar transporteres fra 0-25 cm til de underliggende 3 lag. Allerede i første halvdel af januar er transporten til 50-75 cm og 75-100 cm stort set tilendebragt. Dette antyder atter, at transporten modelmæssigt er sket via de store bioporer.

I løbet af vækstsæsonen 99 vil en del af bromidet være blevet taget op af afgrøden. I modellen er planteoptag af bromid modelleret som en passiv proces, hvor bromid følger med transpirationsstrømmen, idet der dog er antaget en refleksionsfaktor på 0,25; dvs. at 75 % af det bromid som føres frem til rødderne optages. Planteoptaget påvirker især bromidindholdet i den øvre del af rodzonen. I drænsæsonen oktober 99 – april 00 undervurderer modellen drænudvaskningen af bromid i overensstemmelse med ovenstående betragtninger.

Det er tidligere påpeget at udvaskning af kolloider til dræn sker i forbindelse med særlige hændelser (Petersen et al., 2004).

Akkumuleret målt og simuleret kolloidudvaskning til dræn er vist på Figur 6.8. Der er en generel god overensstemmelse mellem målt og simuleret mht. hvornår kolloidudvaskning finder sted (nemlig i forbindelse med præfestrømningshændelser), men når det handler om den udvaskede mængde er overensstemmelsen mindre god.



Figur 6.8 Målt og simuleret akkumuleret kolloidudvaskning i drænafstrømning (kg/ha). Øverst: Drænperioden oktober 98 – april 99. I midten: Drænperioden oktober 99 – april 00. Nederst: Drænperioden oktober 00 – april 01.

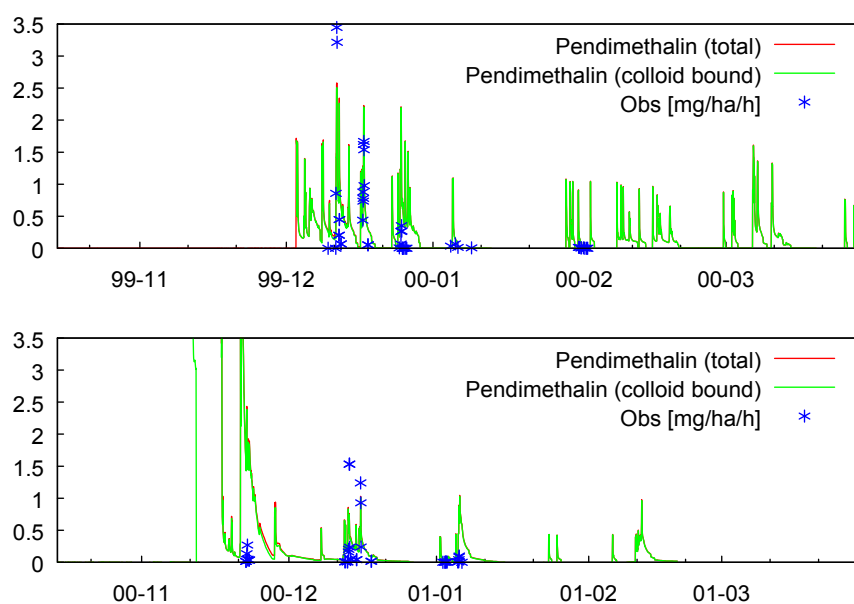
Betragtes drænsæsonen 98-99 ses en ganske betydelig simuleret udvaskning før drænen begynder at give vand, jf. Figur 6.3. Selvom vi korrigerer for denne udvaskning, overvurderer den simulerede udvaskning kolloidudvaskningen. Dette peger på, at modellen overvurderer mængden af udvaskelige kolloider på overfladen. Figur 6.3 viser, at der har været flere frostperioder i løbet af drænsæsonen, men den viser også, at disse perioder har været karakteriseret af ringe eller ingen drænvandsafstrømning.

I drænsæsonen 99-00 ses en ganske god overensstemmelse mellem målt og simuleret kolloidudvaskning, dog med en mindre overvurdering. Dette peger i samme retning som sæsonen før, dog mindre udtalt. Sammenlignes med Figur 6.4, ses det, at der har været noget sammenfald mellem frost/tø og drænafstrømning.

I drænsæsonen 00-01 ses modellen at undervurdere den totale kolloidudvaskning. Speciel undervurderer modellen udvaskningen i forbindelse med hændelser kort før midten af december. Sammenlignes med Figur 6.5 bemærkes det, at den meget betydelige kolloidudvaskning sker i en periode, hvor temperaturen svinger omkring frysepunktet. TDR målingerne (Figur 6.1) antyder samstemmende, at overfladen har været udsat for frost/tø i denne periode, hvilket formentligt har været med til at øge mængden af udvaskelige kolloider på jordoverfladen.

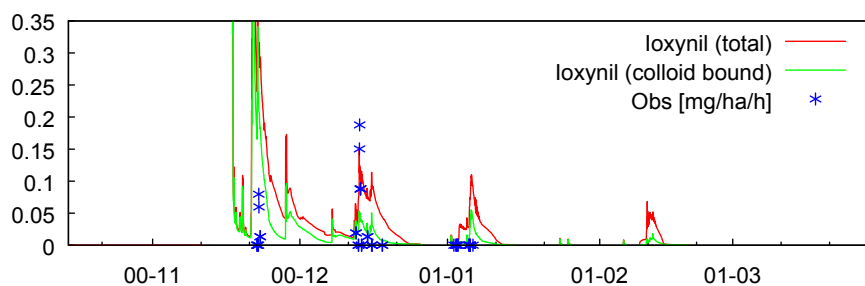
Sammenfattende vurderer vi, at modellen med rimelig sikkerhed er i stand til at prædikere hvornår kolloidudvaskning finder sted, men mht. den udvaskede mængde er der plads til/behov for betydelige forbedringer. I de viste simuleringer har vi valgt at anvende de samme parametre for hele den simulerede periode. Vi kunne have forbedret overensstemmelsen mellem observeret og simuleret kolloidudvaskning ved individuel kalibrering af delperioder, men vi mener ikke, at vi har et tilstrækkeligt teoretisk grundlag til at anvende en sådan procedure, idet vores forståelse af processen er mere kvalitativ end kvantitativ.

Målt og simuleret pendimethalinudvaskning i drænperioderne oktober 99 – april 00 og oktober 00 – april 01 er vist i Figur 6.9. Udvasningen er vist som intensiteter (mg/ha/h), da vi skønner, at datamaterialet ikke er tilstrækkeligt til at estimere den totale udvaskning over sæsonen tilfredsstillende. Det bemærkes, at modellen prædikter udvaskning på tidspunkter, hvor der ikke er målt, samt at det er den kolloidfaciliterede transport, der næsten udelukkende er ansvarlig for udvasningen. Pendimethalin binder sig ikke specielt til jordpartiklerne, men pendimethalin-udvaskning ses ofte at være korreleret med partikeludvaskning (Petersen et al., 2002; Gjettermann et al., 2009). I nærværende modellering er kolloidudvaskningen anvendt som proxy for pendimethalinudvaskningen. Den simulerede pendimethalinudvaskning ses at være af samme størrelsesorden som den målte. Den simulerede totale pendimethalinudvaskning udgjorde for de to drænperioder 99-00 og 00-01 henholdsvis 0,44 og 0,79 g/ha.



Figur 6.9 Målt og simuleret pendimethalinudvaskning i drænaflow (mg/ha/h). Øverst: Drænperioden oktober 99 – april 00. Nederst: Drænperioden oktober 00 – april 01.

Målt og simuleret ioxyniludvaskning i drænperioden oktober 00 – april 01 er vist i Figur 6.10. Af samme årsag som for pendimethalin er udvaskningen vist som intensiteter (mg/ha/h). Det bemærkes, at modellen prædikerer udvaskning på tidspunkter, hvor der ikke er målt, samt at den kolloidfacilerede transport er ansvarlig for en ikke ubetydelig del af udvaskningen. Den simulerede ioxyniludvaskning ses at være af samme størrelsesorden som den målte. Den simulerede totale ioxyniludvaskning udgjorde 0,11 g/ha i drænperioden 00-01.



Figur 6.10 Målt og simuleret ioxyniludvaskning i drænaflow (mg/ha/h). Drænperiode: oktober 00 – april 01.

Grundvandsstrømmens bidrag til drænvandet er forholdsvis lille på Rørrendegård, hvilket indebærer at bidraget fra præferentielle strømningsveje er forholdsvis stort. Dette bevirker, at effekterne af de præferentielle strømningsveje fremstår særligt tydeligt i drænvandsafstrømningen og drænvandskvaliteten. Vi mener, at nærværende analyse af Rørrendegård dataene har bidraget væsentligt til vores forståelse af de præferentielle transportprocesser.

6.2 VAP

Vi har inddraget måleresultater for perioden maj 2000 frem til april 2002 med særlig fokus på drænaflowperioderne 2000-2001 og 2001-2002.

Måleresultater er tidligere beskrevet og publiceret af Kjær et al. 2009. De benyttede måleresultater omfatter:

- Jordvandsmålinger med TDR (25 cm, 60 cm 110 cm u. terræn),
- Drænvandsmålinger,
- Koncentrationer af bromid målt i drænvand,
- Koncentrationer af glyfosat målt i drænvand,
- Koncentrationer af dimethoat målt i drænvand,
- Koncentrationer af fenpropimorph målt i drænvand,
- Koncentrationer af met amitron målt i drænvand,
- Koncentrationer af bromid målt i dybe filtre (3.5 m u. terræn),
- Koncentrationer af glyfosat målt i dybe filtre (3.5 m u. terræn),
- Koncentrationer af dimethoat målt i dybe filtre (3.5 m u. terræn),
- Koncentrationer af fenpropimorph målt i dybe filtre (3.5 m u. terræn),
- Koncentrationer af met amitron målt i dybe filtre (3.5 m u. terræn),
- Koncentrationer af bromid målt i sugeceller (1 m u. terræn).

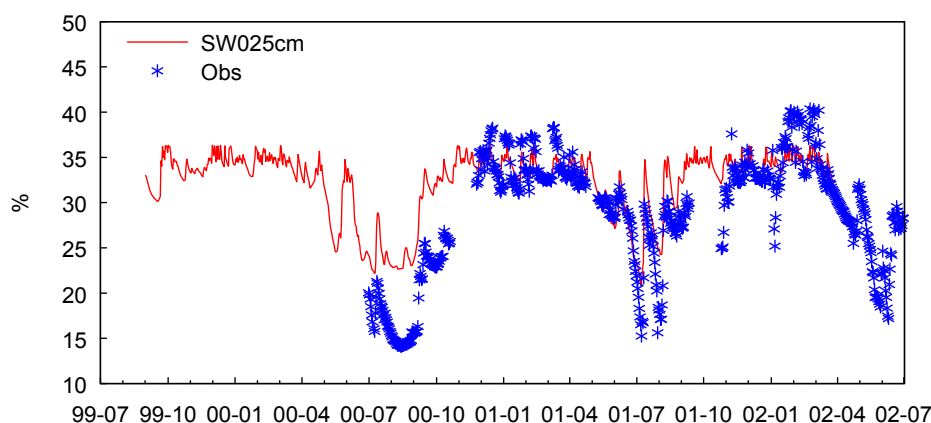
I Estrup er kun jordvandsmåleresultater fra 25 cm u. terræn tilgængelige. Met amitron er kun anvendt i Silstrup.

Jordvandsmålingerne og sugecellemålingerne er foretaget i det nord-vestlige hjørne af markerne. Pga. rumlig variabilitet anses specielt disse målingers repræsentativitet at være behæftet med en betydelig usikkerhed.

I bilaget "Daisy 2D simulation of Silstrup and Estrup" er alle måletal angivet, sammen med simulerede værdier. I dette afsnit vil de vigtigste resultater blive trukket frem.

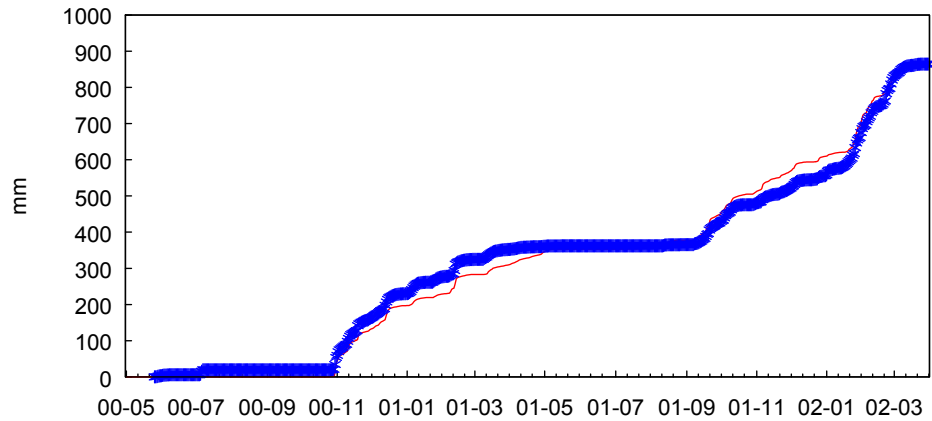
6.2.1 Estrup

I Figur 6.11 er målt og simuleret jordvands indhold vist. Når vi tager den forventede usikkerhed i betragtning vurderer vi, at overensstemmelsen mellem målt og simuleret vandindhold er tilfredsstillende.



Figur 6.11 Målt og simuleret jordvand i 25 cm dybde.

Den akkumulerede drænastrømning for perioden september 2000 til april 2002 er vist i Figur 6.12. Simuleringen viser en mindre undervurdering af drænastrømningen i afstrømningsperioden 2000-2001 og en tilsvarende mindre overvurdering i afstrømningsperioden 2001-2002.

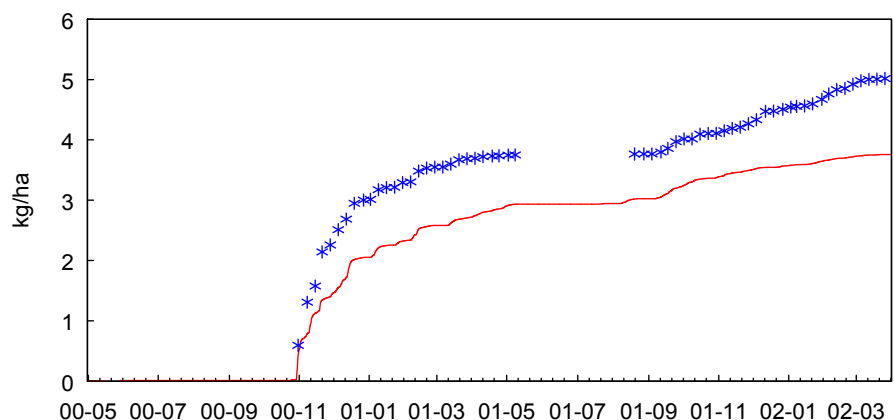


Figur 6.12 Målt og simuleret akkumuleret drænvandsafstrømning.

Vi konkluderer at vores parametriserede model overordnet giver en tilfredsstillende beskrivelse af vanddynamikken i Estrup

Bromid blev udbragt i maj 2000. I den efterfølgende vækstsæson forventes et ukendt, men betydeligt optag af bromid i afgrøden. Den akkumulerede udvaskning af bromid i drænafstrømning for perioden september 2000 til april 2002 er vist i Figur 6.13. Simuleringerne viser en klar undervurdering af udvaskningen specielt i den første afstrømningssæson. I modellen er planteoptag af bromid modelleret som en passiv proces hvor bromid følger med transpirationsstrømmen, idet der dog er antaget en reflektionsfaktor på 0,25; dvs. at 75 % af det bromid som føres frem til rødderne optages. Ved at øge reflektionsfaktoren kan vi forbedre simuleringerne, men vi har valgt at anvende samme faktor ved alle simuleringer uanset lokalitet.

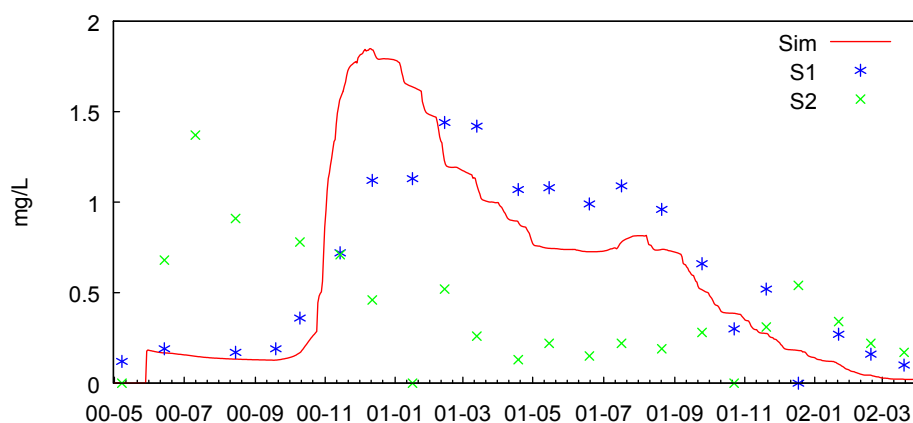
Yderligere bemærker vi, at en stor del af bromidet udvaskes til dræn i løbet af det første par måneder. I modellen er dette opnået ved at tillade en betydelig lateral transport af bromid i pløjelaget, jf. Tabel 5.4.



Figur 6.13 Målt og simuleret akkumuleret udvaskning af bromid i drænafstrømning.

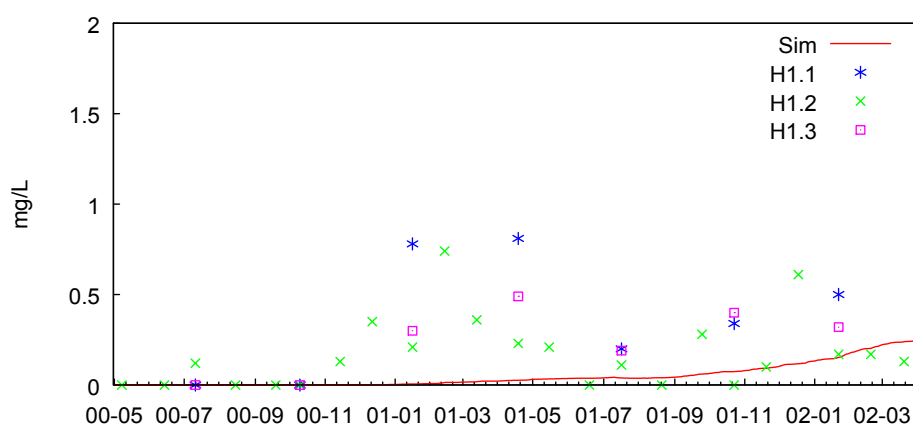
Bromidkoncentrationer målt i sugeceller er vist i Figur 6.14. Det bemærkes at der er en meget betydelig forskel mellem målingerne i position S1 og position S2 skønt de er beliggende ganske tæt på hinanden. Dette understreger den betydelige rumlige variabilitet. De målte koncentrationer er sammenlignet med de tilsvarende simulerede koncentrationer i jordvandet (gennemsnit af koncentrationerne i de 2 domæner). Der er ganske god overensstemmelse i

dynamikken og niveauet mellem simulerede værdier og målingerne ved position S1, men en betydelig forskel i dynamikken i forhold til målingerne ved S2.



Figur 6.14 Målt og simuleret bromidkoncentration i 1 m u. terræn. S1 og S2 repræsenterer målinger på 2 nærvend hinanden liggende positioner.

Bromidkoncentrationer målt i horisontale filtre 3,5 m u. terræn er vist i Figur 6.15. Det bemærkes, at det første bromid allerede ses 3,5 m u. terræn, før jorden er opfugtet, og drænsæsonen begynder. Sammenlignes målte og simulerede værdier af bromidkoncentrationen, ses det, at filtrene reagerer hurtigere end modellen forudsiger. Samtidig ses det, at målingerne viser et højere niveau end simuleringerne. Der er dog ikke størrelsesorden til forskel. Målingerne antyder at der eksisterer meget hurtige transportveje for vand og bromid ned til filtrene i 3,5 m u. terræn. Eksistensen af dybe rodkanaler (gamle trærodde) med forbindelse til jordoverfladen kunne være en mulig forklaring på dette fænomen, jf. Jørgensen et al. (2002). Vi har afholdt fra yderligere at analysere denne problematik pga. manglende data. I løbet af sommeren og efteråret 2000 falder grundvandsstanden fra lidt under drændybde, dvs. inden for bioporeområdet, til under 3,5 m under terræn (Figur 5.3). Dette kan have været medvirkende til at trække bromid ned i stor dybde.

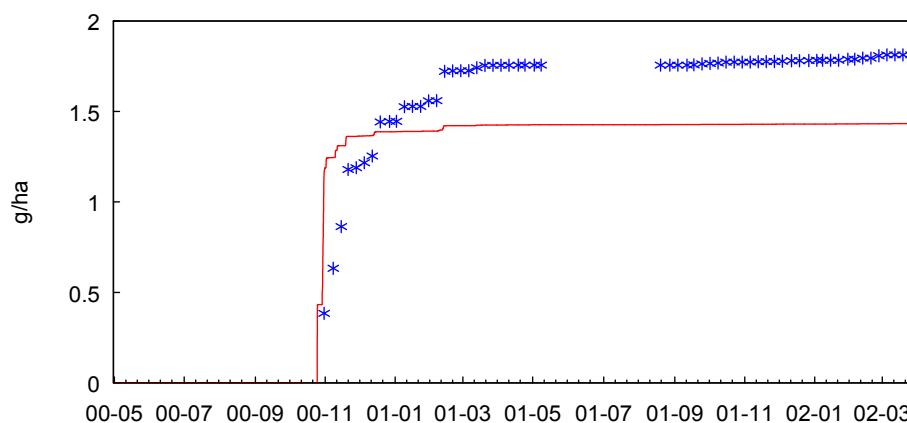


Figur 6.15 Målt og simuleret bromidkoncentration i horisontale filtre 3,5 m u. terræn. Målingerne er foretaget i 3 forskellige sektioner af filteret H1.

Vi konkluderer at bromidmålingerne ikke giver et billede af jordens transportveje, der klart afvigende fra det af modellen foreslåede. Den mest

markante afvigelse er nok undervurderingen af hvor hurtigt transportvejene ned til de horisontale filtre 3,5 m u. terræn reagerer.

Glyfosat blev udbragt i oktober 2000. Den akkumulerede udvaskning af glyfosat i drænafstrømning for perioden september 2000 til april 2002 er vist i Figur 6.16. Der ses en relativ god overensstemmelse mellem målt og simuleret udvaskning i drænafstrømningen. Det bemærkes at størstedelen af udvaskningen sker i enkelte hændelser relativt kort tid efter udbringningen. Dette prædikteres også af modellen. Efterfølgende ses en lang hale med lille udvaskning over lang tid. Dette prædikteres ikke af modellen. Det første fænomen forklares i modellen ved aktivering af de store bioporer og kolloid-faciliteret transport, kombineret med lateral vandtransport øverst i profilen, hvilket formentligt er i god overensstemmelse med virkeligheden. Det andet fænomen forklares ikke af modellen. Vi har forskellige mulige forklaringer på fænomenet. Glyfosat adsorberes især til jern og aluminium oxider; på Estrup arealet findes der mindre områder hvor undergrunden består af sand og tørv som formentlig har et lavt indhold af disse. Halen af glyfosatudvaskning kunne stamme fra denne del af arealet, idet udvaskningen herfra i givet fald ville minde om udvaskningen af et svagt sorberende stof. Alternativt kunne halen stamme fra glyfosat, som ved de store hændelser blev nedvasket til områder omkring drænet (som tracerne i feltstudiet afsnit 3.1.4) og derefter langsomt frigives til det vand, der strømmer mod drænet. Det vil kræve yderligere undersøgelser at afgøre hvilken af forklaringerne, der bedst forklarer fænomenet.



Figur 6.16 Målt t og simuleret akkumuleret udvaskning af glyfosat i drænafstrømning.

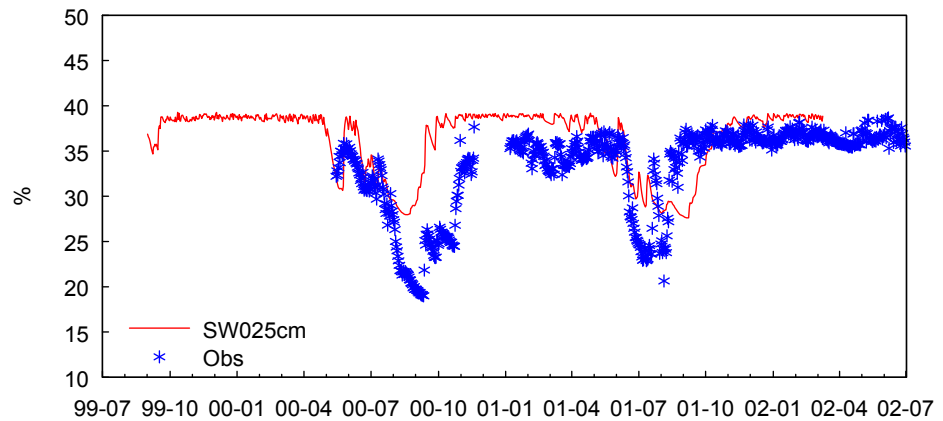
Den simulerede glyfosat koncentration i de horisontale filtre 3,5 m u. terræn er i koncentrationsområdet femtogram per liter, hvilket er langt under detektionsgrænsen. Ved målingerne blev der ikke fundet glyfosat i filtrene.

Hverken målinger eller simuleringer viste koncentrationer af dimethoat eller fenpropimorph over detektionsgrænsen i drænvand eller i vandprøver fra de horisontale filtre 3,5 m u. terræn.

6.2.2 Silstrup

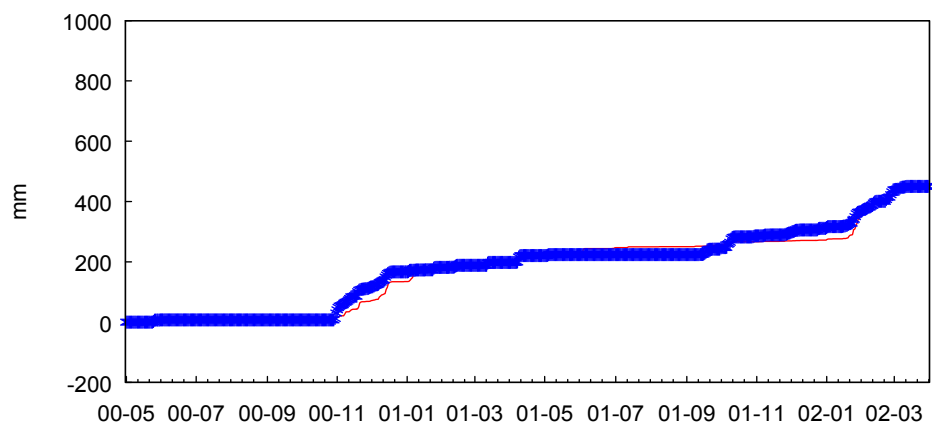
I Figur 6.17 er målt og simuleret jordvandsindhold i 25 cm dybde vist. Når vi tager den forventede usikkerhed pga. stor rumlig variabilitet i betragtning vurderer vi, at overensstemmelsen mellem målt og simuleret vandindhold er tilfredsstillende. I dybden 60 cm udviste målingerne ikke den forventede

årsvariation, men var bortset fra mindre udsving næsten konstant hen over året. Niveauet for målt og simuleret jordvandsindhold var overensstemmende. Også 110 cm dybde var det målte jordvandsindhold næsten konstant hen over året. Niveauet for simuleret jordvandsindhold lå ca. 5 volumenprocent under det målte. Det simulerede jordvandsindhold lå tæt på mættet vandindhold for det pågældende jordlag, som er givet ved parametriseringen af modellen. Så enten er parametriseringen, der bygger på jordfysiske målinger, eller TDR-målingerne fejlbehæftet eller også må divergensen tilskrives rumlig variation.



Figur 6.17 Målt og simuleret jordvand i 25 cm dybde.

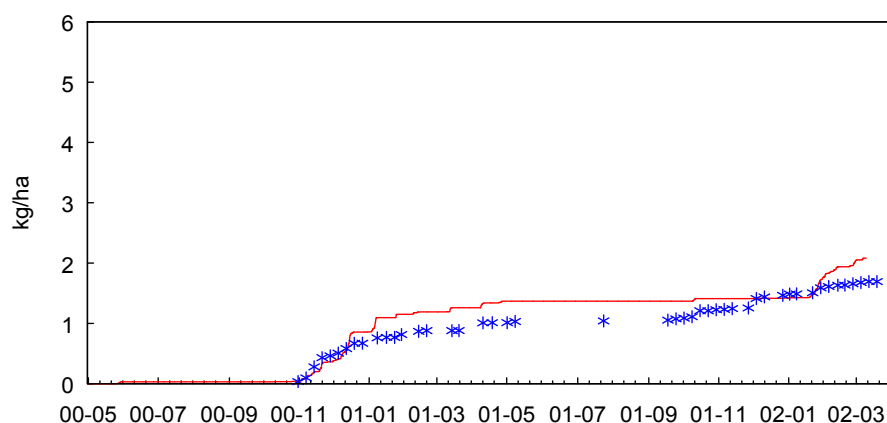
Den akkumulerede drænastrømning for perioden september 2000 til april 2002 er vist i Figur 6.18. Som for Estrup viser simuleringen en mindre undervurdering af drænastrømningen i afstrømningsperioden 2000-2001 og en tilsvarende mindre overvurdering i afstrømningsperioden 2001-2002. Ved simuleringerne er det antaget, at jorden efter jordbehandling danner en skorpe med lav hydraulisk ledningsevne. En sådan skorpe fremmer pytdannelse på overfladen og genereringen af hændelser med makroporestrømning fra overfladen. Tømning af makroporer er, med undtagelse af dem, der har direkte forbindelse med dræn, generelt en langsom proces i sammenligning med fyldning. Ved kraftig nedbør blev der dannet pytter på jordoverfladen, og en stor del af makroporerne er blevet fyldt med vand. Efterfølgende har dette givet anledning til refordeling af vand på jordoverfladen. Endvidere har dette resulteret i, at vand fra overfladen via makroporer er strømmet direkte til dræn.



Figur 6.18 Målt og simuleret akkumuleret drænvandsafstrømning.

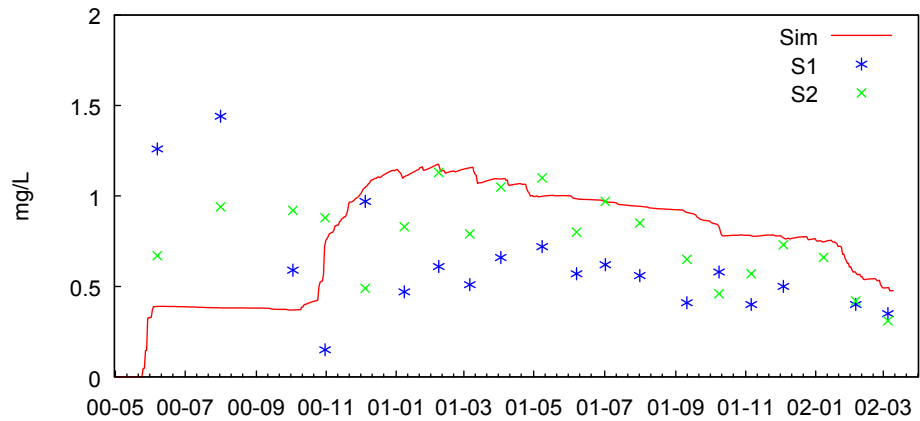
Vi konkluderer, at vores parametriserede model overordnet giver en tilfredsstillende beskrivelse af vanddynamikken i Silstrup.

Bromid blev udbragt i maj 2000 kort efter jordbehandling. Da overfladen på dette tidspunkt forventes at være meget porøs, forventes bromiden at være trængt ned i jorden ved de efterfølgende nedbørshændelser. Efterfølgende forventes jordoverfladen at slæmme til og danne en skorpe. Herefter forventes den hurtige transportvej fra pytter på jordoverfladen til dræn, der er nævnt ovenfor, at blive aktiveret under kraftig regn. Dette giver anledning til strømning uden om jordmatrix, og bromid, der befinder sig i jordmatrix, bliver således ikke påvirket af strømningen. Nedvaskning af bromid bliver derfor langsommere end det ville have været tilfældet, hvis al strømning var foregået i matrix. Yderligere forventes det, at der i løbet af vækstsæson vil ske et ukendt men betydeligt optag af bromid i afgrøden. I modellen er planteoptag af bromid modelleret på samme måde og med de samme parametre som ved Estrup. Den akkumulerede udvaskning af bromid i drænastrømning for perioden september 2000 til april 2002 er vist i Figur 6.19. Simuleringerne viser kun en mindre overvurdering af udvaskningen i forhold til målingerne. På baggrund heraf accepterer vi den foreslåede model.



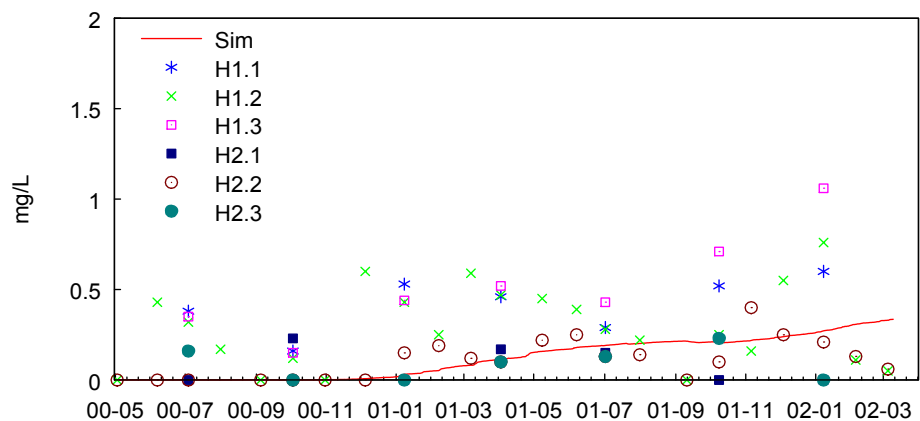
Figur 6.19 Målt og simuleret akkumuleret udvaskning af bromid i drænastrømning.

Bromidkoncentrationer målt i sugeceller er vist i Figur 6.20. Det bemærkes at der er nogen forskel mellem målingerne i position S1 og position S2. Forskellen er dog væsentlig mindre end observeret ved Estrup. I sig selv er observationerne ikke tilstrækkelige til at konkludere, at den rumlige variabilitet er mindre i Silstrup end i Estrup. De målte koncentrationer er sammenlignet med de tilsvarende simulerede koncentrationer i jordvandet (gennemsnit af koncentrationerne i de 2 domæner). Der er ganske god overensstemmelse i dynamikken og niveauet mellem simulerede værdier og målingerne.



Figur 6.20 Målt og simuleret bromidkoncentration i 1 m u. terræn. S1 og S2 repræsenterer målinger på 2 nærvæd hinanden liggende positioner.

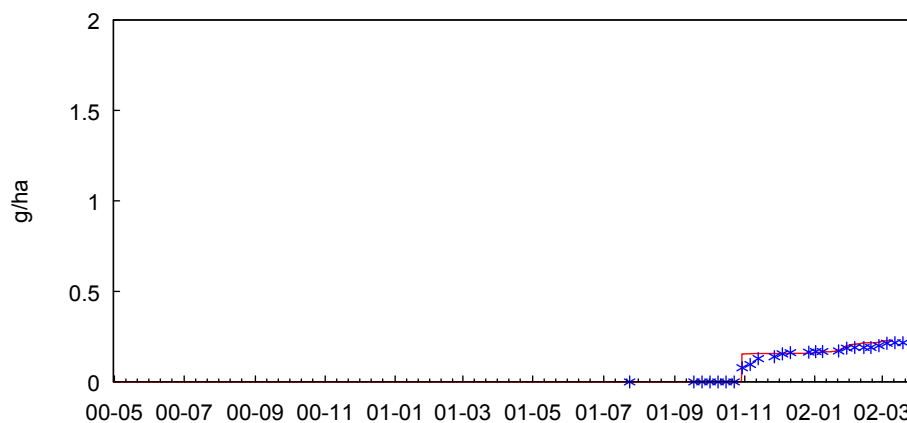
Bromidkoncentrationer målt i horisontale filtre 3,5 m u. terræn er vist i Figur 6.21. Det bemærkes, at det første bromid allerede ses 3,5 m u. terræn før jorden er opfugtet og drænsæsonen begynder. Dette fænomen ses endnu tydeligere på Silstrup end på Estrup. Som på Estrup ses det, at grundvandsstanden i løbet af sommeren og efteråret 2000 falder til under 3,5 m under terræn (Figur 5.4). Så formentligt er det samme mekanisme, der er ansvarlig for fænomenet. Fænomenet er i særlig grad tydeligt for filter H1. Sammenlignes målte og simulerede værdier af bromidkoncentrationen ses det, at specielt filter H1 reagerer hurtigere end modellen forudsiger, medens der er ganske god overensstemmelse mellem målingerne i filter H2 og simuleringerne. Samtidig ses det at målingerne i H1 viser et højere bromidkoncentrations niveau end simuleringerne gør. Der er dog ikke størrelsesorden til forskel. At allerede de første målinger i H1 viser relativt høje bromidmålinger kunne fortolkes som en baggrundsværdi, det er imidlertid vanskeligt at forklare hvorfor en sådan skulle stamme. Fratrækkes denne "baggrundsværdi" måleresultaterne observeret i H1 ses en lille stigning i bromidkoncentrationen som modsvarer den simulerede stigning.



Figur 6.21 Målt og simuleret bromidkoncentration i horisontale filtre 3,5 m u. terræn. Målingerne er foretaget i 2 filtre (H1 og H2) og i 3 sektioner i hvert filter.

Vi konkluderer, at bromidmålingerne giver et billede af jordens transportveje, der ikke på afgørende vis afviger fra det af modellen foreslåede.

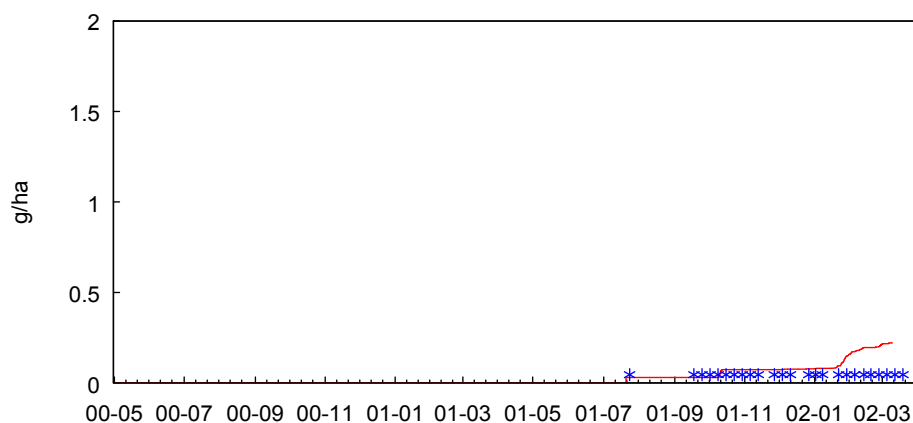
Glyfosat blev udbragt i den 25. oktober 2001. Den akkumulerede udvaskning af glyfosat til dræn for perioden september 2001 til april 2002 er vist i Figur 6.22. Der ses en god overensstemmelse mellem målt og simuleret udvaskning i drænastrømningen. Det bemærkes at størstedelen af udvaskningen sker i en enkelt hændelse den 29. oktober. Denne hændelse var den første nedbørshændelse efter udbringning, der resulterede i makroporestrømning. Hændelsen var dog ikke særligt voldsom og har sandsynligvis ikke mobiliseret en betydende mængde kolloider. Mellem den 25. og 29. oktober var der 3 mindre nedbørshændelse (max. 0,5 mm/h), der potentielt kunne havde nedvasket det udbragte glyfosat i pløjelaget og bragt det i kontakt med jordmatrix med adsorption og beskyttelse mod udvaskning til følge. Som tidligere nævnt befandt der sig på dette tidspunkt en ret betydelig mængde plantemateriale på marken. Vi har antaget en del af det udbragte glyfosat blev fanget i dette plantemateriale og efterfølgende blev vasket ud af dette "magasin" (glyfosat binder sig ikke sig til strå (Gjettermann et. al 2009)). Ved begyndelsen af hændelsen den. 29. oktober prædikerede modellen at knap 15% af det udbragte stadig befandt sig i det efterladte plantemateriale og dermed potentielt kunne være udsat for udvaskning. Antagelsen om at glyfosat blev intercepteret i planterester på jordoverfladen er afgørende for en succesfuld modellering af glyfosatudvaskningen i dette tilfælde.



Figur 6.22 Målt og simuleret akkumuleret udvaskning af glyfosat i drænastrømning.

Både den målte og simulerede glyfosatkoncentration i de horisontale filtre 3,5 m u. terræn er under detektionsgrænsen.

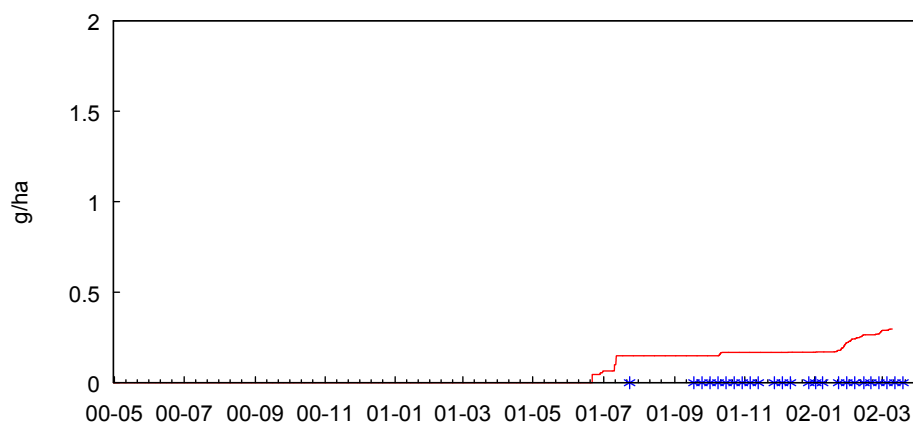
Dimethoat blev udbragt sommeren 2001. Figur 6.23 viser målt og simuleret akkumuleret udvaskning. Der ses at både målt og simuleret udvaskningen er meget lille. Simuleringerne viser dog en jævn udvaskning i slutningen af perioden. Tilsvarende genfindes ikke i målingerne. Der skal dog nævnes at den simulerede udvaskning i slutningen af perioden skyldes en akkumulering af udvaskning med koncentrationer under detektionsgrænsen.



Figur 6.23 Målt og simuleret akkumuleret udvaskning af dimethoat i drænafstrømning.

Både den målte og simulerede dimethoatkonzentration i de horisontale filtre 3,5 m u. terræn er under detektionsgrænsen.

Fenpropimorph blev udbragt 2 gange i løbet af sommeren 2001. Figur 6.24 viser målt og simuleret akkumuleret udvaskning. Modellen prædikerer en mindre udvaskning der ikke underbygges af målingerne. Størsteparten af den simulerede udvaskning til dræn sker i perioder om sommeren, der ikke har givet anledning til drænafstrømning. Modellen har prædikeret udvaskning til dræn. Dette kan muligvis være korrekt, men efterfølgende er vandet (med fenpropimorph) sivet ud af drænledningen igen. I drænperioden efter udbringning simuleres en meget lille udvaskning, som ovenfor skyldes dette en akkumulering af udvaskning med koncentrationer under detektionsgrænsen.

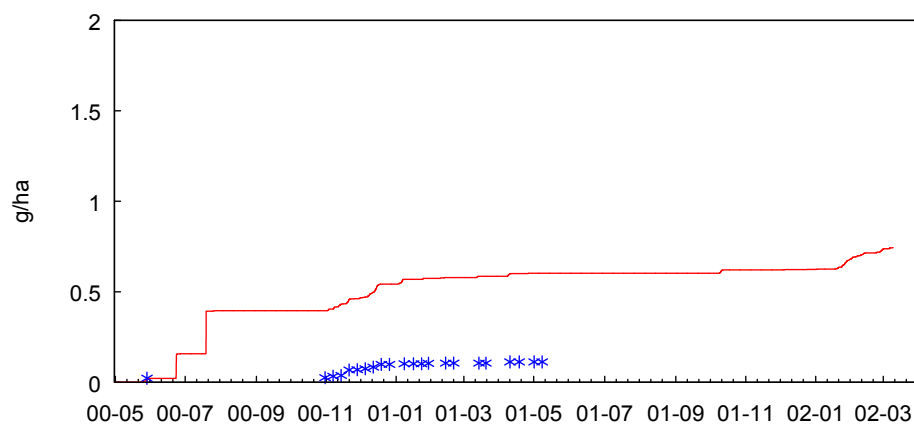


Figur 6.24 Målt og simuleret akkumuleret udvaskning af fenpropimorph i drænafstrømning.

Både den målte og simulerede fenpropimorph koncentration i de horisontale filtre 3,5 m u. terræn er under detektionsgrænsen.

Metamitron blev udbragt 3 gange i løbet af sommeren 2000. Figur 6.25 viser målt og simuleret akkumuleret udvaskning. Umiddelbart ses en meget betydelig overvurdering af udvaskningen. Størsteparten af udvaskningen til dræn sker i perioder om sommeren, der ikke har givet anledning til drænafstrømning. Modellen har prædikeret udvaskning til dræn via de store bioporer. Igen, dette kan muligvis være korrekt, men efterfølgende er vandet (med metamitron) sivet ud af drænledningen igen. At der blev fundet bromid

i de dybe filtre allerede inden afstrømningssæsonen begyndte, antyder at hurtige transportveje blev aktiveret i løbet af sommeren, og da en væsentlig del af disse transportveje er de store bioporer, peger bromidmålingerne på, at de store bioporer faktisk har været aktiveret i løbet af sommeren. I selve afstrømningsperioden ses en mindre overvurdering af udvaskningen. Som for fenpropimorph viser simuleringerne en jævn udvaskning i slutningen af perioden, en udvaskning der ikke genfindes i målingerne, hvilket kan forklares med koncentrationer der ligger under eller nær detektionsgrænsen



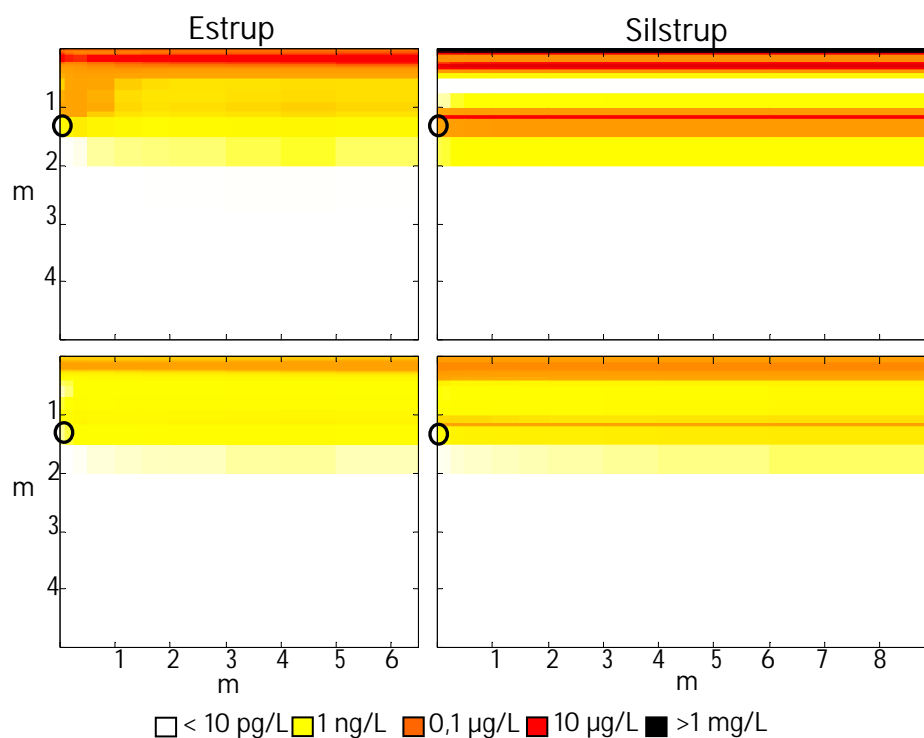
Figur 6.25 Målt og simuleret akkumuleret udvaskning af metatoltrone i drænafstrømning.

Både den målte og simulerede metatoltrone koncentration i de horisontale filtre 3,5 m u. terræn er under grænsenværdien.

7 Scenarieanalyser

7.1 Analyse af Vap-simuleringerne

Der er ikke fundet afgørende systematiske forskelle mellem fordelingen af makroporer i drængrøft og mellem dræn. Den mest markante forskel er, at der i nærheden af dræn findes makroporer, der er direkte forbundet med drænledningerne, eller som ender i umiddelbar nærhed af drænledningerne. Hydraulisk forventes disse makroporer at opføre sig anderledes end makroporer, der ender mellem dræne. Denne forskel alene forventes at kunne give anledning til forskelle i udvaskning i drængrøften og mellem dræn. For at belyse denne problematik har vi med udgangspunkt i vores opsætning af VAP markerne (se kapitel 5 samt bilag "Daisy simulation of Silstrup and Estrup") set på den simulerede glyfosatkonzentration i jordvandet som funktion af tid og rum (Figur 7.1). Vi har valgt at vise hele det areal der er blevet simuleret.



Figur 7.1 Glyfosat i porevand ved Estrup (venstre) og Silstrup (højre). Øverst: koncentrationsprofil ved slutningen af udbringningsmåneden. Nederst: koncentrationsprofil ved afslutning af den efterfølgende drænsæson. Bemærk at begge "scenarier" er resultat af en kalibrering til målte data (se kapitel 6 samt bilag "Daisy simulation of Silstrup and Estrup"), der for Silstrups vedkommende involverede en betydelig grad af konceptuel modeludvikling. Scenarierne i dette afsnit er altså her ikke hypotetiske, og der er derfor ikke udført nogen egentlig følsomhedsanalyse, udover de erfaringer der blev opsamlet under kalibreringsarbejdet.

Glyfosatudvaskningen ved Estrup skete hovedsagelig i forbindelse med en enkelt kraftig regnhændelse, der genererede en betydelig

drænvandsafstrømning. Figur 7.1 viser koncentrationsfordelingen i profilen ved afslutningen af den måned, hvor glyfosat blev udbragt (kort efter ovennævnte hændelse), og efter vinterudvaskningen ved afslutning af drænsæsonen. Figuren (øverst til venstre) repræsenterer fordelingen umiddelbart efter den hændelse, der i slutningen af oktober står for hovedparten af sæsonens glyfosatudvaskning. Der ses relativt høje koncentrationer over drænet og lave koncentrationer under set i forhold til situationen længere væk fra drænet. Dette er i overensstemmelse med vandets bevægelsesretning og at der i 1 meters dybde simuleres en betydelig større udvaskning i drængrøften (ca. 39 g/ha), sammenlignet med hvad der sker mellem drænene (ca. 2 g/ha). Det bemærkes, at koncentrationen i den øverste del af jorden hurtigt når op på et niveau, der er væsentligt over grænsen for drikkevand (0.1 µg/L). Dette niveau falder dog til et niveau, der svarer til drikkevandsgrænsen efter drænsæsonens udvaskning. I drændybde og specielt ved drængrøften ses også hurtigt et koncentrationsniveau svarende drikkevandsgrænsen. Dette falder dog til et væsentligt lavere niveau ved afslutning af drænsæsonen. I drændybde opstår hurtigt en vandret gradient i glyfosatkoncentrationen. Dette er en tydelig afspejling af den effektivitet, hvormed de aktive bioporer har bragt glyfosat ned i profilen. Under drænet ses en relativ lav glyfosatkoncentration i overensstemmelse med, at vandstrømmen her ofte er opadrettet mod drænet. At det netop er i drændybde, at der optræder relativt høje glyfosatkoncentrationer kort efter udbringning, er i overensstemmelse med, at det er den dybde, hvortil de store bioporer når (i realiteten hvordan vi har valgt at parameterisere bioporerne). Under 2 meter ses et meget lavt niveau omkring 1 pg/L. Simuleringerne har vist et koncentrationsniveau op til omkring drikkevandsgrænsen, så længe vi befinder os inden for bioporedomænet, men det falder betydeligt, når vi bevæger os ud af denne zone.

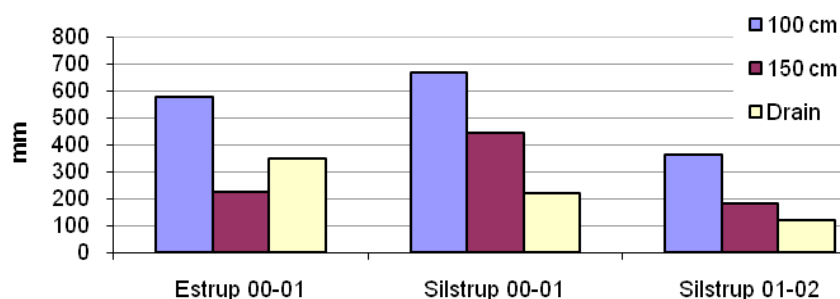
Glyfosatudvaskningen ved Silstrup skete også hovedsageligt i forbindelse med en enkelt regnhændelse, men ved Silstrup var hændelsen kun lige akkurat stor nok til at generere makroporestrømning. Den nedvaskede glyfosat var før hændelsen interceperet af planterester på jordoverfladen og var derfor fordelt over hele arealet (afstand til dræn var uden betydning). Figur 7.1 (øverst til højre) viser koncentrationsfordelingen i profilen ved afslutningen af den måned, hvor glyfosat blev udbragt, dvs. kort efter omtalte regnhændelse. På figuren ses, at koncentrationsfordelingen med god tilnærmelse ikke afhænger afstanden fra dræn (bortset fra en lidt lavere koncentration umiddelbart over drænet). Til gengæld ses en betydelig variation med dybden. Denne variation er bestemt af transport i de store bioporer og er derfor meget afhængig af makroporemodellens parameterisering. På Figur 6.22 ses en svagt stigende akkumuleret udvaskning til dræn i tiden efter regnhændelsen. Dette er i overensstemmelse med den betydelige nedvaskning til drændybde i forbindelse med regnhændelsen.

Figur 7.1 (nederst til højre) viser koncentrationsfordelingen i profilen efter vinterudvaskningen ved udgangen af drænsæsonen. Det ses, at der er sket en yderligere nedvaskning og at der er opbygget en svag koncentrationsgradient hen mod drænet. Samtidig er de meget kraftige gradienter i den vertikale retning blevet mindre. I dette tilfælde forventes ikke den store forskel i koncentrationer i det vand, der fra områderne omkring dræn strømmer til dræn, og det vand, der fra drændybde bevæger sig nedad i profilet. Imidlertid simuleres der gennem drænsæsonen et betydeligt bidrag til drænastrømningen via de store bioporer (ca. 25% af den samlede drænastrømning). Dette vand vil have en glyfosatkoncentration, der i

perioder afviger fra grundvandsbidraget til drænastrømningen. I visse perioder vil drænvand (DV) altså være ganske repræsentativt for vand, som går uden om drænene (UV) til andre tider ikke. Under 2 meter ses også på Silstrup et meget lavt niveau omkring 1 pg/L. Nedvaskningen af glyfosat til under denne dybde er altså helt ubetydelig.

Forskellene på Figur 7.1 mellem de 2 lokaliteter afspejler samlet set især grundvandsstanden ved den primære hændelse, hvor glyfosat blev ført ned i jorden. På Estrup stod grundvandet højt, og glyfosaten blev ført ned til bunden af den umættede zone. På Silstrup hvor grundvandet stod relativt lavt, blev glyfosaten ført ned til bunden af bioporerne. I vores opsætning, baseret på Rørrendegårddata, er det 1.2 m.u.t. Men hvor dybt glyfosaten ifølge modelberegningerne vil blive transporteret, vil i denne situation helt afhænge af, hvor nedre grænse for bioporeområdet er defineret til i parametriseringen.

For yderligere at belyse problematikken omkring DV og UV samt udbredelsen af bioporeområdet er perkolationen i 100 cm (inden for bioporeområdet, lige over drændybde, DV+UV), perkolationen i 150 cm (under bioporeområdet, under drændybde, UV) og afstrømningen i dræn (DV) vist i Figur 7.2. Fluxene er opgjort over drænastrømningssæsonerne 00-01 i Estrup samt 00-01 og 01-02 i Silstrup.

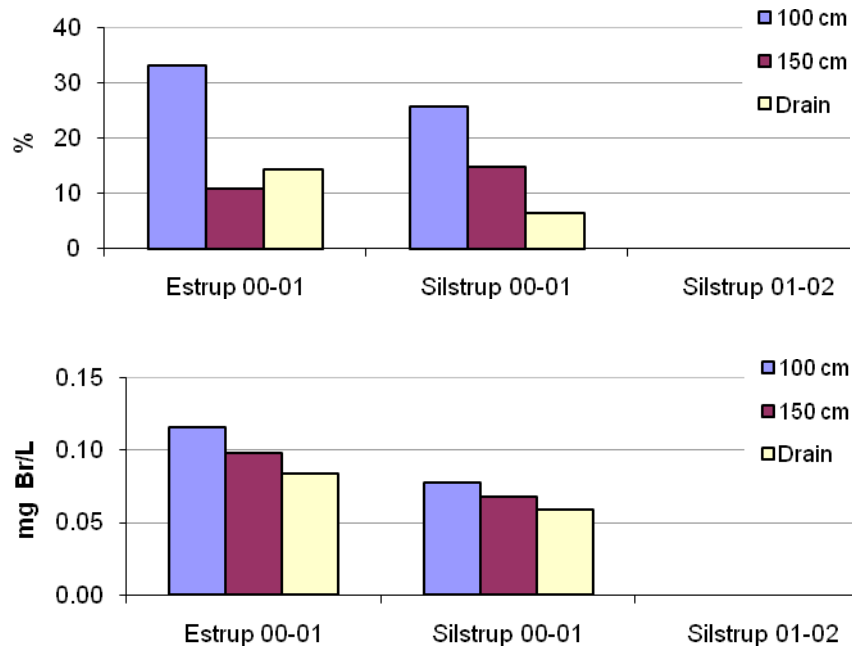


Figur 7.2 Perkolation i 100 cm, perkolation i 150 cm og afstrømningen i dræn.

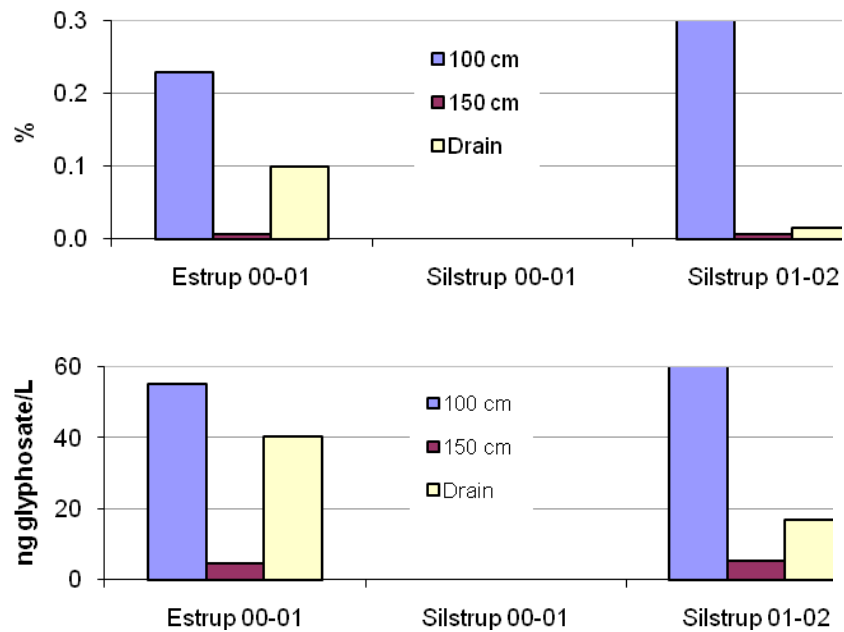
Figuren viser en forskellig fordeling af den samlede afstrømning (DV+UV) mellem afstrømning i dræn (DV) og dyb perkolation (UV) for de 2 lokaliteter.

Figur 7.3 viser de til Figur 7.2 svarende stoffluxe for bromid samt de til stoffluxene associerede bromidkoncentrationer. Bromidfluxene udviser det samme mønster som vandfluxene, hvilket kunne indikere en relativ ensartet bromidkoncentration. De simulerede bromidkoncentrationer er da heller ikke meget forskellige. At koncentrationen i 100 cm er højere end i 150 cm er måske ikke så overraskende, men at koncentrationen i drænvandet er mindre end i 150 cm kan forekomme overraskende. Dette understreger, at vand der perkolerer ud af 150 cm (UV) ikke har helt samme oprindelse som drænvandet (DV). At kun omkring 30% af det tilførte bromid udvaskes til under 100 cm forklares ved at en betydelig del af den tilførte bromid er endt som planteoptag i løbet af vækstperioden før drænastrømningssæsonen.

Figur 7.4 viser de til Figur 7.2 svarende stoffluxe for glyfosat samt de til stoffluxene associerede glyfosatkoncentrationer. Glyfosat blev udbragt i efteråret.



Figur 7.3 Bromidfluxe udtrykt som procent af udbragt stof i 100 cm, i 150 cm og i dræn (øverst) samt tilsvarende bromidkoncentrationer (nederst)

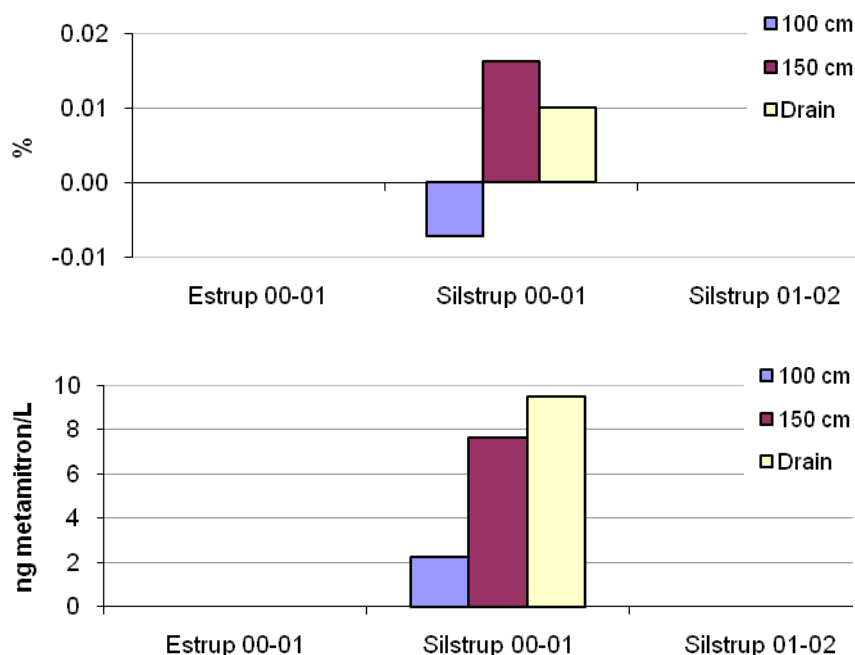


Figur 7.4 Glyphosatfluxe udtrykt som procent af udbragt stof i 100 cm, i 150 cm og i dræn (øverst) samt tilsvarende glyphosatkonzentrationer (nederst). I Silstrup var fluxen i 100 cm ca. 1.3% og den tilsvarende koncentration ca. 0.48 μ g/L.

Indledningsvis kan bemærkes glyphosatfluxe og -koncentrationer er stærkt afvigende fra de tilsvarende bromidfluxe og -koncentrationer. Dette er forventeligt, da glyphosattransporten er domineret af særlige hændelser. Særligt bemærkes den meget høje glyphosatflux og -koncentration ved 100 cm grænsen i Silstrup. Som ovenfor nævnt skyldtes denne omstændighederne ved en relativ beskeden nedbørshændelse kort efter at glyphosat var udbragt. I det videre forløb er en mindre del af det nedvaskede glyphosat transporteret til dræn eller ud af de øverste 150 cm. Drænfluxen er den største og den med

den højeste glyfosatkoncentration af de 2 fluxe. Dette er forventeligt da en del af fluxen til dræn skyldes direkte forbundne makroporer fra overfladen til drænen.

Sammenlignes glyfosatfluxene inden for bioporedomænet (100 cm) med de tilsvarende uden for bioporedomænet (150 cm) ses en forskel på mindst en størrelsesorden. Dette understreger betydningen af om fluxene bestemmes inden for eller uden for dette domæne. For de viste tilfælde er den gennemsnitlige glyfosatkoncentration i drænvandet (DV) mindst 3 gange koncentrationen i den dybe perkolation (UV). Dette peger igen på den forskellige oprindelse af DV og UV.



Figur 7.5 Metamitronfluxe ved Silstrup (2000-01) udtrykt som procent af udbragt stof i 100 cm, i 150 cm og i dræn (øverst) samt tilsvarende metamitronkoncentrationer (nederst).

Figur 7.5 viser de til Figur 7.2 svarende stoffluxe for metamitron ved Silstrup samt de til stoffluxene associerede metamitronkoncentrationer. Metamitron blev udbragt tre gange i løbet af forår og sommer år 2000. To hændelse inden drænastrømningssæsonen resulterede i nedvaskning af metamitron. I drænastrømningssæsonen var der igen hændelser, der i særlig grad gav anledning til metamitronnedvaskning. Metamitronfluxen i 100 cm er negativ for drænastrømningssæsonen, dvs. fluxen har været opadgående. Det ses, at fluxen gennem 150 cm har været større end drænfluxen, hvilket skyldes at metamitron fra bunden af bioporedomænet er transporteret yderligere ned i jordprofilen inden drænastrømningssæsonen begyndte. Modsat viser koncentrationerne højere værdier i drænvandet (DV) end i den dybe perkolation (UV). Igen en understregning af den forskellige oprindelse af DV og UV. Endeligt skal bemærkes, at koncentrationerne er meget små.

Ud fra den mere detaljerede analyse, der kan findes i bilaget "Daisy simulation of Silstrup and Estrup", appendiks B og C, side 49 til 84, kan vi desuden se, at de laterale strømningsmønstre i de to opsætninger er forskellige. For Estrup har vi simuleret en betydelig lateral strømning i

pløjelaget, der ikke foregår i nær samme grad ved Silstrup. Her er der til gengæld en vis horisontal strømning på jordoverfladen. Dette er også en medvirkende årsag til forskellen mellem DV og UV.

Generelt for simuleringerne er, at vi kun har analyseret transportmønsteret i én drænastrømningssæson efter udbringning. Fælles for simuleringerne er også, at vi har fulgt FOCUS-anbefalingen om, at et pesticid ikke nedbrydes, når det har forladt den øverste meter. Da vores bioporedomæne ender under 1 m kan denne antagelse få en afgørende betydning for resultatet af en langtidssimulering. Vi har derfor afstået fra at gennemføre sådanne langtidssimuleringer i nærværende analyse.

Hovedresultaterne af analysen er:

- Det er af meget stor betydning for simuleringens resultater om nedadgående stoffluxe beregnes i en dybde, der er inden for bioporedomænet eller uden for dette domæne.
- Der er ingen simpel sammenhæng mellem drænvandskoncentrationer og koncentrationer i vand, der bevæger sig uden om drænene til grundvandet.

7.2 FOCUSberegninger

Vi har sammenlignet simuleret dynamisk udvaskning og nedsivning beregnet af Daisy med MACRO-opsætningen fra FOCUS' overfladescenerier Vredepeel (D3) og Skousbo (D4) for testpesticiderne 1, 2 og 3, samt med de uofficielle Langvad- og Karup- FOCUS-grundvandsscenerier for testpesticiderne A, B og C. De i Daisy anvendte egenskaber for pesticiderne er opremset i Tabel 7.1. Vredepeel er en hollandsk mark, hvor drænet er en kanal med en specificeret afstand på 76 meter fra beregningspunktet. Skousbo og Langvad er danske drænedede marker, og Karup er en udrænet mark.

Tabel 7.1 De valgte pesticider.

	KOC [ml/g]	DT50 [d]	Afgrøde	Mængde [kg/ha]
1	15	6	Kartofler	3
2	91	26	Majs	1
3	1	1.5	Vinterhvede	1
A	103	60	Vinterhvede	1
B	17	20	Vinterhvede	1
C	172	20	Vinterhvede	1

Konceptuelt adskiller MACRO sig fra Daisy specielt ved følgende:

- MACRO er en 1D model. I Daisy kan vælges 1D eller 2D. I nærværende sammenligning er 2D-beskrivelsen valgt i scenarier med dræn, mens 1D-beskrivelsen er valgt i scenarier uden dræn.
- MACRO er en såkaldt dobbeltporøsitetmodel, hvor makroporestrømning er beskrevet ved gravitationsstrømning i makroporedomænet (transporthastigheden afhænger derfor af den hydrauliske ledningsevne i dette domæne). I Daisy er makroporestrømning beskrevet ved at regne på en række diskrete bioporeklasser, hvor transporten foregår momentant, og som aktiveres og deaktiveres afhængig af tilstanden i bioporen og tilstanden i den omgivende jord. Transporthastigheden bliver her afhængig af hvor hurtigt en aktiveret biopore fødes af den omgivende jord. Dette betyder, at makroporetransport over større afstande (~1 m) ofte foregår hurtigere i Daisy end i MACRO.

7.2.1 Opsætning

Opsætning af MACRO er hentet fra FOCUS-hjemmesiden, og er ikke modificeret. For opsætningen af Daisy har vi valgt at forsøge at give et bud på hvordan en opsætning af Daisy for samme system typisk ville se ud, baseret på vores erfaringer fra Rørrendegård og VAP simuleringerne, snarere end ved at emulere hvordan MACRO er sat op. Forskelle inkluderer:

Vejr: MACRO bruger en stokastisk model til fordeling af dagsværdier for nedbør på timer. Daisy placerer nedbøren i starten af døgnet. Vi har dog valgt at bruge den samme nedbørsintensitet som MACRO.

Forvaltning: Stort set kopieret fra MACRO, blot bruger vi Daisys generelle afgrødemodeller, i stedet for de stedsspecifikke afgrødemodeller brugt i MACRO. Dog, da der ikke er angivet såtidspunkt som man normalt vil bruge i Daisy, bruger vi her fremspiringstidspunkt i stedet. Desuden er den jordafhængige maksimale roddybde i Daisy estimeret fra de stedsspecifikke afgrøder i MACRO. Datoer og mængder for vanding og sprøjtning er taget fra MACRO.

Hydrauliske egenskaber: De hydrauliske egenskaber for mikroporedomænet er kopieret fra MACRO. Dog er ledningsevnen i de øverste 8 cm under pløjelaget sat ned til 10 % for at simulere en pløjesål. For makroporedomænet bruger vi opsætningen fra Rørrendegård.

Kolloidfaciliteret transport: Kolloidfaciliteret transport var ikke slået til i den version af MACRO som blev brugt i FOCUS. Vi har det med i Daisy opsætningen med samme parametre (justeret for ler) som for Rørrendegård.

Overflade: Pesticider i MACRO-opsætning bliver påført som en vandingshændelse (0,1 mm vand). I Daisy har vi valgt at bruge den normale funktion til sprøjtning, som påfører stoffet i ren form. Det kan give en væsentlig forskel, da pesticider i vandig opløsning kan trænge ind i jordmatricen, og ligge beskyttet der. I Daisy vil de ligge på overfladen, og kunne trænge ind i bioporer, hvis der kommer en større hændelse. Desuden vil de kunne transporteres på overfladen, hvis bioporerne mellem dræn ikke har kapacitet til at opfange alt vandet.

Nedre rand: Beskrivelsen af nedre rand i drænede jorde er forskellig. Vi har kalibreret den totale afdræning på plads for Langvad, men ikke for de to øvrige, hvor der blot bruges standardparametre. For den udrænede jord i Karup er der ikke forskel på de to modeller.

Dræn og numerik: Begge modeller opdeler jorden i en række vandrette beregningssnit, for drænede marker bliver jorden i Daisy desuden opdelt i en række lodrette beregningssnit, der repræsenterer forskellig afstand til dræn. MACRO benytter i stedet en simpel 1D-approksimation af den vandrette transport til dræn. Tiden for en simulering afhænger af antallet af celler (antal vandrette snit gange antal lodrette snit) i inddelingen, i værste fald opløftet i tredje potens, og stiger således betydeligt, når man regner i to dimensioner. Vi har derfor valgt at køre med en grovere opdeling i Daisy, end der var brugt i MACRO.

7.2.2 Resultater

Der blev kørt 6 års opvarmning med samme afgrøde og anvendelse af pesticider. Udvaskning de efterfølgende 16 måneder er vist på Figur 7.2 og 7.3 for overfladescenarierne. Øverste plot viser klar forskel på de tre grafer for vand for hver model, svarende til de tre forskellige pesticider. Dette skyldes brugen af forskellige afgrøder, med forskellig vanding, roddybde og fordampning. Dyb udvaskning de efterfølgende 20 år er vist på Figur 7.4 for overfladescenarierne. FOCUS-opsætningen af MACRO for grundvandsscenarierne inkluderede ikke log af udvaskning til dræn.

Dyb udvaskning (UV) svarer til bunden af beregnings søjlen, hvilket er omkring 175 cm under jordoverfladen for overfladescenarierne, og 250 cm for grundvandsscenarierne. Udvaskning gennem den traditionelle dybde, 100 cm, er ikke interessant for dræned jord, da det ligger over drændybden.

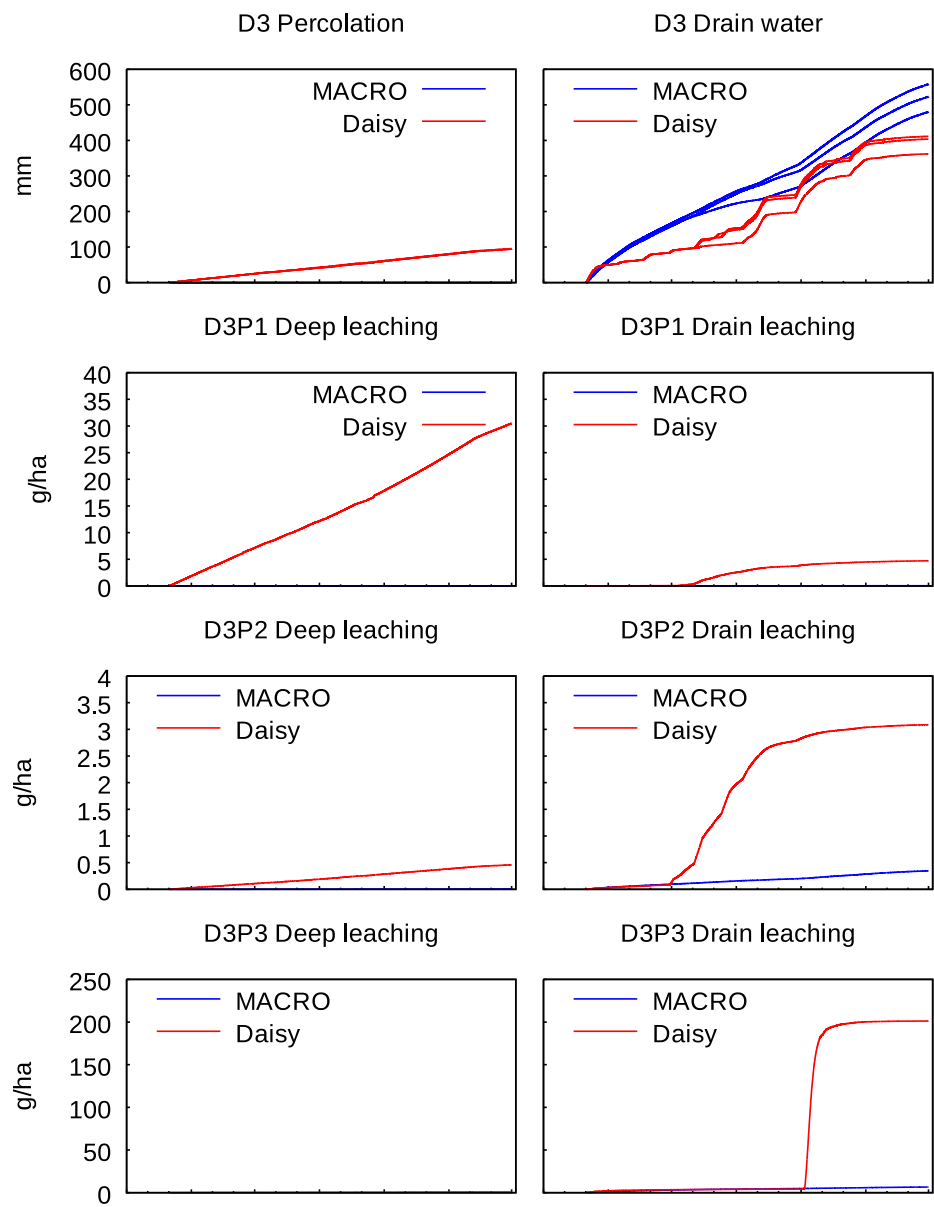
Generelt viste simuleringerne at overfladestrømning spillede en stor rolle i Daisy i alle scenarier. Samtlige kørsler viser større dyb udvaskning i Daisy end i MACRO.

For **Vredepeel** (D3) gælder, at scenariet er et stykke væk fra hvad begge modeller er udviklet til at beskrive, og vi derfor ikke har forsøgt at kalibrere på det. Det er derfor heller ikke overraskende at de to modeller giver forskellige resultater. Eneste fællesnævner er total drænvand, da det primært afspejler nettonedbør. At kurvene i Daisy er mere dynamiske, skyldes overfladetransport.

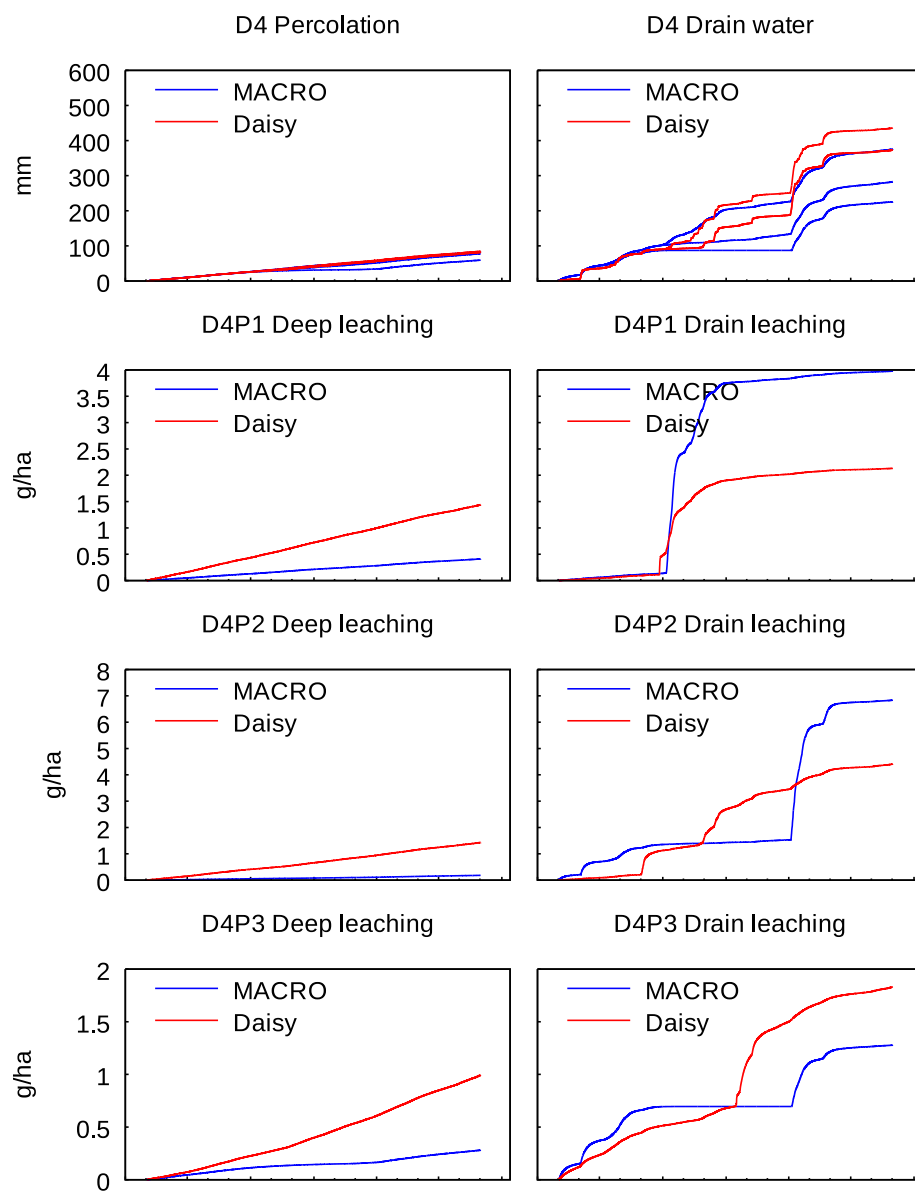
Skousbo (D4) ligner mere de øvrige scenarier i denne rapport (Rørrendegård og VAP). Resultaterne for de to modeller er da også sammenlignelige. Den største forskel for simuleret drænvand er faktisk mellem de forskellige afgrøder i MACRO, som påvirker drænsæsonen. I Daisy er forskellen mellem afgrøder mindre. Dette giver sig også udslag i graferne over udvaskning af pesticider i dræn, der følger forskellene i drænvand.

Karup er det mest sammenlignelige scenarie, da Daisy for denne udræned jord er kørt i 1D. Vi ser også en god overensstemmelse mellem både vand og det nærmeste vi kommer til et konservativt stof, nemlig pesticid B. Den mest voldsomme forskel er i pesticid C, som er det stærkest adsorberende og hurtigst nedbrydelige af de tre pesticider. Her forudsiger Daisy at 4 % af det tilførte stof udvaskes, medens MACRO forudsiger at 0.0025 % af det tilførte stof udvaskes.

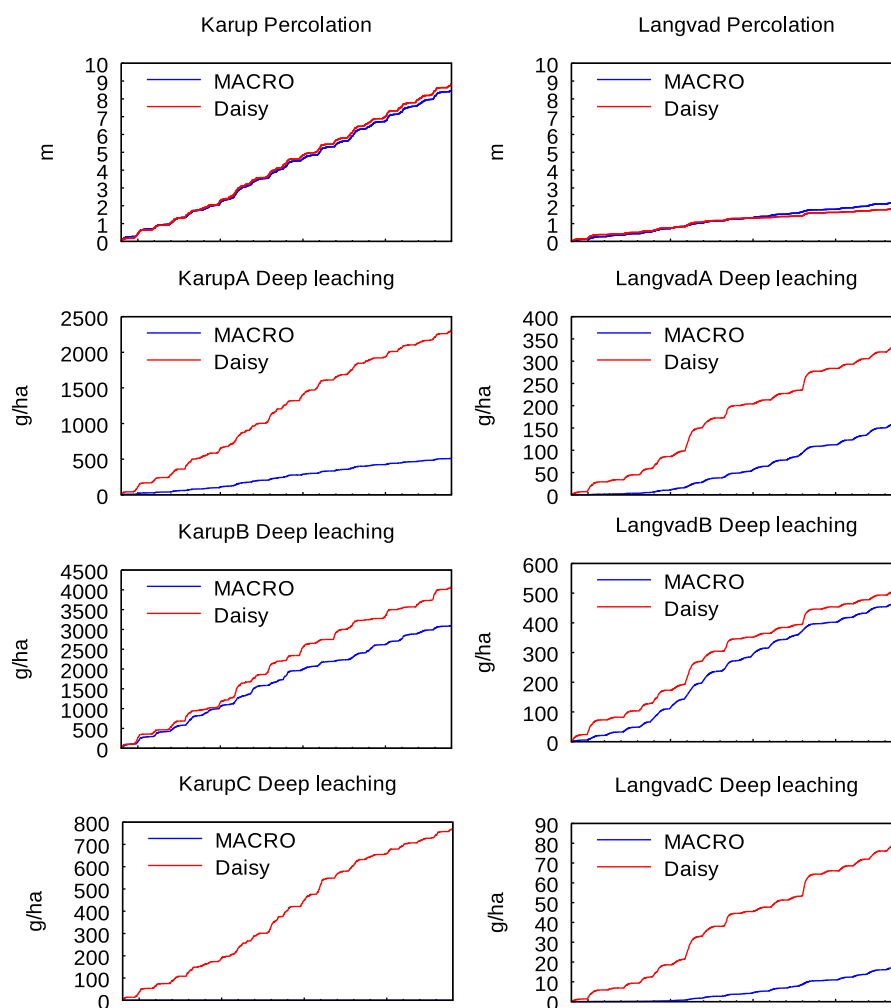
For **Langvad** gælder det ligeledes at det "konservative" pesticid B viser god overensstemmelse mellem de to modeller. Derudover ser det ud til at opvarmingsperioden på 6 år er for kort i MACRO for de to stærkt adsorberende pesticider.



Figur 7.2 Perkolation, drænvandsafstrømning, samt udvaskning til dræn (DV) og grundvand (UV) af modelpesticiderne P1, P2 og P3 over 16 måneder (1/1 til 1/5) for Vredepeel (D3).



Figur 7.3 Perkolation, drænvandsafstrømning, samt udvaskning til dræn (DV) og grundvand (UV) af modelpesticiderne P1, P2 og P3 over 16 måneder (1/1 til 1/5) for Skousbo (D4).



Figur 7.4 Perkolation samt dyb udvaskning til grundvand (UV) af modelpesticiderne A, B og C over 20 år for de to grundvandsscenerier (Karup og Langvad). I Karup simulerede MACRO en samlet udvaskning af pesticid C i Karup over 20 år på 0.05 g/ha.

7.2.3 Diskussion

Da der ikke er tale om målte værdier, kan sammenligningen ikke bruges til at vurdere, hvilken model der er bedst. Men det skal nævnes at opsætningen af Daisy for disse scenarier (specielt Skousbo og Langvad) minder meget om den opsætning, der er blevet brugt for VAP scenarierne, hvor Daisy har været i stand til at ramme niveauet for målingerne i både dræn og jord. Hvis vi således tror mest på resultaterne af Daisy simuleringerne, sætter det et spørgsmålstejn ved om FOCUS- metodikken er det rette grundlag for at vurdere risikoen for forurening af grundvandet med stærkt adsorberende pesticider.

I simuleringerne for Rørredegård stod kolloidfaciliteret transport for størstedelen af transporten til dræn for stærkt adsorberende stoffer. Da dræn ligger mere end en meter under jordoverfladen, og en meter er grænsen for nedbrydning af pesticider i FOCUS (brugt både af MACRO og Daisy i denne rapport), kan det gøre en stor forskel. Modellen for kolloidfaciliteret transport i Daisy er taget fra MACRO. Vi har ikke prøvet det, men det virker sandsynligt at hvis den blev sluttet til i MACRO ville den dybe udvaskning for de to modeller ligne hinanden mere, og måske udgøre et bedre grundlag for risikovurdering. Alternativt har Rosenbom et al. (2009) formået at ramme

VAP data med en MACRO opsætning, hvor en stor del af det adsorbere pesticid var beskyttet mod nedbrydning, men ikke med en standard FOCUS-opsætning. Beskyttelsen mod nedbrydning vil tillade pesticidet at blive transporteret længere.

I samme forbindelse bør det bemærkes at FOCUS-antagelsen om ingen nedbrydning under 1 meter i sig selv er tvivlsom, og det påvirker begge modeller. Som det kan ses, tager det i MACRO-simuleringen af Langvad de stærkt adsorbende pesticider ca. 10 år at nå ned til en dybde på 250 cm. Det svarer til en DT50 på over 3650 dage for at nedbrydningen skal være ubetydelig.

Igen må vi pointere at ingen af disse scenarier er baseret på målte data, og det derfor vil være forhastet at drage stærke konklusioner baseret på dem. En tilsvarende øvelse baseret på VAP lokaliteterne, for eksempel med udgangspunkt i Barlebo et al (2007) men med inkludering af målte data, ville være nyttig.

7.3 Sammenligning på oplandsdata

Formålet med at udvikle en koblet MIKE SHE - Daisy model er at udvikle en ny metode til opskalering af Daisy-modellen fra mark til oplandsskala, som kan beskrive både transport af vand og pesticider til vandløb via både grundvandet og markdrænesystem. Dette afsnit beskriver etablering af en oplandsmodel til at evaluere denne nye koblede fremgangsmåde til simulering af både vandstrømning og pesticid transport i de øverste jordlag.

Disse evalueringer blev udført for Lillebæk oplandet (4,4 km²) på Fyn. Lillebæk opland indgår i det nationale overvågningsprogram for vandmiljøet. Oplandet blev valgt på basis af de eksisterende feltobservationer, herunder pesticidovervågning (Iversen et al 2003.), og fordi oplandet har været genstand for tidligere modelundersøgelser med en integreret MIKE SHE/MIKE 11 model (Styczen et al, 2003; 2004).

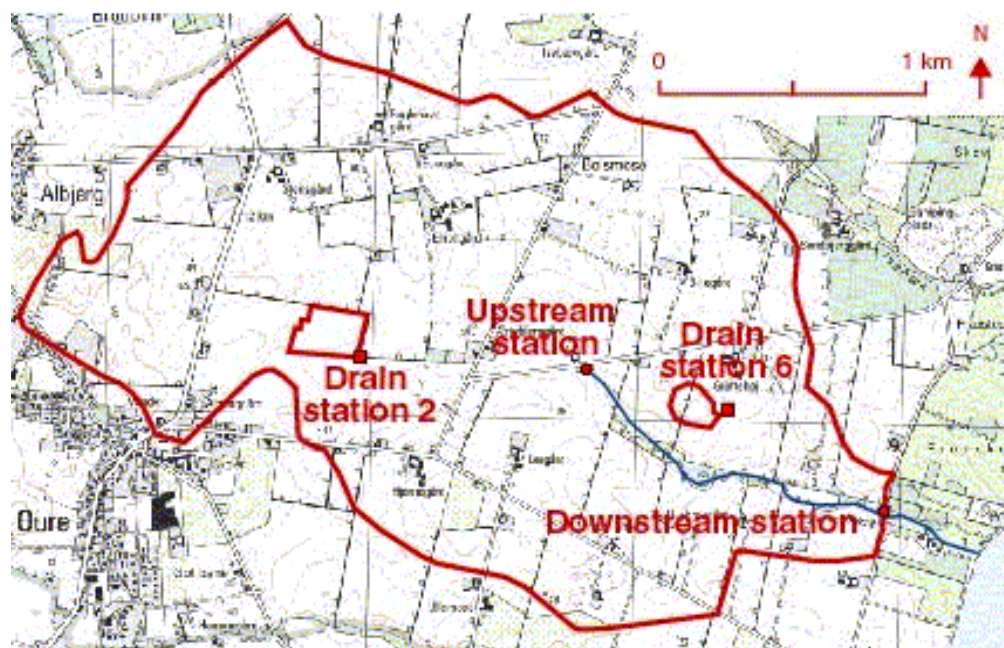
En detaljeret beskrivelse af Lillebæk oplandet findes i Styczen et al. (2004). Derfor opsummeres her kun de vigtigste karakteristika for oplandet. Lillebæk opland består primært af sandet lerjord og er repræsentativt for de morænelerjordtyper, som findes mange steder i Danmark. Topografien er relativ stejl og falder fra 50 m (moh) til havoverfladen over 3 km. Den øverste del er meget drænet med få afløb, mens den nederste del omfatter grøfter og selve hovedvandløbet.

Der er fire pesticidovervågningsstationer i oplandet. Der er to målestationer langs åen, hvor både vandføring og pesticidkoncentrationer blev målt, Figur 7.6. Nedstrømsstationen (Fredskovvej) modtager vand fra hele oplandet (436 ha), mens oplandet til opstrømsstationen (Topen) svarer til et område på 230 ha, hvoraf det meste er drænet areal. Derudover er der to stationer hvor måling fra drænsystemet findes, Figur 7.7. Det omfatter 4,2 ha (dræn 2) og 2,1 ha (dræn 6), hvor der foreligger målinger af afstrømning og pesticidkoncentrationer.

7.3.1 Modellering af vandstrømning i Lillebæk opland med MIKE SHE

MIKE SHE-modellen for Lillebæk oplandet blev oprindeligt etableret med en diskretisering på 50 m. En detaljeret beskrivelse af strømningsmodellen, herunder jordparametre og jorddiskretisering, randbetingelser for vandstrømning, klimatiske data, vegetationsparametre, geologi, geo-hydrologiske parametre, grundvandsoppumpning, afdræning og vandføring findes i kapitel 3 i Styczen et al. (2004). Modellen blev første gang kalibreret trinvis af Styczen et al. ved hjælp af vandføring i åen og drænene samt grundvandspejlingerne. Der blev ikke foretaget en kalibrering i vores arbejde men som det første trin blev der foretaget simuleringer, hvor MIKE SHE alene blev brugt. Hovedformålet med disse indledende simuleringer var at kontrollere, at modelresultaterne kunne gengives med den seneste version af MIKE SHE, som vil blive anvendt til det koblede MIKE SHE-Daisy modelsystem. Men simuleringerne er også brugt til at undersøge vandbalancen i oplandet.

Daglig nedbør blev målt i afstrømningsområdet for perioden 1989-2000 på Bolsrose stationen og korrigeret ifølge Allerup et al. (1998) for fordampningstab og aerodynamiske effekter. Reference eller potentiel evapotranspiration blev beregnet efter metoden i Makkink (Hansen, 1984).

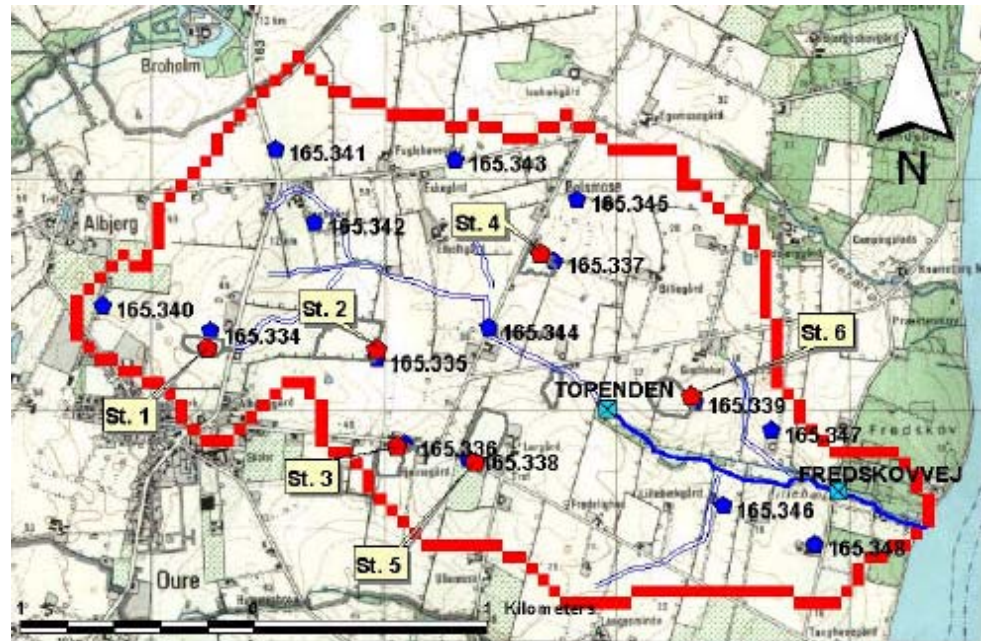


Figur 7.6 Lillebæk opland samt placering af målestationer langs åen og dræn oplande.

7.3.1.1 Vandføring i åen

De målte og simulerede afstrømninger på de to vandføringsstationer er vist i Figur 7.8. Simuleringsresultaterne er næsten identiske med dem fra Styczen et al., 2004. Den akkumulerede udledning fra simulering og observation på stationerne er sammenlignet i Figur 7.9. Figuren viser, at den samlede vandbalancefejl for perioden 1989 til 2000 er på ca. 3 % ved nedstrømsstationen (Fredskovvej) og på ca. 30 % ved opstrømsstationen (Topen den). Tilsvarende vandbalancefejl findes i simuleringsresultaterne fra Styczen et al. (2004). Den relative vandbalancefejl for Topen den skyldes dels usikkerhed ved, hvordan dræn var forbundet til åen, og dels usikkerhed ved

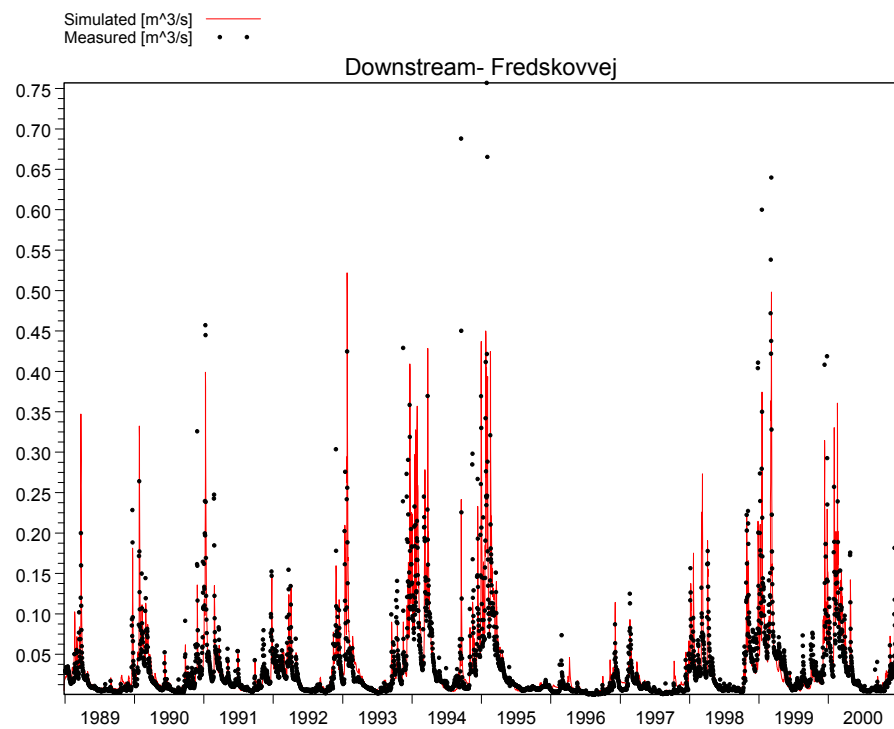
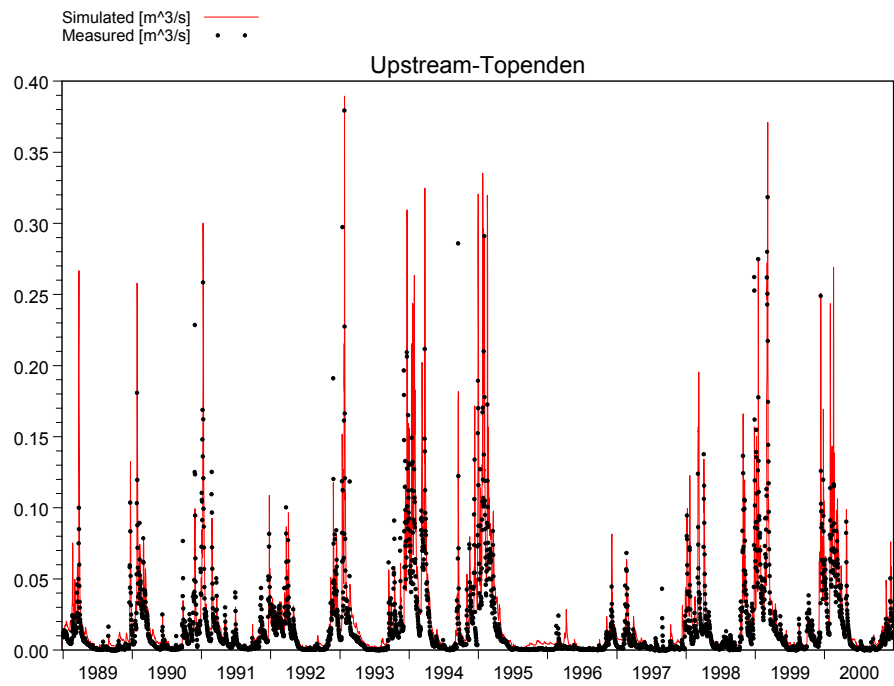
placeringen af grundvandsskel i den sydlige del af oplandet, som er afhængige af en sandlinses omfang i dette område.



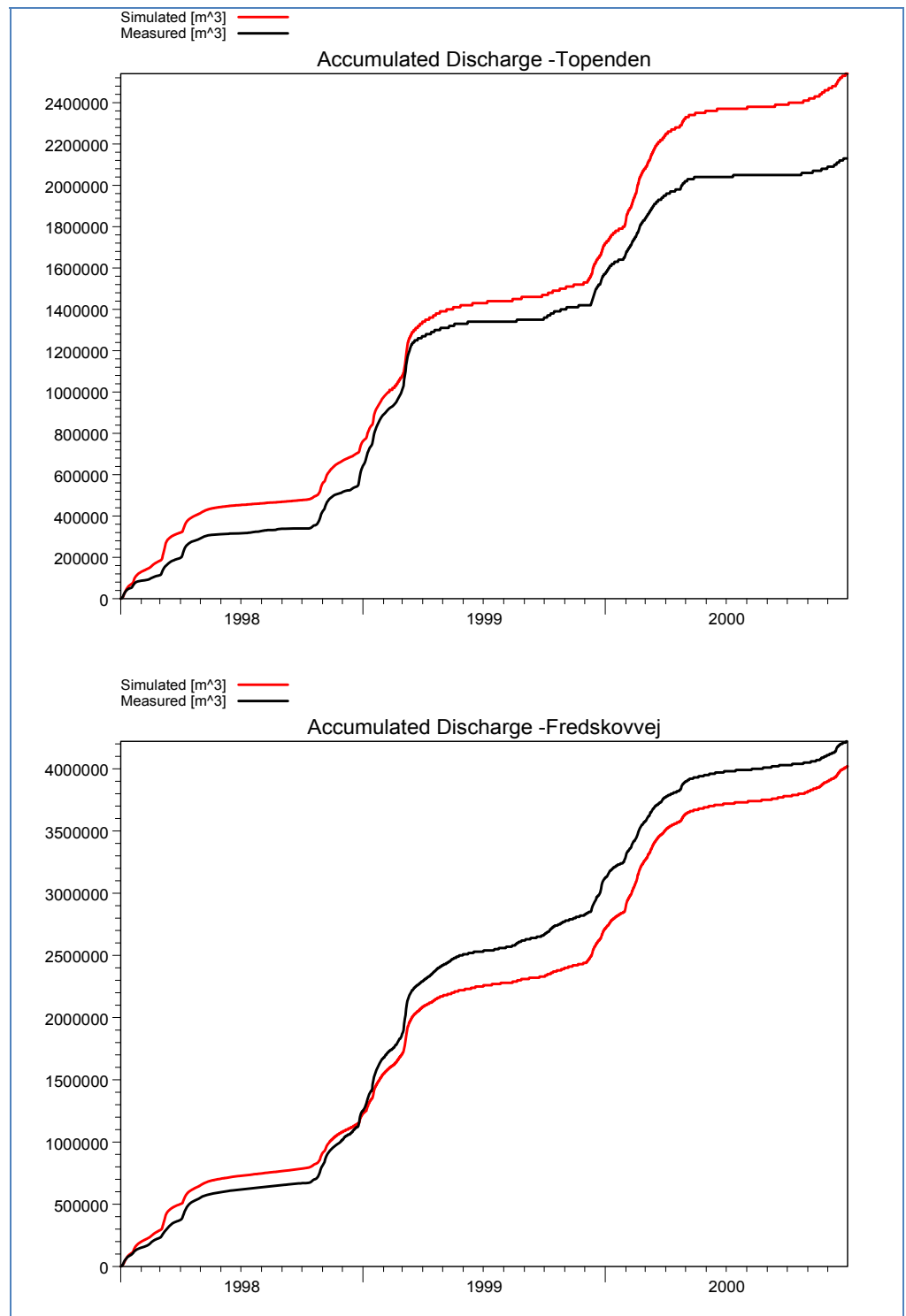
Figur 7.7 Placering af grundvands borer i Lillebæk opland

7.3.1.2 Grundvandsstand

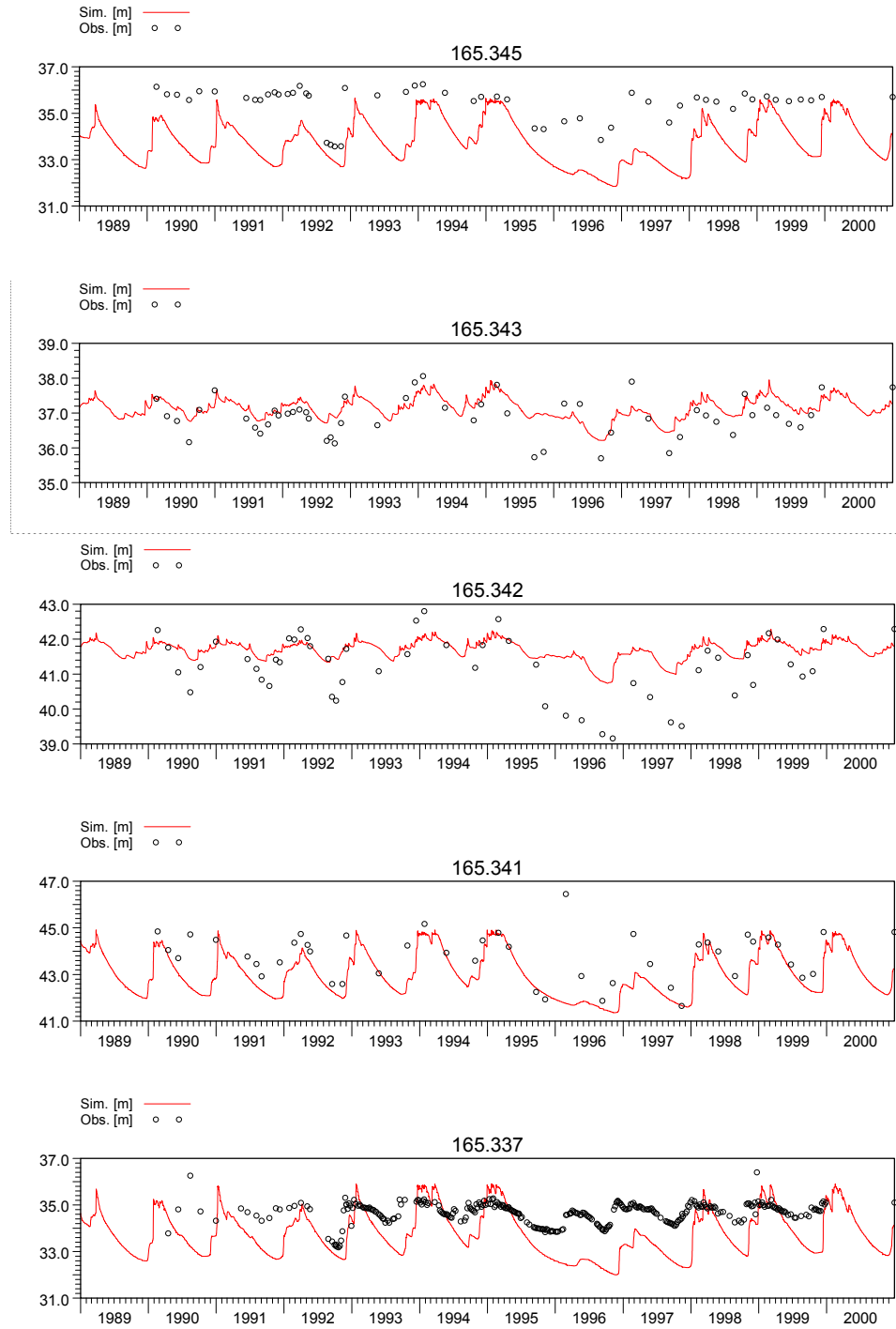
Sammenligninger af de observerede og simulerede (MIKE SHE) grundvandspotentialer for de 15 borer i oplandet vist i Figur 7.7 fremgår af Figur 7.10 til Figur 7.13. Generelt er der tilfredsstillende overensstemmelse mellem de observerede og simulerede vandstande og i dynamikken i grundvandsstandene med undtagelse af et par brønde i den sydlige kvadrant. Igen er resultaterne af simuleringen næsten identiske med resultater fra Styczen et al. (2004) og afvigelserne i den sydlige kvadrant blev tilskrevet usikkerhed ved repræsentation af sandlinsler i området. Det skal bemærkes, at det blev konstateret, at resultaterne var ganske følsomme over for placeringen af borer i den sydlige kvadrant. Derfor blev placering af alle borer kontrolleret og i 3 tilfælde blev placeringen korrigeret. Mindre forskelle fra resultaterne af Styczen et al. (2004) kan ses ved 165,337 (Dræn St. 4) og 165,347. For 165,337 (Dræn St. 4) blev placeringen korrigeret, og det gav en lille forbedring i vandspejlsniveauet, men ikke i dynamikken. For 165,347 er dynamikken uændret, men de simulerede vandspejlsniveauer er lidt højere.



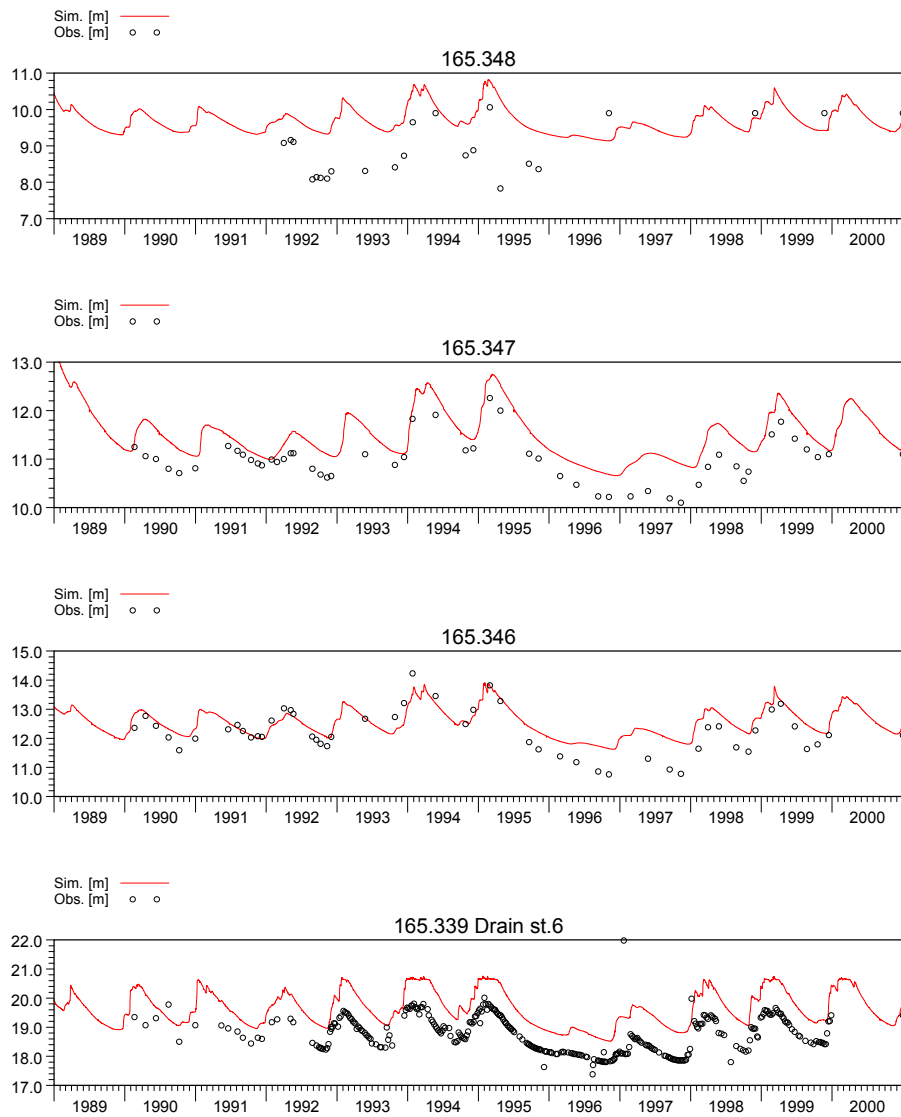
Figur 7.8 Målt og simuleret afstrømning (m³/s) opstrøms (Topenden) og nedstrøms (Fredskovvej)



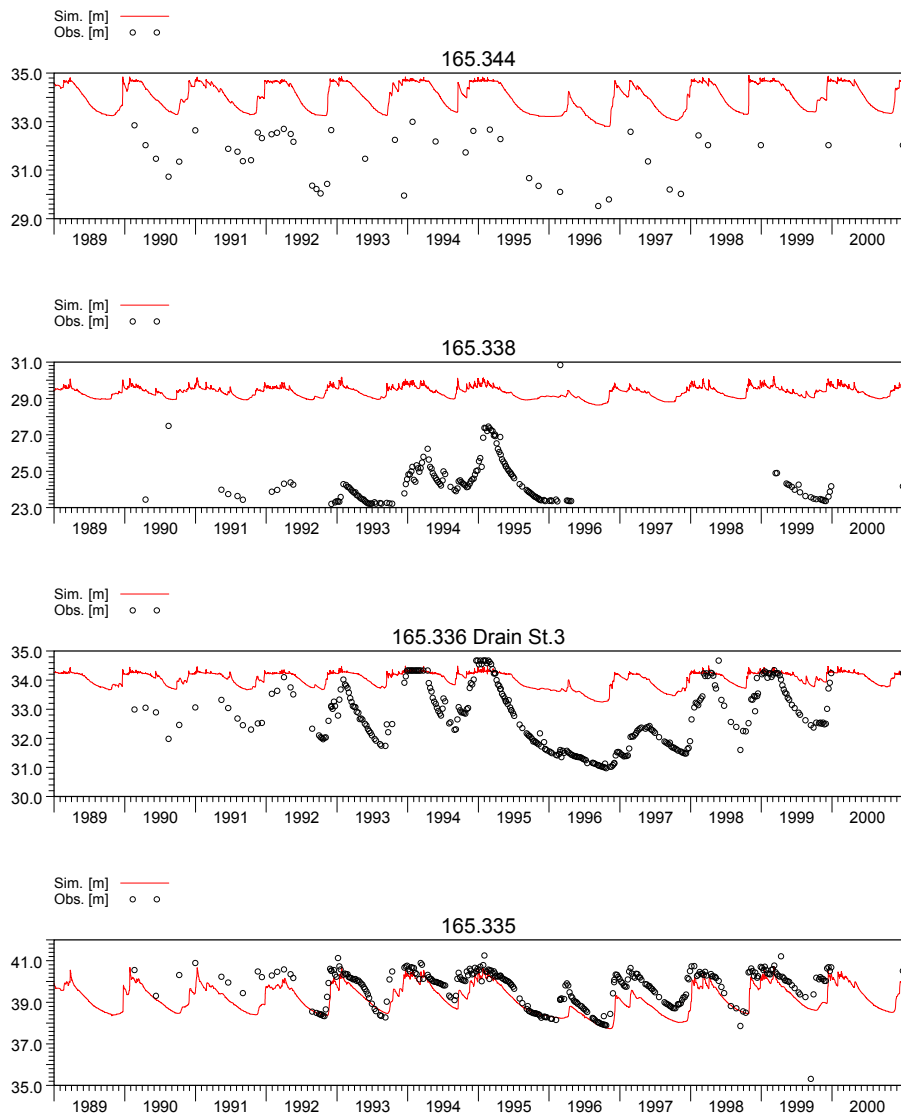
Figur 7.9 Målt og simuleret akkumuleret afstrømning (m³) opstrøms (Topenden) og nedstrøms (Fredskovvej)



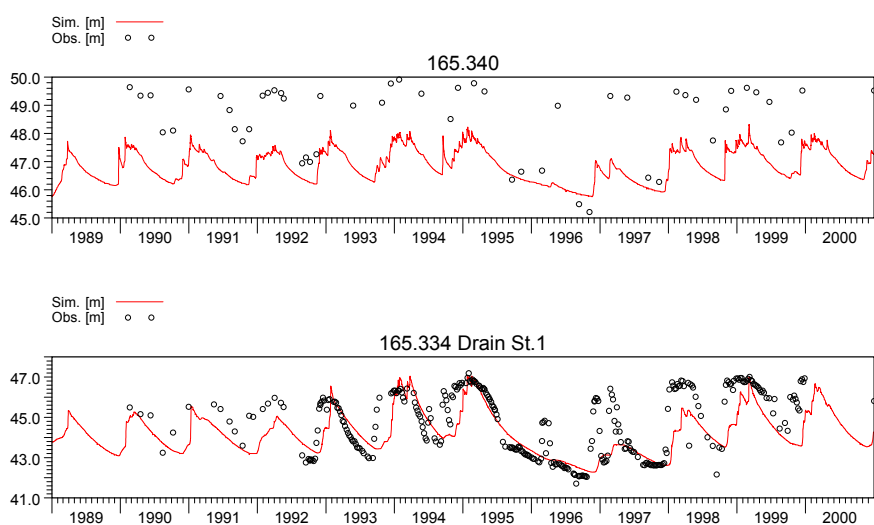
Figur 7.10 Målt og simuleret (MIKE SHE) grundvandsniveau fra boringer i den nordlige kvadrant af Liliebæk opland. Placering af 165,337 er korrigeret



Figur 7.11 Målt og simuleret (MIKE SHE) grundvandsniveau fra boringer i den østlige kvadrant af Lillebæk opland. Placering af 165,337 er korrigeret



Figur 7.12 Målt og simuleret (MIKE SHE) grundvandsniveau fra boringer i den sydlige kvadrant af Lillebæk opland. Placering af 165.336 og 165.335 er korrigeret



Figur 7.13 Målt og simuleret (MIKE SHE) grundvandsniveau fra boringer i den vestlige kvadrant af Lillebæk opland

7.3.1.3 Vandbalance for oplandet

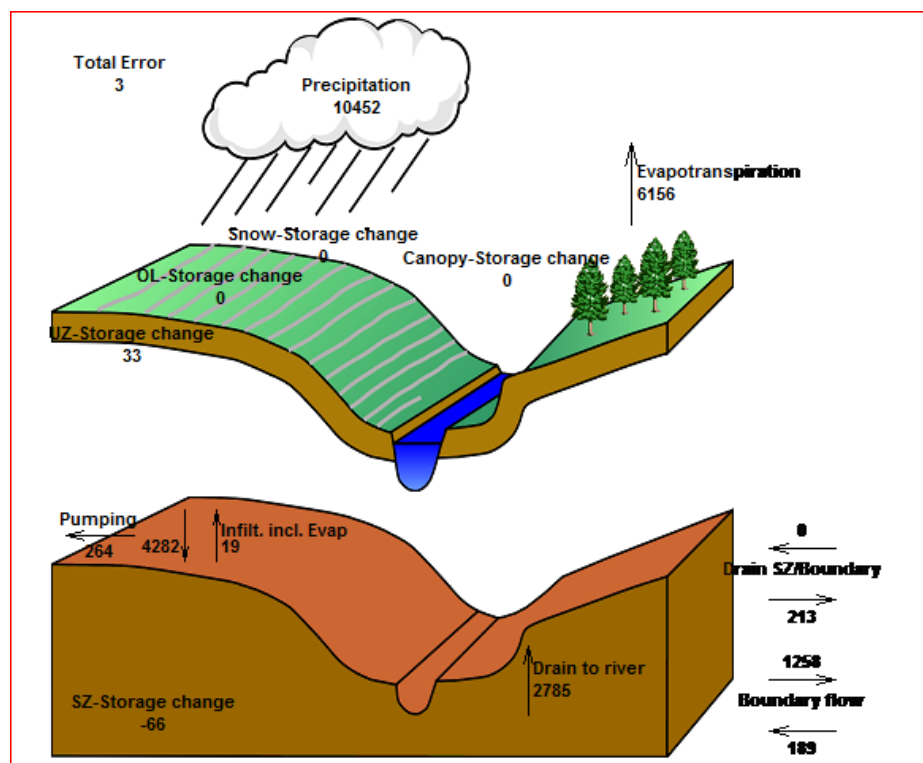
Vandbalancen for Lillebæk oplandet i perioden fra 1989-2000 er vist i Figur 7.14. Disse tal viser, at en stor del af tilstrømningen til vandløbet foregår via drænene. Det er værd at bemærke, at ifølge denne MIKE SHE model forlader en betydelig mængde vand oplandet som grundvandsstrømning uden om vandløbet dvs. ud over modelranden. Dette er sammenfattet i Tabel 7.2, som faktisk viser, at alle tilstrømninger til åen i modellen sker via drænene, og at bidragene fra enten afstrømning på jordoverflade eller direkte tilstrømning fra grundvand er ubetydelig. Dette tyder på, at det største bidrag til pesticidkoncentrationer i åen derfor vil være fra drænsystemet.

Tabel 7.2 Udvalgt vandbalance bidrag for Lillebæk opland. Årlig gennemsnit for perioden 1989-2000

Nedbør (mm)	Fordampning (mm)	Dræn til Vandløb (mm)	Grundvand til Vandløb (mm)	Vandløb (mm)	Netto Grundvands- tilstrømning (mm)
871	513	232	10 ⁻³	150	-89

De pesticider, der når drænene, stammer enten fra direkte transport via makroporer til drænene eller indirekte transport først igennem jordmatrixen og makroporer til grundvandet og derefter fra grundvand til drænene. Denne indirekte transport kan modelleres i MIKE SHE, men det samme er ikke muligt for den direkte transport til dræn. Til gengæld kan Daisy modellere direkte transport via makroporerne til drænene. Ved at koble Daisy og MIKE SHE har vi derfor et værktøj, som kan beskrive begge processer, og dermed kan bruges til at undersøge betydningen af disse mekanismer på oplandsskala.

Fra denne gode overensstemmelse mellem disse simuleringer og resultaterne af Styzcen et al. (2004) kan vi bruge MIKE SHE modellen, som reference og grundlag for udvikling og evalueringer af det koblede MIKE SHE – Daisy modelkoncept. En evaluering af denne MIKE SHE model mod objektive kriterier fra Henriksen et al., (2000) viser, at denne model er klassificeret som god til fremragende.



Figur 7.14 Vandbalancekomponenter fra MIKE SHE simuleringer for Lilløbæk opland for perioden 1989-2000. Alle tal (mm) er akkumuleret over hele perioden.

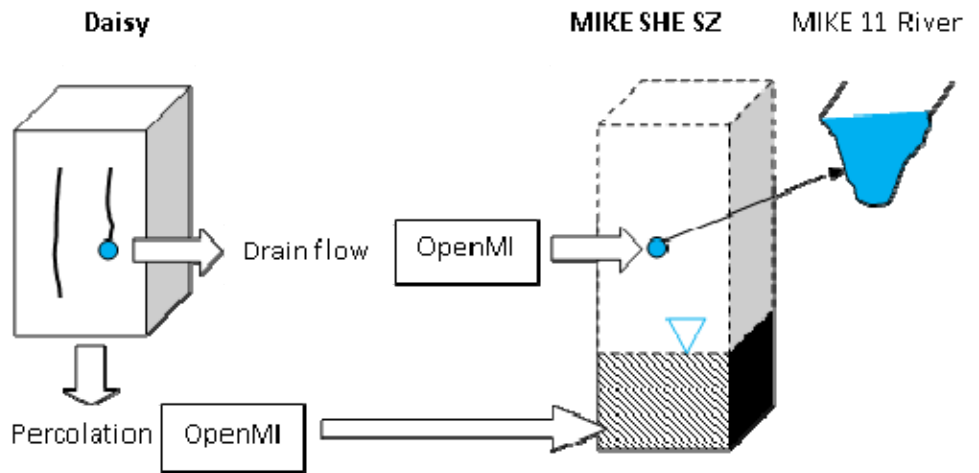
7.3.2 Opsætning af MIKE SHE-Daisy for vandstrømning

Som beskrevet tidligere udnytter den koblede MIKE SHE-Daisy-model styrkerne af de to modeller. I disse koblede simuleringer anvendes Daisy 4.92 til at beskrive strømnings- og transportprocesser i de øverste 1-2 m inklusiv markdræn. Strømning i grundvandet og vandløbet er modelleret i MIKE SHE 2011.

De variable der udveksles via OpenMI mellem Daisy og MIKE SHE til simulering af vandstrømning, er anført i tabel 7.3 og skitseret i Figur 7.15.

Tabel 7.3 Udveksling variabler mellem Daisy og MIKE SHE til simulering af vandstrømning

Daisy		MIKE SHE	Mapper
Matrix Percolation	→	Leakage (flux) to SZ	ElementMapper300
Drain flow	→	Inflow (flux) to SZ drain	ElementMapper300
GroundWaterTable	←	depth to phreatic surface (negative)	ElementMapper600



Figur 7.15 OpenMI kobling via drænsystemet og grundvand til vandløbet.

I den koblede model blev hver søjle i den umættede zonekomponent af MIKE SHE erstattet med en jordsøjle i Daisy-modellen, se Figur 4.3. Der var derfor mange Daisy modelsøjler, der skulle sættes op til at dække hele Lillebæk opland. Fremgangsmåden var at skabe en Daisy setup fil, der indeholdt alle de Daisy kolonner i oplandet, som byggede på rumlige data om jordtype, arealanvendelse, drænkoder, grundvandsstand og pesticider.

I den koblede model kan pesticider nå dræneene enten via direkte transport igennem makroporer til drænrør eller indirekte transport - først igennem jordmatricen og makroporer til grundvandet og derefter fra grundvand til drænet. Til at beskrive disse to transportmekanismer er hver celle i MIKE SHE forbundet til to konceptuelle Daisy søjler. Den ene søjle repræsenterer området umiddelbart omkring drækanalen, hvor en brøkdelen af bioporer er forbundet til drænledninger. Den anden søjle repræsenterer det resterende område mellem dræn, se afsnit 3.3.2.

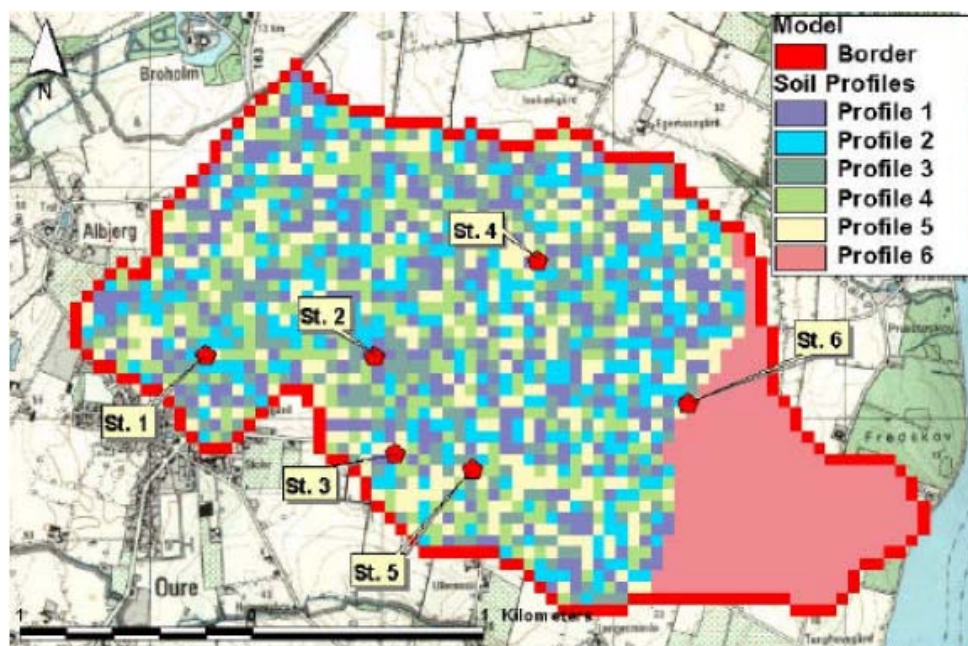
Typisk er drænafstanden mellem 15-25 m. For disse simuleringer er der antaget en afstand på 18 m, hvor området uden direkte forbindelse mellem bioporer og dræn svarer til 17 af de 18 m. Den resterende ene meter repræsenterer området over dræn, hvor nogle af makroporerne er direkte forbundet med dræn. Størrelsen af dette område er baseret på erfaring fra feltforsøg og tidligere Daisy simuleringer, kapitel 6.

Det var intentionen at opsætningen af disse Daisy søjler skulle svare så tæt som muligt til den originale kalibrerede MIKE SHE-model (Styczen et al., 2004). Men selv om MIKE SHE UZ og Daisy begge er 1D umættet zonemodeller, repræsenterer de ikke alle processer på samme måde, og derfor er der både nogle forskelle i parameteriseringen af de to modeller samt forskelle i hvordan nogle processer beregnes. Disse forskelle beskrives kort i de følgende afsnit.

7.3.2.1 Jord profiler

Den umættede zone i den oprindelige MIKE SHE Lillebæk model bestod af seks jordprofiler, baseret på målinger. Jordprofilerne 1-5 blev tilfældigt fordelt i oplandet, mens den 6. profil blev placeret i områder, hvor de geologiske oplysninger angiver, der er sand under 1 meters dybde jfr. Figur 7.16. I den

koblede Daisy - MIKE SHE model anvendes den samme fordeling af jordprofiler.



Figur 7.16 Kort over fordeling af jordprofiler i Lillebæk opland samt placering af de målte profiler. Jordprofiler 1-5 blev tilfældigt fordelt i oplandet, mens den 6. profil blev placeret i områder, hvor geologien oplysninger, der angives sand under 1 meters dybde

Den vertikale diskretisering i MIKE SHE modellen består af en celle højde på 2,5 cm ned til en dybde på 0,7 m under overfladen, 5 cm fra 0,7 til 0,95 m dybde og 7,5 cm fra 0,95 til 1,4 meter under overfladen. Daisy blev kørt med en standard diskretisering, hvilket resulterede i en cellehøjde på 2,5 cm ned til 5 cm under overfladen og 10 cm ned til 150 cm under overfladen, dvs. den dybde, hvor Daisy og MIKE SHE gennem OpenMI udveksler vand og opløste stoffer.

7.3.2.2 Jordens tekstur

Til parameterisering af de enkelte jordhorisonter, kræver Daisy en beskrivelse af jordens tekstur. Jordteksturdata fra Styczen et al. (2004) appendiks B, tabel 2 blev brugt, se tabel 7.4.

7.3.2.3 Jord hydrauliske parametre

I den oprindelige Lillebæk model blev jordens hydrauliske egenskaber i den umættede zone beskrevet ved analyse af seks jordprofiler (Figur 7.16) og i alt 21 jordhorisonter, Styczen et al., 2004. Jordens hydrauliske egenskaber blev beskrevet ved hjælp af en kubisk spline funktion for jordens retentionskurver og Averjanov's ligning for den umættede hydrauliske ledningsevne. Men disse to funktioner er ikke umiddelbart tilgængelige i Daisy og skulle derfor konverteres til noget Daisy kan fortolke, men som stadigvæk giver resultater svarende til beregningerne i MIKE SHE.

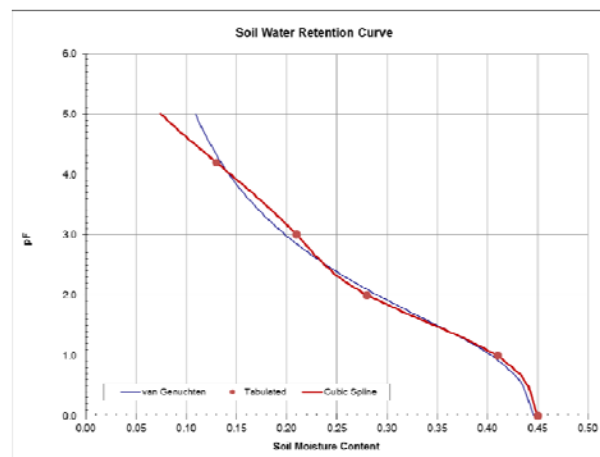
Tabel 7.4 Jordtekstur for Lillebæk jordtyper ved brug af partikel størrelse fordeling

Soil ID	Description	Clay	Silt	Silt	Fine sand	Coarse sand	Humus	Vol. weight	Porosity
		< 2 μm	2-20 μm	20-63 μm	63-200 μm	200-2000 μm	[%]	[g/cm ³]	[]
1	Ap St. (1,2,3)	16.9	12.2	10.1	30.7	28.2	1.8	1.70	35.9
2	Ap St. (5,6)	15.9	18	12.1	27.8	23.6	2.1	1.40	47.2
3	A2 St. (1)	15.9	15.1	10.2	28.6	28.2	2.0	1.68	36.6
4	Bg St. (1)	19.8	14	11.3	29.2	24	1.5	1.63	38.4
5	Cr St. (1,2,3)	20.6	13	9.9	27.5	28.8	0.2	1.72	35.2
6	Bth St. (2)	25.9	13	9.4	27.6	23.4	0.6	1.74	34.4
7	Bth St. (4)	24.8	15	15.4	24.6	19.6	0.4	1.67	36.9
8	Btg St. (2)	21.7	13	11.1	28	25.6	0.3	1.69	36.3
9	Ah St. (3)	21.6	20	6.1	25	25.8	1.1	1.53	42.3
10	Bt St. (3)	23.6	13	9	26.6	27	0.4	1.67	37
11	Ap St. (4)	17.7	14	11.9	26.8	26.2	3.1	1.43	45.9
12	Btg St. (4)	21.6	13	11.2	25	28.6	0.2	1.73	34.6
13	C St. (4)	14.4	9.6	52.9	16.8	6.2	0.1	1.65	37.7
14	A2 St. (5)	14.8	13	11.2	31	27.4	2	1.58	40.4
15	Btg St. (5)	24.8	12	9.7	29.2	23.6	0.5	1.61	39.3
16	Co St. (5)	30.5	12	8.9	25.2	23.6	0.3	1.64	38.1
17	Bx St. (6)	21.7	15	9	24.4	28.8	0.8	1.79	32.4
18	Bt. St. (6)	20.5	12	9.3	27.6	30.8	0.3	1.67	37.1
19	Co1 St. (6)	4.9	0.5	1	14.2	79.3	0.1	1.52	42.5
20	Co2 St. (6)	14.4	8.6	9.1	32	35.8	0.1	1.82	31.5
21	Cr St. (6)	8.2	7.3	11.9	39.4	33.2	0	1.62	38.8

En almindelig brugt og relativt robust funktion til at beskrive retentionskurverne og de umættede hydrauliske ledningsevner er van Genuchten's ligninger, van Genuchten (1980). Disse ligninger kan fortolkes af Daisy. Det blev derfor besluttet at beregne og tilpasse ("fit") van Genuchten parametre ud fra de målte retentionskurvedata for de 21 jordhorisonter fra Lillebæk.

Programmet RETC (van Genuchten et al. 1992) blev brugt til at tilpasse de tabulerede retentionsdata og derefter til at aflede van Genuchten parametre for hver horison. Tilpasning blev foretaget under forudsætning af, at den mættede vandindhold (θ_{sat}) blev sat lig med porøsiteten og m blev defineret som funktion af n jf. Figur 7.17.

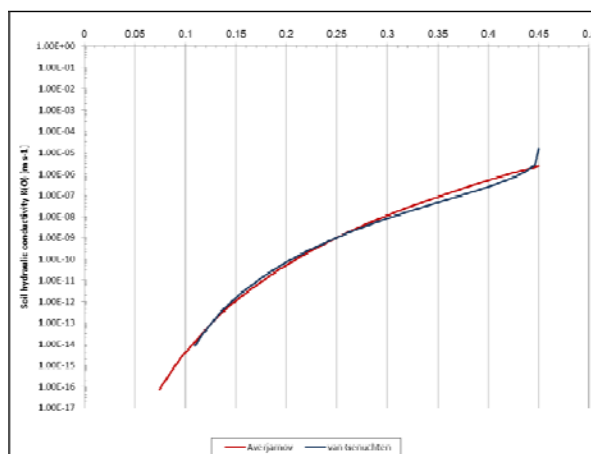
HORIZON:	Lillebæk Ap 0-30cm	1	
Name:	Depth [cm]:		
Ap St. (1, 2, 3)	0	-	30
Dry bulk density [g/cm ³]:	1.7		
Texture (USDA)			
% Clay	% Silt	% Sand	% OM
16.9	22.4	58.9	1.80
Tabulated Retention data from MSHE			
100.0	ρF	$ h $ [cm]	θ [%]
	0	1	0.45
	1	10	0.41
	2	100	0.28
	3	1000	0.21
	4.2	15849	0.13
RET fitting			
Theta res	Fitted	0.06	0.005
Theta sat	Fixed	0.45	0.45
Alpha	Fitted	0.0980	
n	Fitted	1.2257	13
$m = 1 - 1/n$	Fixed	0.1841397	



Figur 7.17 Et eksempel på retentionsdata i henholdsvis tabular og grafisk form.

Funktionen "Solver" i Excel blev brugt til at tilpasse van Genuchten parametre til den umættede hydrauliske ledningsevne. Den mættede hydrauliske ledningsevne (K_s) og tortuosity (λ), blev tilpasset ved at minimere den gennemsnitlige kvadrerede fejl i intervallet pF 0 til pF 4,2, dvs. fra fuld mætning til visnegrænse.

Hydraulic conductivity parameters			
	RETC fitting	vG/M	Averjarnov
K_s [m/s]	Fixed	1.46E-05	2.30E-06
λ	Fixed	-2.22	
Solver constrains			
Minimum K_s		2.30E-08	
Derived values			
		vG/M	Tabulated
θ_{FC}		0.29	0.28
θ_{WP}		0.13	0.13
AWC [%]		0.16	0.15
AWC [mm]		16.8	16.1
Porosity []	0.36		
Data Source	Lillebæk.uzs		
Diff. Unsaturated Cond.			
	h [cm]	Difference	Diff. Pct
Macropore initiation	3	6.35E-07	35.6%
Field capacity	100	-1.09E-09	-0.1%
Wilting point	15849	-1.38E-13	0.0%

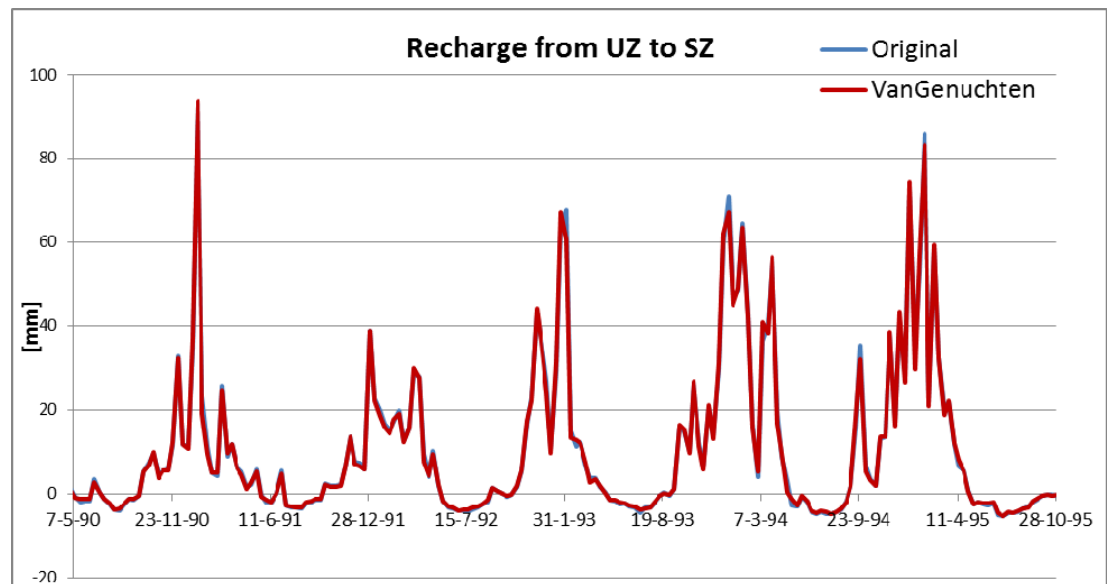


Figur 7.18 Et eksempel på umættet hydraulisk ledningsevne retentionsdata i henholdsvis tabuleret og grafisk form.

Visuelt viser de fittede kurver for den umættede hydrauliske ledningsevne et acceptabelt fit, Figur 7.18. Dog viste en evaluering ved makroporetrykket ($h = 3$ cm), markkapaciteten ($h = 100$ cm) og visnegrænse ($h = 15849$ cm) som forventet den største forskel til den oprindelige umættede hydrauliske ledningsevnekurve, når trykket var tæt på mættet tilstand dvs. makroporetrykket, jf. tabel 7.5. En sammenligning af grundvandsdannelsen beregnet med MIKE SHE viser god overensstemmelse i resultaterne mellem de to beskrivelser af jordens hydrauliske funktioner, Figur 7.19.

Tabel 7.5 Sammenligning af retentionskurve og hydrauliske ledningsevne fra MIKE SHE og Daisy

		Soil Water Retention		Soil Hydraulic Conductivity		Derived Parameters	Mean Squared
h [cm]	pF	Cubic Spline	van Genuchten	Averjarnov	van Genuchten	Frac of PAW (vG)	
		θ [%]	θ [%]	$K(h)$ [m/s]	$K(h)$ [m/s]	[]	
0		0.45	0.45	2.30E-06	1.46E-05		6.44E-01
1	0.0	0.45	0.45	2.30E-06	2.56E-06		2.19E-03
3	0.5	0.44	0.44	1.78E-06	1.15E-06		3.66E-02
5	0.7	0.43	0.43	1.35E-06	6.84E-07		8.73E-02
10	1.0	0.41	0.40	6.76E-07	2.86E-07		1.39E-01
20	1.3	0.37	0.37	2.06E-07	9.94E-08		1.00E-01
50	1.7	0.32	0.33	2.43E-08	2.01E-08		6.92E-03
100	2.0	0.28	0.29	4.41E-09	5.50E-09	1.00	9.25E-03
160	2.2	0.26	0.27	1.64E-09	2.24E-09	0.86	1.87E-02
200	2.3	0.25	0.26	1.08E-09	1.46E-09	0.79	1.68E-02
210	2.3	0.25	0.26	9.95E-10	1.33E-09	0.78	1.58E-02
220	2.3	0.25	0.25	9.18E-10	1.22E-09	0.77	1.48E-02
250	2.4	0.24	0.25	7.41E-10	9.50E-10	0.73	1.16E-02
260	2.4	0.24	0.25	6.95E-10	8.80E-10	0.72	1.05E-02
300	2.5	0.24	0.24	5.54E-10	6.67E-10	0.69	6.50E-03
320	2.5	0.24	0.24	5.02E-10	5.89E-10	0.67	4.82E-03
400	2.6	0.23	0.23	3.60E-10	3.82E-10	0.61	6.39E-04
450	2.7	0.23	0.23	3.04E-10	3.04E-10	0.58	3.88E-07
500	2.7	0.23	0.22	2.62E-10	2.48E-10	0.56	6.14E-04
550	2.7	0.22	0.22	2.29E-10	2.06E-10	0.54	2.22E-02
570	2.8	0.22	0.22	2.18E-10	1.92E-10	0.53	3.08E-03
750	2.9	0.22	0.21	1.48E-10	1.13E-10	0.47	1.42E-02
800	2.9	0.22	0.21	1.35E-10	9.93E-11	0.46	1.78E-02
1000	3.0	0.21	0.20	9.68E-11	6.43E-11	0.41	3.16E-02
2000	3.3	0.19	0.18	2.94E-11	1.67E-11	0.28	6.13E-02
5000	3.7	0.17	0.16	4.07E-12	2.79E-12	0.14	2.69E-02
10000	4.0	0.14	0.14	6.43E-13	7.21E-13	0.05	2.51E-03
15849	4.2	0.13	0.13	1.56E-13	2.94E-13	0.00	7.56E-02
50000	4.7	0.09	0.12	2.03E-15	3.12E-14		1.41E+00
100000	5.0	0.07	0.11	7.23E-17	8.07E-15		4.19E+00
Mean Squared							4.86E-02



Figur 7.19 Sammenligning af grundvandsdannelse beregnet på basis af de oprindelige jord hydrauliske parametre og ved brug af van Genuchten's ligninger.

7.3.2.4 Makroporer/bioporer

I MIKE SHE betragtes jordmatricen og makroporenetværk som et såkaldt dobbelt-porøst medie. Strømningen i makroporerne finder sted når kapillærtrykket overstiger en tærskelværdi svarende til den mindste porestørrelse i makroporerne. Strømning antages at være laminar og kapillære effekter negligeres.

I modsætning til MIKE SHE er jordmatricen i Daisy opdelt i to domæner svarende til intra- og interaggregatporer. Derudover er der defineret et tertiært strømningsdomæne svarende til bioporer/makroporer. Bioporer er opdelt i fem forskellige klasser, tabel 7.6.

Tabel 7.6 Bioporeparametre i Daisy

Class	Matrix column	Drain column	Start [cm]	End [cm]	Size [mm]	Density [m2]
Matrix_0cm	yes	yes	0	-31	2	100
Matrix_2cm	yes		0	-120	4	23
Matrix_30cm	yes		-35	-120	4	7
Drain_2cm		yes	0	-100	4	23
Drain_30cm		yes	-35	-100	4	7

Som nævnt tidligere er der to konceptuelle søjler i Daisy svarende til området omkring drænen (1 m) samt det resterende område mellem drænene. Makropore parametre for disse to konceptuelle søjler er næsten ens, jf. tabel 7.6, men i drænområdet findes makroporer kun ned til en dybde på -100 cm svarende til drænniveau. Mens makroporer findes ned til en dybde på -120 cm mellem drænene.

7.3.2.5 Arealanvendelse

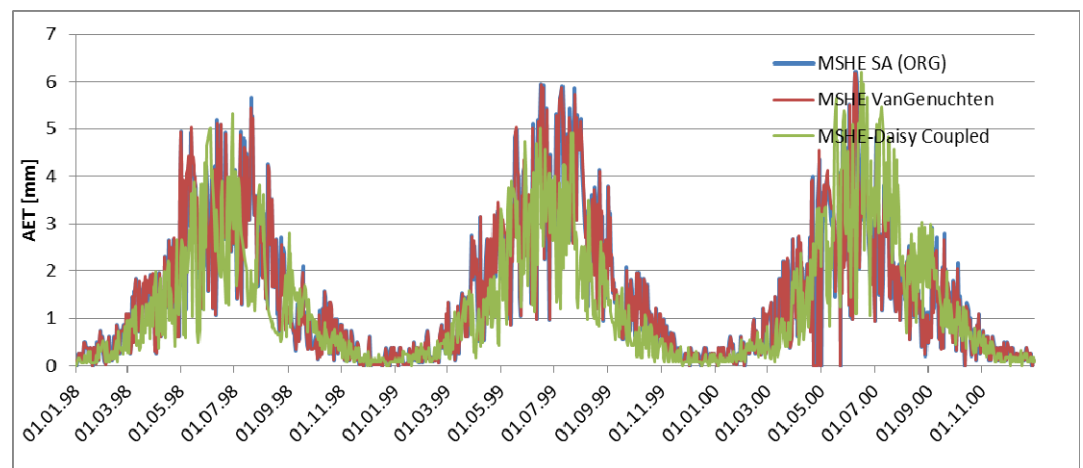
I den oprindelige MIKE SHE Lillebæk model er arealanvendelser opdelt i fem klasser; skov græs, forårskorn, vinterkorn og roer. Den tidlige variation i LAI og roddeby estimeres fra Plaugborg og Olesen (1991). De samme 5 klasser defineres i Daisy men i stedet for er plantevækst og dermed udvikling af LAI og roddeby beregnet af Daisy.

7.3.2.6 Dræn

Drænstrømning i hver celle i MIKE SHE beregnes ud fra et drænniveau samt en tidskonstant (leakage) svarende til et lineært reservoir. Drænstrømning i Daisy beregnes ud fra Hooghoudt's ligning, Hansen (2000).

Som resultatet af MIKE SHE og Daisy benytter sig af forskellige beregningsmodeller for drænstrømning, kan der forventes afvigelser mellem simuleringer fra de to modeller. Det er vigtigt at undersøge, hvad det betyder på oplandsskala.

Tilsvarende bruger MIKE SHE og Daisy forskellige måde at beregne fordampning og transpiration. Det ses tydeligt i Figur 7.20 hvor den aktuelle fordampning for en enkel søjle sammenlignes for de to modeller. Forskellen er afhængig af både jord- og afgrødetype. Selvom det resulterer i en anderledes dynamik, er det ligeledes vigtig at undersøge hvad det betyder på en oplandsskala.



Figur 7.20 Simulering af den aktuelle fordampning beregnet (1) kun med MIKE SHE svarende til den oprindelige parameterisering, (2) kun med MIKE SHE men hvor der anvendes de samme van Genuchten ligninger for jordens hydrauliske parametre og (3) simulering med den koblede MIKE SHE – Daisy model.

7.3.3 Resultater fra MIKE SHE - Daisy

Strømning i makroporesystemet forventes at være vigtige for transport af pesticider til drænsystemet og til vandløbet. Vand bevæger sig fra jordoverfladen eller jordmatricen til makroporedomænet, hvis det findes som frit vand på jordoverfladen eller hvis trykket bygges op i et bestemt lag. Derfor er strømning i makroporer ofte aktiveret i forbindelse med nedbørshændelser med høj intensitet.

Af samme årsag brugte Styczen et al. (2004) korrigerede nedbørsdata fra en nærliggende nedbørsintensitetsstation på Fyn (grid nr. 28184) til bedre at repræsenterer denne nedbør med høj intensitet. Korrektion af nedbøren var nødvendig på grund af forskel i den målte regnmængde mellem de daglige nedbørsmålinger og nedbørsintensitetsstationen. Derefter blev nye simuleringer udført ved hjælp af den korrigerede nedbør for perioden 1. januar 1997 til 30. december 2000. Samme fremgangsmåde er fulgt i dette studie.

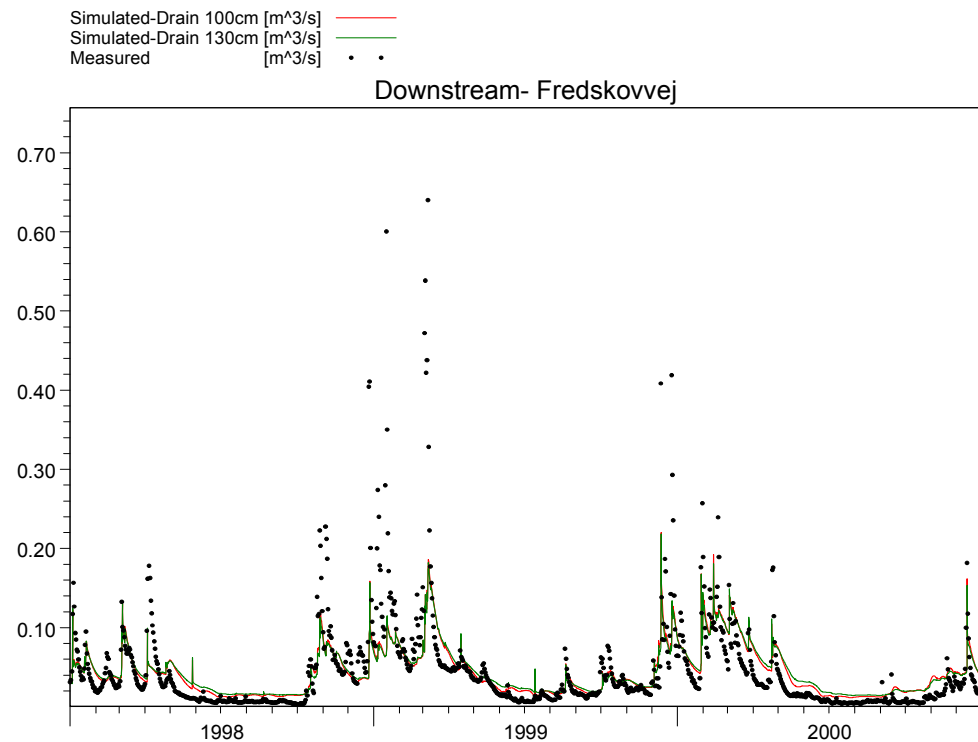
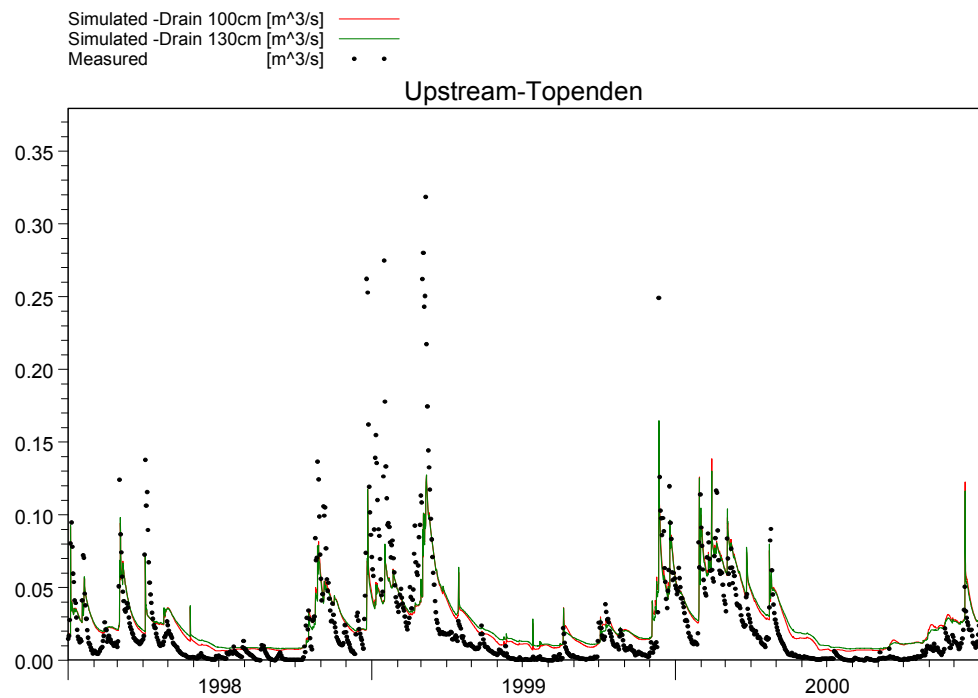
Resultaterne fra kalibreringskørsel (se afsnit 7.3.1) blev brugt til startbetingelserne for grundvandet. For den umættede zone i Daisy blev startbetingelserne en ligevægtsprofil. En simpel følsomhedsanalyse viste at påvirkning af disse startbetingelser kunne negligeres efter en opvarmningsperiode på ca. et år.

Figur 7.21 og Figur 7.22 sammenligner den målte og simulerede afstrømning i vandløbet for den koblede MIKE SHE – Daisy model. Figur 7.23 til Figur 7.26 viser de målte og simulerede grundvandspotentialer. Vandbalancen som vist i Figur 7.22 er tilfredsstillende, men den simulerede afstrømning i vandløbet udviser en anderledes dynamik end i den målte afstrømning. Afstrømningshydrograferne i forbindelse med de større regnhændelser blev kun reproduceret i mindre grad. Simuleringer giver et langsommere afstrømningsrespons, hvorimod der er god overensstemmelse mellem simuleringerne og de målte grundvandspotentialer.

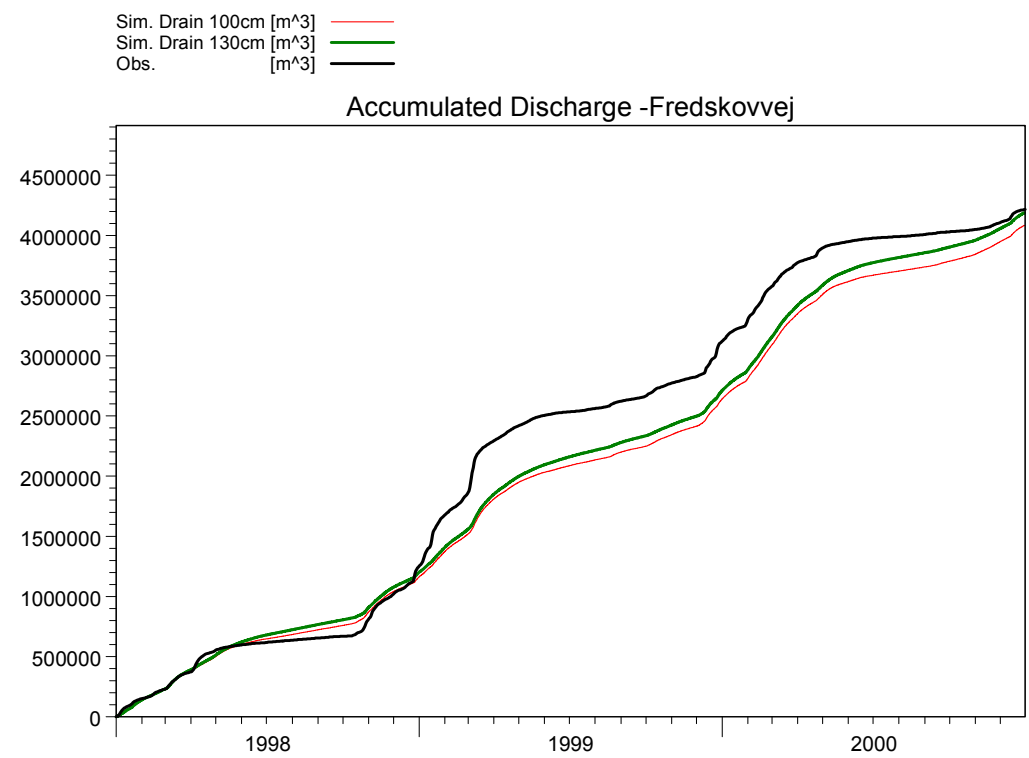
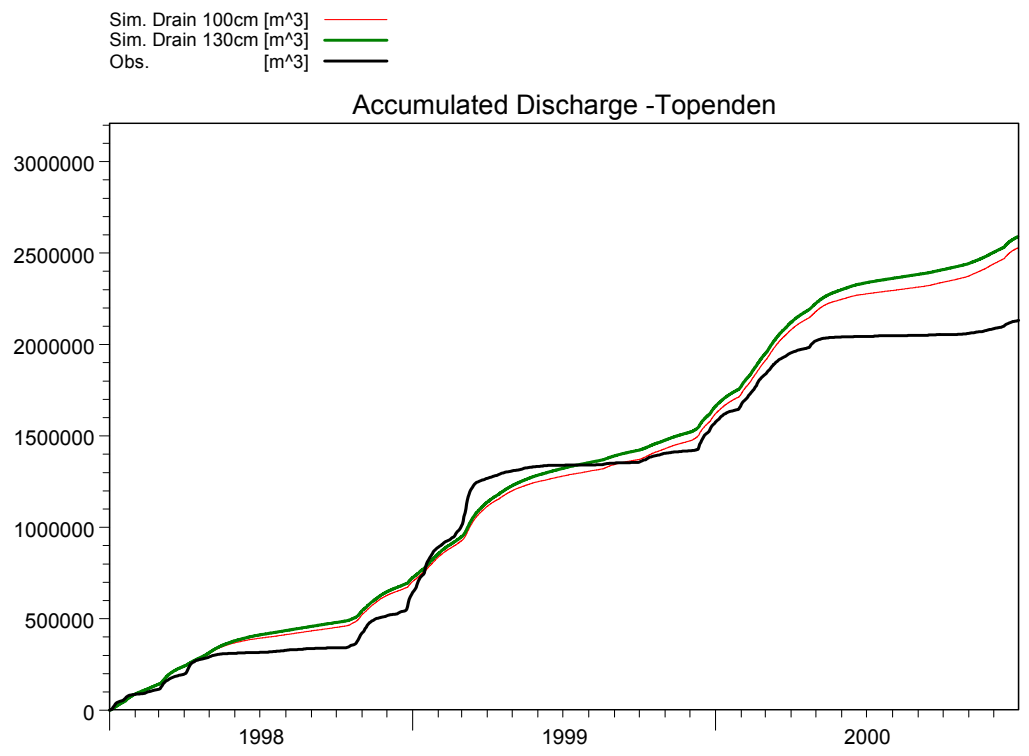
Forskellen i de beregnede afstrømninger forekommer sandsynligvis enten fra forskellen i beregning af drænstrøm og/eller fordampning. Den gode overensstemmelse i vandbalance for vandløbet og grundvandet tyder på at forskellen skyldes drænstrømning. Også fordi drænastrømning er klart det største bidrag til afstrømningen i vandløbet.

Dette bekræftes i Figur 7.27 hvor den gennemsnitlige drænstrøm for Lillebæk er beregnet på 3 forskellige måde. Beregningerne fra den koblede model viser en tydelig forskel i dynamik. Dynamikken af drænstrømning i Daisy bestemmes dels af drænparametre (f.eks. dræna afstand og drændybde) og dels af de jordparametre, der bestemmer strømning til dræn.

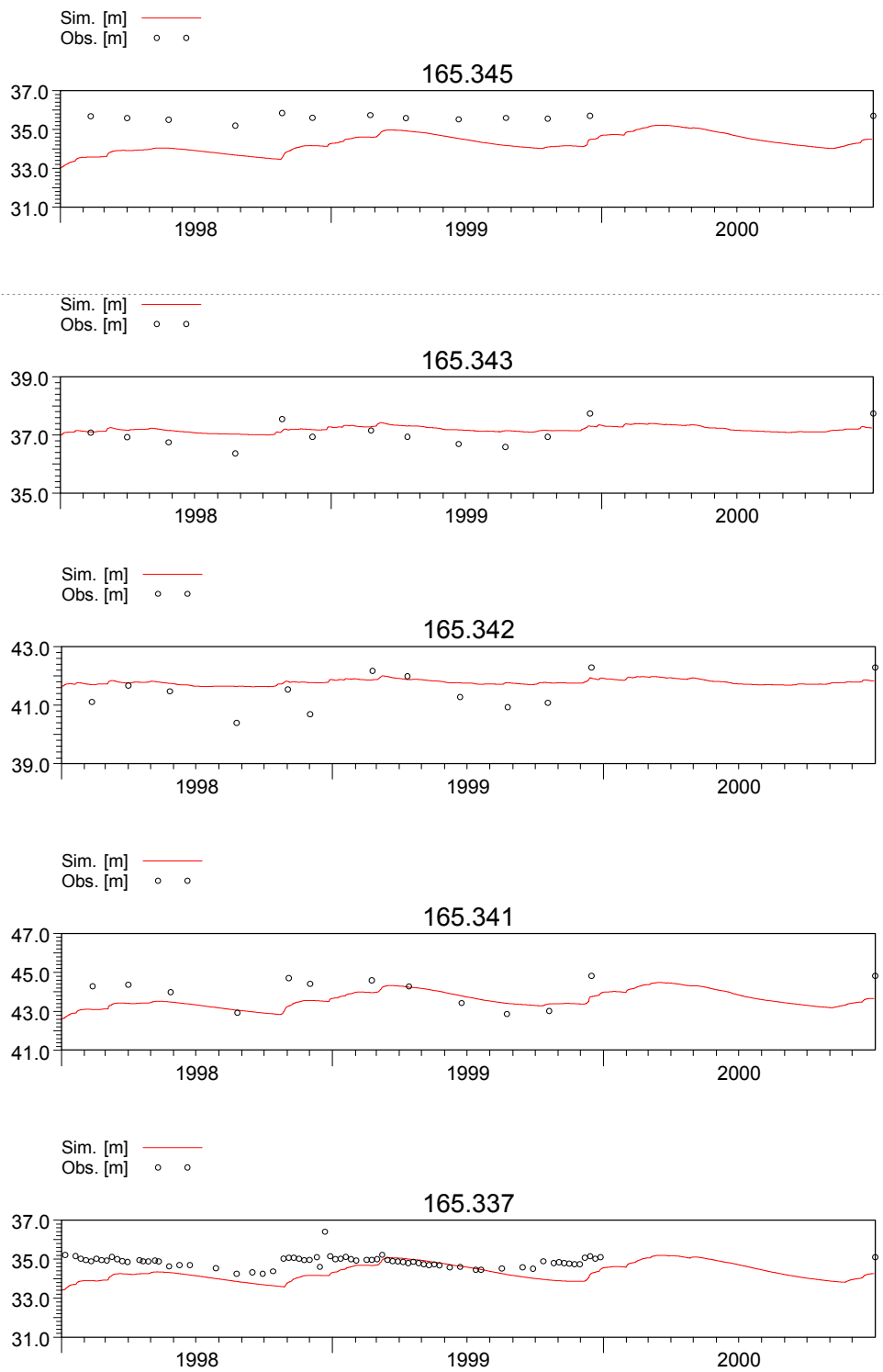
En større drændybde burde resultere i mere strømning i drænsystemet. Beregninger blev derfor gentaget med en drændybde på 1.3 m, Figur 7.21. Ændringen havde en meget begrænset effekt. Tilsvarende skulle en reduktion i dræna afstand give en hurtigere respons. Men da typiske værdier ligger i intervallet 15-25 m vil en reduktion fra 18 m til 15 m kun have en begrænset effekt. Dynamikken kan også påvirkes ved at ændre de parametre, der påvirker strømning til dræn. Det vil kræve yderligere undersøgelser og kalibreringer til bestemmelse af om det vil kunne forbedre resultaterne. Men inden da, er det relevant at undersøge resultaterne for pesticider.



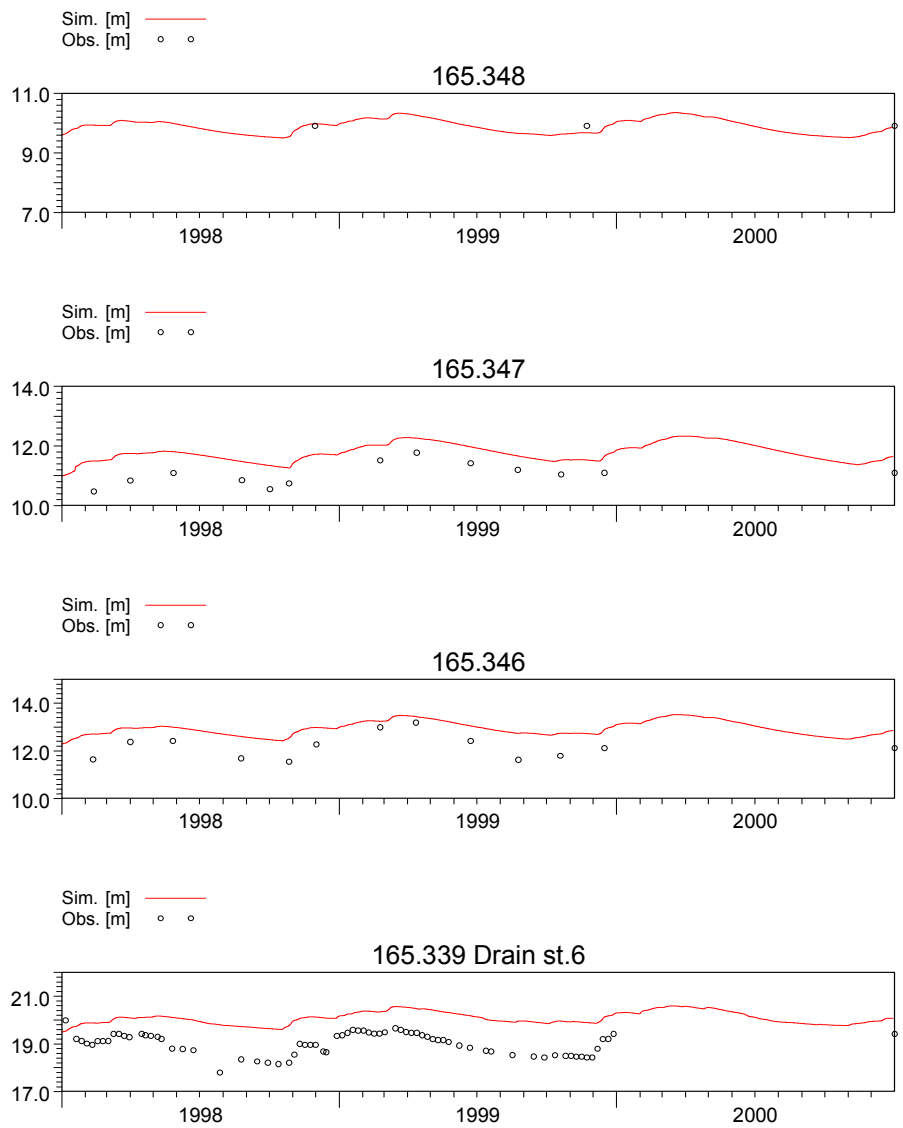
Figur 7.21 Målt og simuleret afstrømning (m³/s) opstrøms (Topenden) og nedstrøms (Fredskovvej) for simulering med den koblede MIKE SHE – Daisy model.



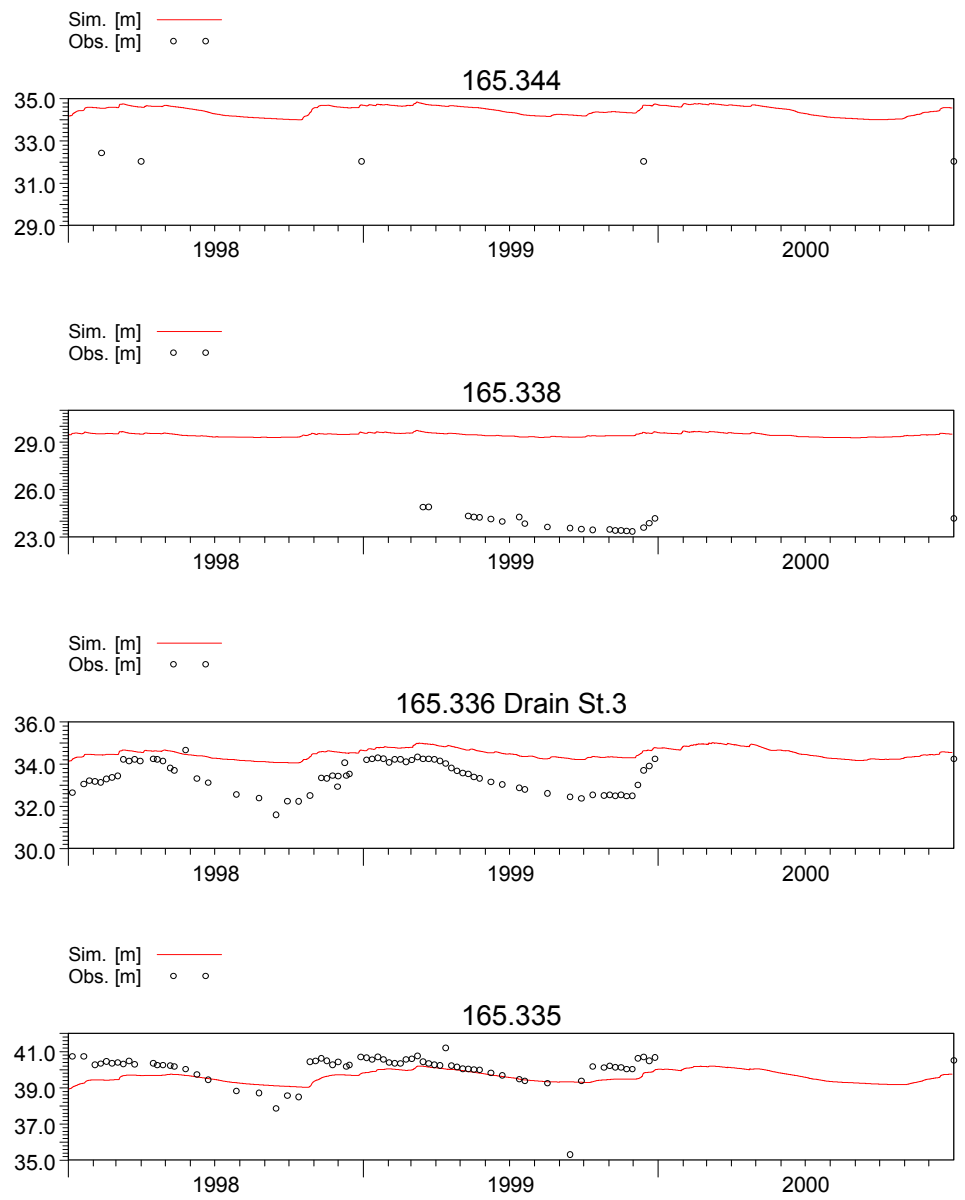
Figur 7.22 Målt og simuleret akkumuleret afstrømning (m³) opstrøms (Topenden) og nedstrøms (Fredskovvej) for simulering med den koblede MIKE SHE – Daisy model.



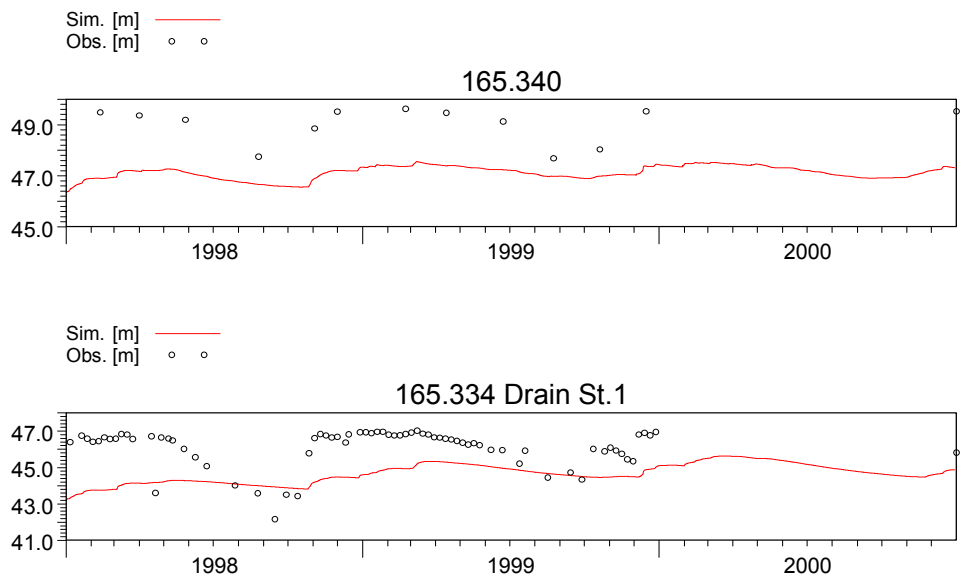
Figur 7.23 Målt og simuleret (MIKE SHE – Daisy) grundvandsniveau fra boringer i den nordlige kvadrant af Lillebæk



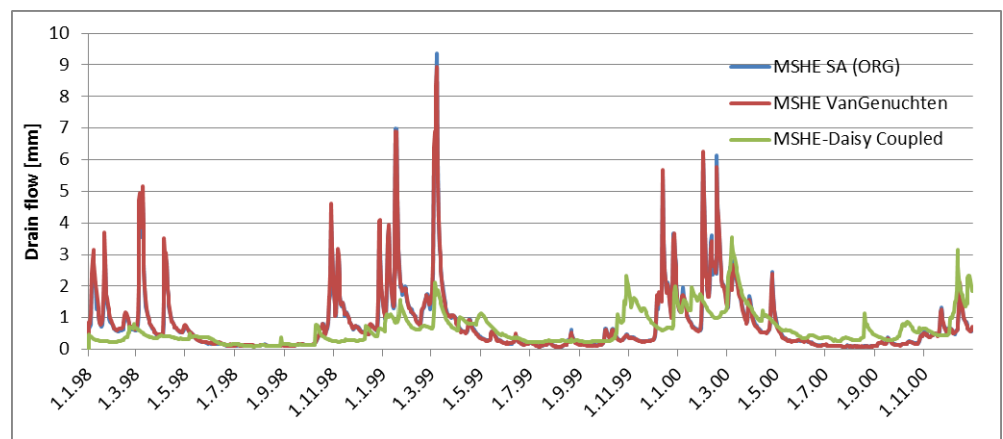
Figur 7.24 Målt og simuleret (MIKE SHE - Daisy) grundvandsniveau fra boringer i den østlige kvadrant af Lillebæk opland.



Figur 7.25 Målt og simuleret (MIKE SHE - Daisy) grundvandsniveau fra borer i den sydlige kvadrant af Lillebæk opland.



Figur 7.26 Målt og simuleret (MIKE SHE - Daisy) grundvandsniveau fra boringer i den vestlige kvadrant af Lillebæk opland.



Figur 7.27 Simulering af det gennemsnitlige drænflow beregnet (1) kun med MIKE SHE svarende til den oprindelige parameterisering, (2) kun med MIKE SHE men hvor der anvendes de samme van Genuchten parametre for beskrivelse af jordens hydrauliske egenskaber og (3) simulering med den koblede MIKE SHE – Daisy model.

7.3.4 Opsætning af MIKE SHE-Daisy for pesticider

Fire pesticider, bentazon, terbutylzain, isoproturon og pendimehtalin er modelleret med MIKE SHE – Daisy, fordi de har været fundet i vandløbet i Lillebæk. De relevante egenskaber er vist i tabel 7.6. Ud fra den oprindelige MIKE SHE model blev for hvert pesticid opstillet en sprøjtefil til Daisy, der beskriver mængden af hvert af de fire brugte pesticider og deres rumlige og tidlige fordelinger (Styczen et al., 2004). Pesticiderne er udbragt på markniveau, men i den oprindelige model var de forskellige klasser af arealanvendelse tilfældig fordelt. Derfor stemte pesticidanvendelse og afgrøder ikke overens. Samme fremgangsmåde blev anvendt i dette studie.

Tabel 7.6 Data for de fire pesticider fundet i Lillebæk

	Bentazon	Isoproturon	Pendimenthalin	Terbutylzain
Halveringstid [dage]	25.2	16.1	66.3	78.2
Koc [cm ³ /g]	19.6	125.0	15615.0	250.0

I første omgang anvendte vi en simpel kobling af transport-processer mellem MIKE SHE og Daisy. Som beskrevet i afsnit 4.6.4, er koblingen af vand processer opnået ved at grundvandsniveauet beregnet af MIKE SHE bestemmer det tilsvarende grundvandsniveau i hver Daisy kolonne. Til gengæld er strømning af vand gennem jorden beregnet af Daisy og tilført som en vand flux til grundvandskomponenten i MIKE SHE. Mere specifikt, er vandtilførsel til MIKE SHE beregnet som fluxen igennem bunden af Daisy kolonnen. Forudsat at den nederste del af Daisy kolonnen er under grundvandsspejlet, vil Daisy beregne fluxen til grundvandet og dette vand vil blive overført ved koblingen til det øverste grundvands-lag i MIKE SHE, hvilket giver en tilsvarende ændring i trykket. På den måde er både grundvandsdynamik og vandbalance korrekt repræsenteret.

De variabler, der udveksles via OpenMI mellem Daisy og MIKE SHE til simulering af pesticid-transport er angivet i tabel 7.7. Fluxen af vand og pesticider fra drænene i hver kolonne tilføres til flodnetværket på punkter langs floden bestemt af MIKE SHE's dræn komponent. Dette vand er derefter ført gennem flodnetværket ved MIKE 11. Ligesom vandet, er strømningen af pesticider beregnet som pesticid flux igennem bunden af hver Daisy kolonne. Den resulterende koncentration af pesticider i grundvandet returneres som en randbetingelse til grundvandskomponenten i Daisy. Men i modsætning til vandudveksling, er placeringen af bunden af Daisy kolonnen i forhold til grundvandsspejlet vigtig for stoftransport. Hvis det er for langt under grundvandsspejlet vil transport i grundvandsmagasinet blive forsinket. Hvis bunden er over grundvandsspejlet, kan pesticider trænge ind i grundvandet for tidligt. Desuden varierer grundvandet i både tid og rum over hele oplandet. For at sikre den bedste tilnærmelse har vi justeret dybden af alle Daisy søjler på tværs af oplandet, baseret på simuleringer foretaget kun med MIKE SHE, hvorfra vi kender placering af grundvandsspejlet. I det generelle tilfælde, hvor placeringen af grundvand er ukendt kan en mere sofistikeret kobling for stoftransport være nødvendig.

Tabel 7.7 Variable udvekslet mellem Daisy og MIKE SHE til simulering af pesticider.

Daisy		MIKE SHE	Mapper
Matrix Percolation	→	Leakage (flux) to SZ	ElementMapper300
Drain flow	→	Inflow (flux) to SZ drain	ElementMapper300
Drain flow	→	WO: Inflow (flux) to SZ drain	ElementMapper300
GroundWaterTable	←	depth to phreatic surface (negative)	ElementMapper600
Pesticide drain	→	Pesticide: External mass flux to SZ drain (for OpenMI)	ElementMapper300
Pesticide flux	→	Pesticide: External sources to SZ top layer	ElementMapper300
Pesticide conc. groundwater	←	Pesticide: SZ concentration of top layer (mobile phase)	ElementMapper600

Det skal bemærkes, at den tid, der kræves for at udføre simuleringer med den koblede model er væsentligt større end den tid, som skal bruges af MIKE SHE alene. Simuleringer for en periode af fire år kræver en simuleringstid mere end 15 dage. Der er en ekstra overhead i OpenMI kobling mellem de to modeller, men den ekstra tid skyldes hovedsagelig den ekstra simuleringstid som er brugt i Daisy.

Figur 7.28 til Figur 7.36 sammenligner de målte og simulerede pesticidkoncentrationer i vandløbs afstrømningen for den koblede MIKE SHE – Daisy model. Her er det værd at bemærke, at den koblede model generelt er bedre til at reproducere de meget kortvarige hændelser i pesticidkoncentrationen end hvad der var tilfældet i de tidligere simuleringer af Styczen et al. (2004). Generelt passer størrelsesorden af den simulerede koncentration med de observerede, men de enkelte hændelser er ikke tidsligt korrekt simuleret.

Simuleringer blev foretaget for perioden 1/1/1997-30/12/2000 dog er resultaterne kun vist fra 1/1/98, da pesticid observationer ikke var til rådighed tidligere.

7.3.4.1 Bentazon

De målte koncentrationer ved opstrøms stationen er domineret af det store peak i 1999 (Figur 7.28). Ifølge Styczen et al. (2004) har kun en lille mark været sprøjtet med bentazon i foråret forud for denne peak, og derfor er observationerne mest sandsynligt et resultat af en ukendt punktkilde. Nedstrøms derimod (Figur 7.29) stemmer den store, observerede peak i koncentration i efteråret 1999 overens med anvendelser af bentazon på markerne. Simuleringerne viser en bestemt peak med de rigtige koncentrationsniveauer, men timingen er ikke korrekt. Pesticid simuleringer af Styczen et al. (2004) viser generelt mere kontinuerlige, højere bentazon niveauer i åen. Den koblede model er bedre til at forudsige pesticidkoncentrationer som skarpt adskilte hændelser, der er mere i overensstemmelse med de målte koncentrationer.

7.3.4.2 Terbutylazin

Koncentrationerne, især i den opstrøms del af åen, er betydeligt højere end bentazon koncentrationerne, dels på grund af den højere anvendte dosis. Ifølge Styczen et al. (2004) afspejler de observerede koncentrationer ukendte punktkilder, der ikke er medtaget i modellen. Nogle af disse pesticid hændelser er beskrevet af den koblede model (Figur 7.30 og Figur 7.31), men ikke de største. Resultaterne nedstrøms (Figur 7.32) ligner dem opstrøms, men koncentrationerne er generelt lavere, hvilket afspejler det faktum, at der er flere marker (kilder) ovenfor opstrøms stationen end nedstrøms stationen. Igen i sammenligning med pesticid simuleringer af Styczen et al. (2004) er den koblede model bedre i stand til at repræsentere pesticidkoncentrationer som skarpt adskilte hændelser, der er i bedre overensstemmelse med de målte koncentrationer.

7.3.4.3 Pendimethalin

Simulering med den koblede model viser en række små hændelser i koncentrationer både opstrøms og nedstrøms, (bemærk ændringen af skalaen i Figur 7.33 og Figur 7.34). En klar sammenhæng mellem timingen og størrelsen af de simulerede og observerede pesticid toppe er ikke indlysende.

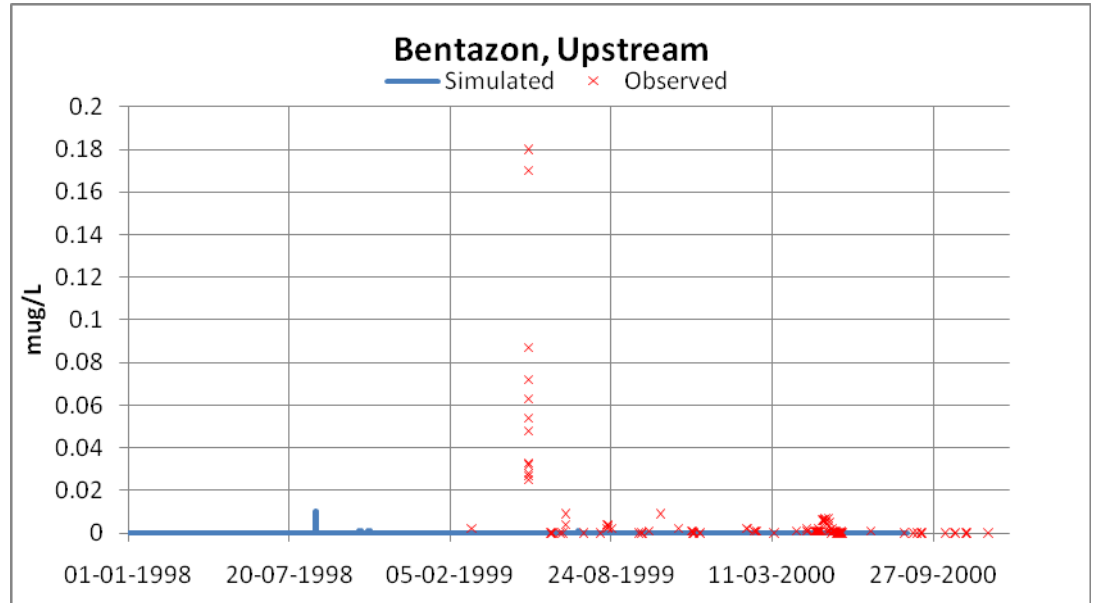
7.3.4.4 Isoproturon

De målte koncentrationer ved opstrøms stationen (Figur 7.35) er domineret af en stort peak i oktober 2000. Simuleringerne synes at fange timingen og størrelsen af dette højdepunkt, men de små toppe simuleres ikke. Nedstrøms (Figur 7.36) er det samme peak i oktober 2000 ganske godt simuleret, men igen, fanges de mindre peaks ikke. Det større peak i efteråret 1999 er ikke simuleret, men er i overensstemmelse med pesticid applikationer nedstrøms. Det tyder på, at drænene ikke er aktiveret i modellen på det tidspunkt.

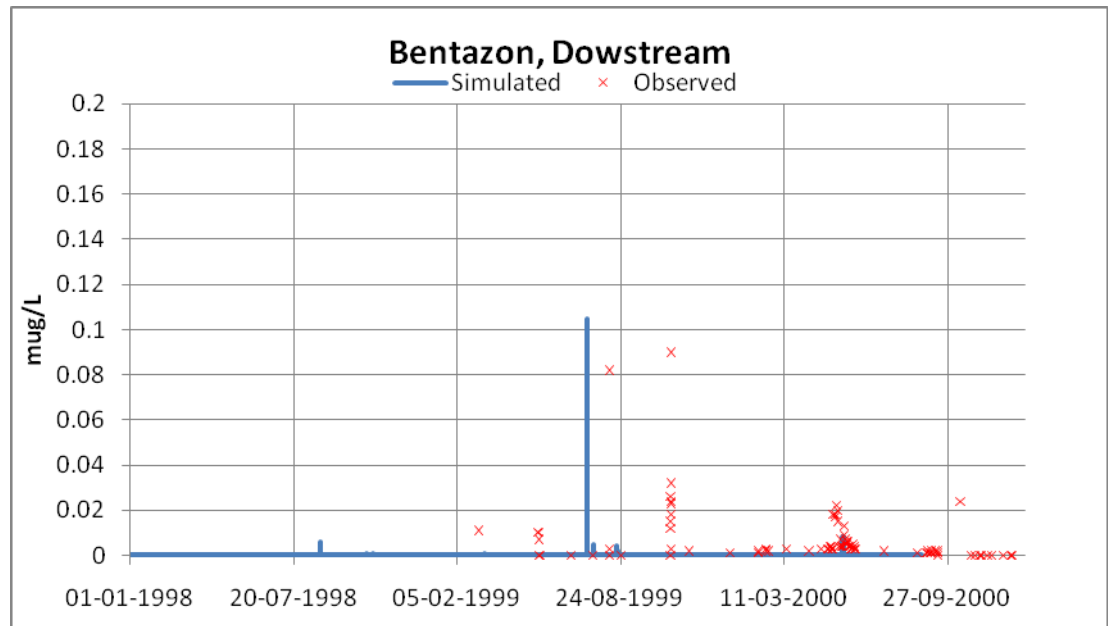
7.3.4.5 Dræn

Figur 7.37 og Figur 7.38 sammenlignes de målte og simulerede afstrømninger i de to drænstationer samt de simulerede pesticidkoncentrationer. Den store hændelse i bentazon-koncentration passer med en tilsvarende målt hændelse, Styczen et al. (2004), men er en størrelsesorden for stor. De øvrige koncentrationer for isoproturon har den rigtige størrelsesorden og timing.

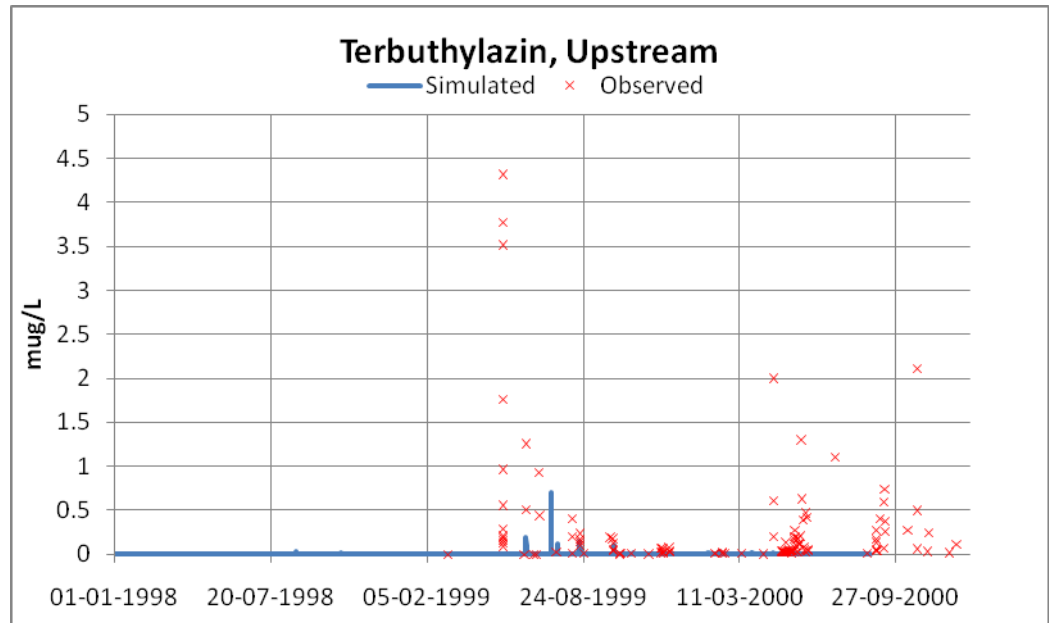
For de to målte dræn, ses det at vandstrømning generelt undervurderes af den koblede model med mere glatte hydrografer. Dette afspejles også i den resulterende strømning simuleret i åen. (Figur 7.21). Det er interessant at bemærke, at for bentazon er peak værdien i koncentrationen ikke korreleret med den maksimale vandstrømning målt i drænetværket, men synes at være udløst af en forholdsvis lille strømningshændelse i drænet. Dette illustrerer vanskelighederne ved at prøve at simulere både flow og pesticid transport processer nøjagtigt i drænene. Strømning i dræn aktiveres først når grundvandet når afløbets niveau, og kan derfor være meget følsomt over for simulering af grundvandsstand. Tilsvarende er koncentrationerne i dræn en blanding af to kilder, strømning og transport via makroporer og via grundvandet.



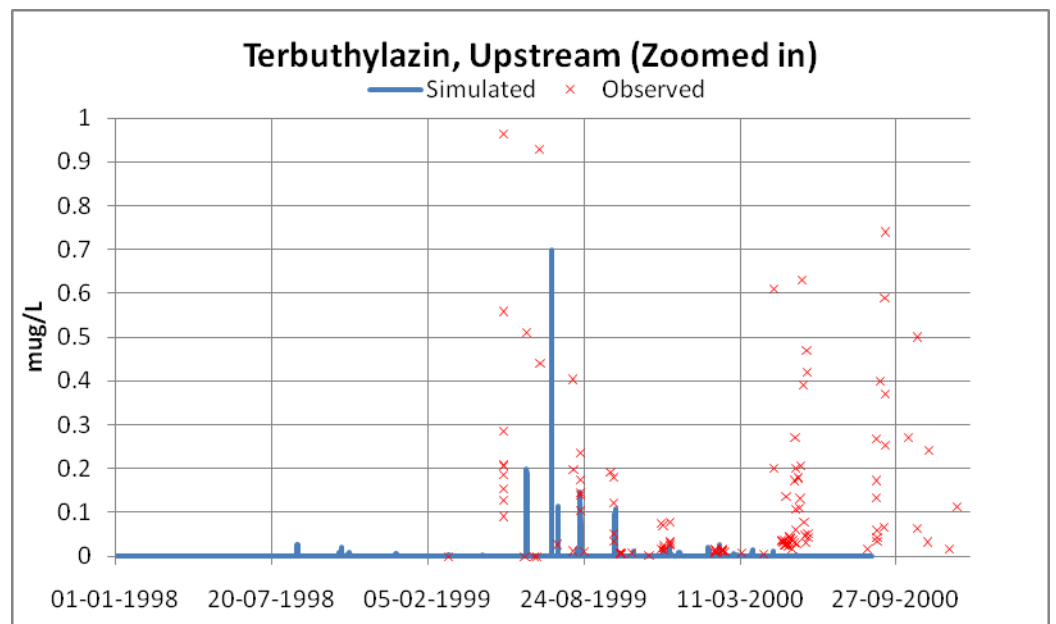
Figur 7.28 Målte og simulerede (MIKE SHE - Daisy) pesticidkoncentrationer opstrøms i vandløbet.(Bentazon)



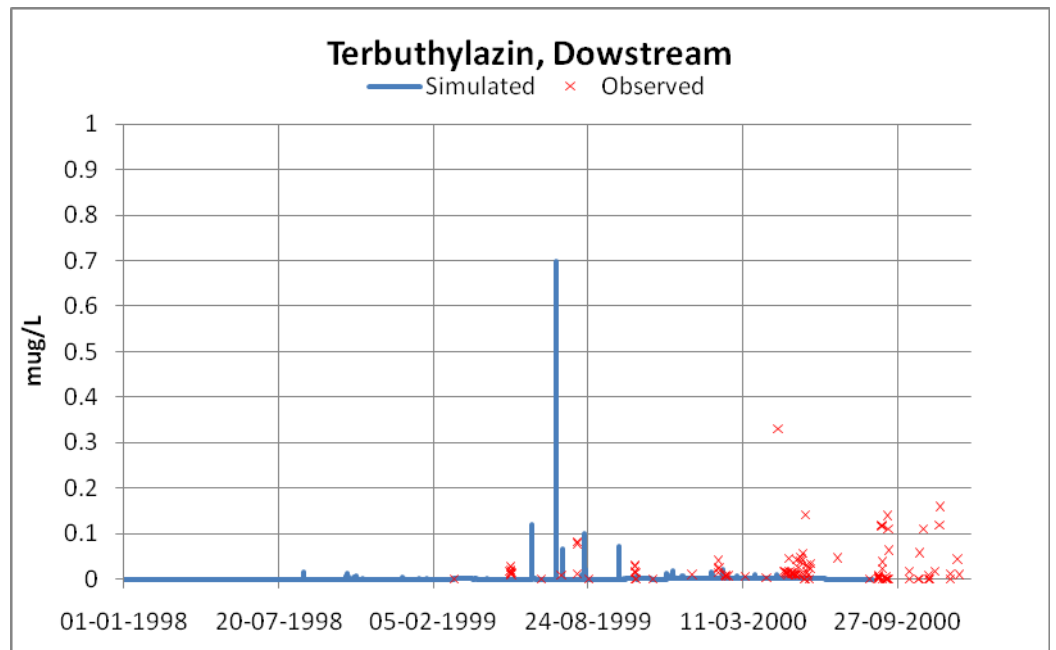
Figur 7.29 Målte og simulerede (MIKE SHE - Daisy) pesticidkoncentrationer nedstrøms i vandløbet.(Bentazon)



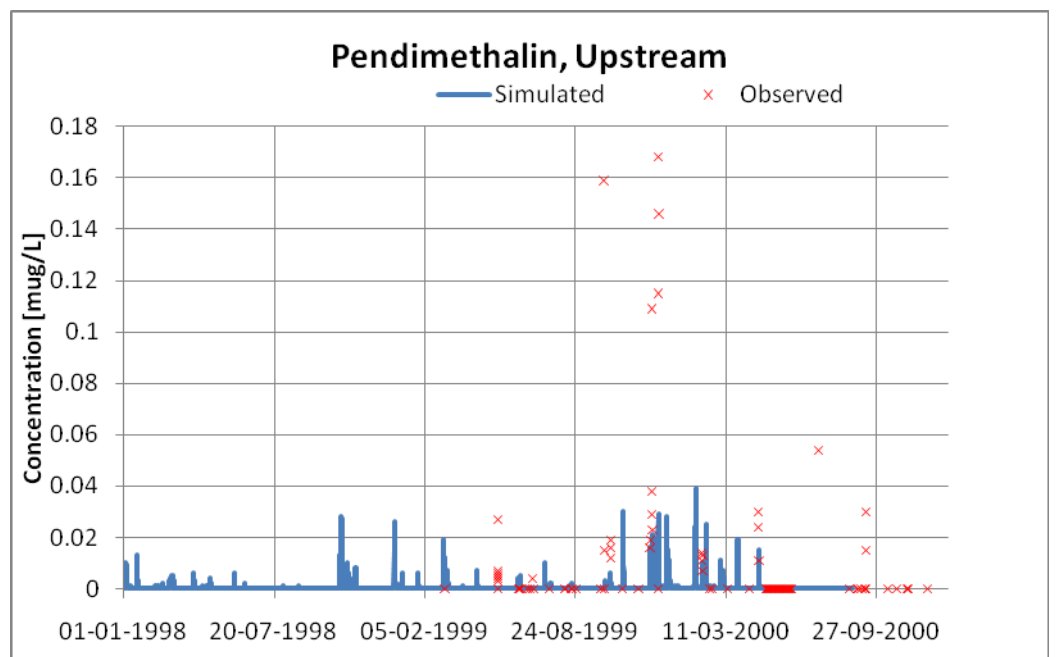
Figur 7.30 Målte og simulerede (MIKE SHE - Daisy) pesticidkoncentrationer opstrøms i vandløbet. (Terbuthylazin)



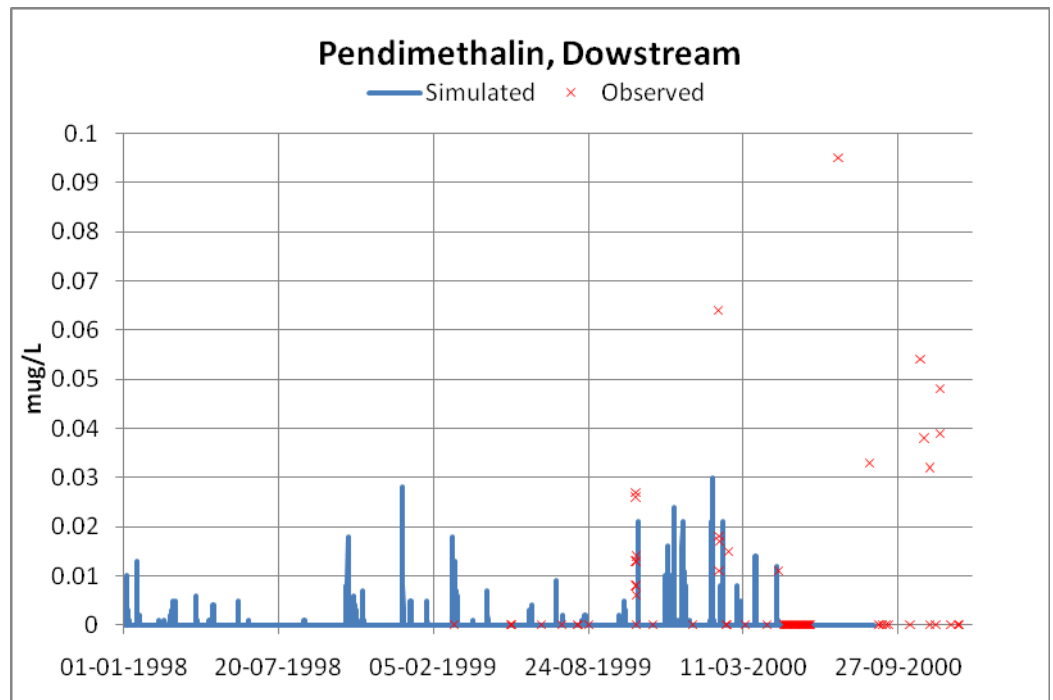
Figur 7.31 Målte og simulerede (MIKE SHE - Daisy) pesticidkoncentrationer opstrøms i vandløbet. (Terbuthylazin). Bemærk ny skala i forhold til Figur 7.30.



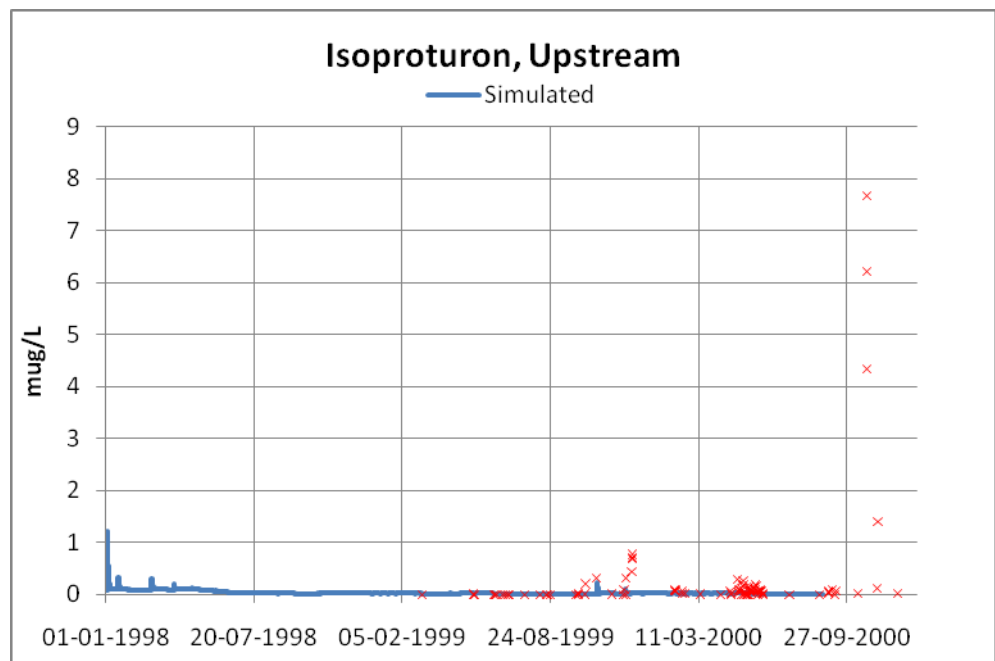
Figur 7.32 Målt og simuleret (MIKE SHE - Daisy) pesticid koncentrationer nedstrøms i vandløbet.(Terbuthylazin)



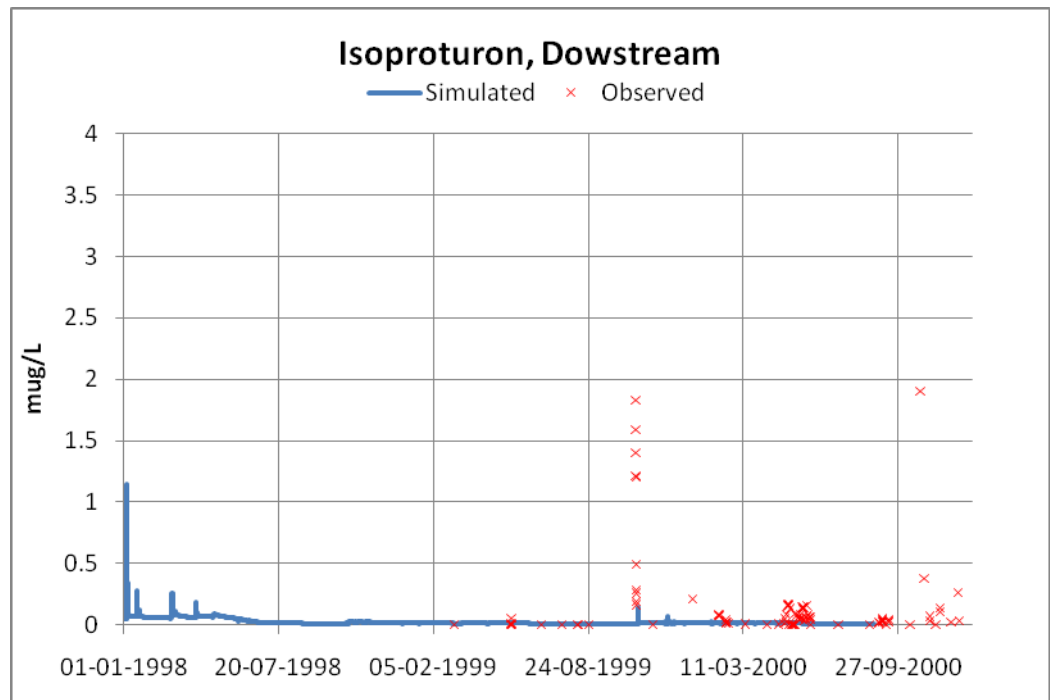
Figur 7.33 Målte og simulerede (MIKE SHE - Daisy) pesticidkoncentrationer opstrøms i vandløbet.(Pendimethalin)



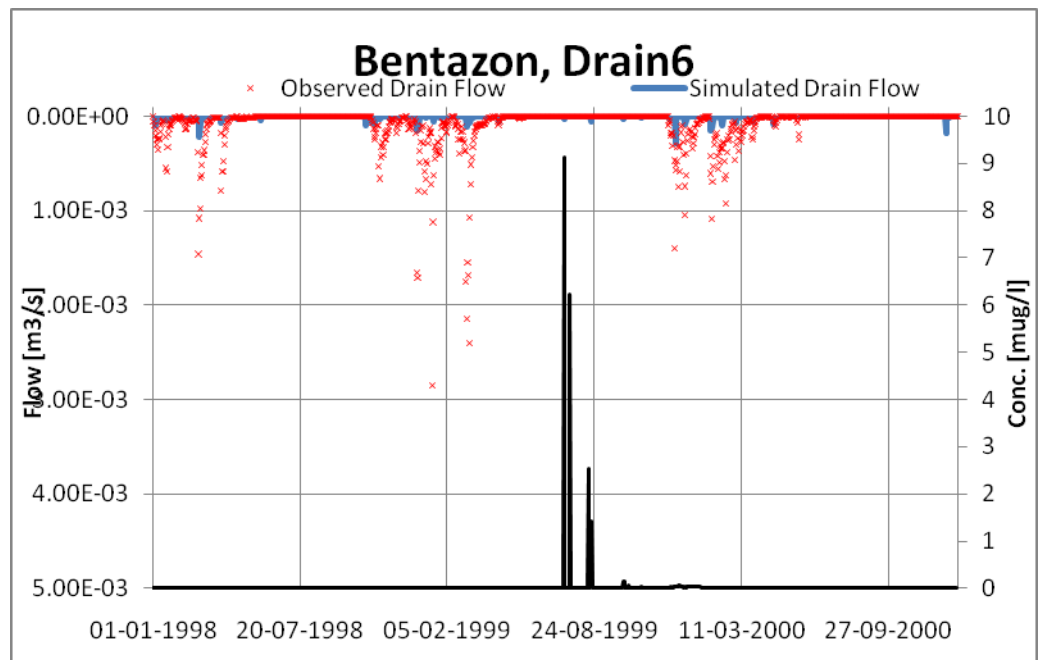
Figur 7.34 Mål te og simulerede (MIKE SHE - Daisy) pesticidkoncentrationer nedstrøms i vandløbet.(Pendimethalin)



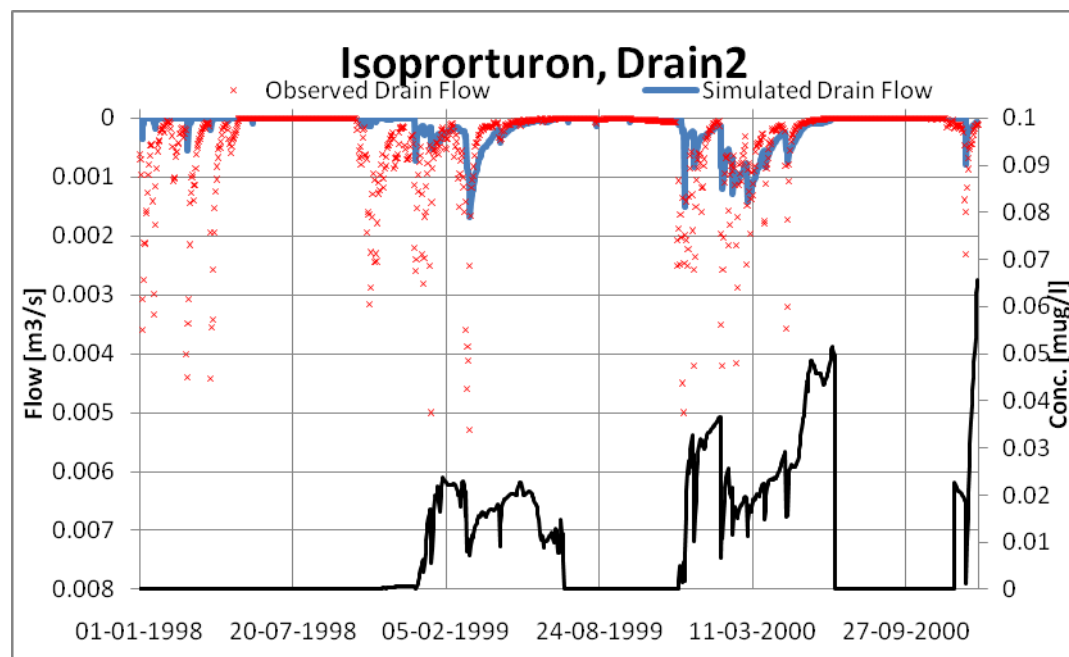
Figur 7.35 Mål te og simulerede (MIKE SHE - Daisy) pesticidkoncentrationer opstrøms i vandløbet.(Isoproturon)



Figur 7.36 Målte og simulerede (MIKE SHE - Daisy) pesticidkoncentrationer nedstrøms i vandløbet.(Isoproturon))



Figur 7.37 Målte og simulerede (MIKE SHE - Daisy) strømings- og pesticid- (Bentazon) koncentrationer nedstrøms i vandløbet for dræn 6.



Figur 7.38 Målte og simulerede (MIKE SHE - Daisy) strømnings- og pesticid- (Bentazon) koncentrationer nedstrøms i vandløbet for dræn 2.

7.4 Sammenfattende diskussion

Den i nærværende projekt udviklede model Daisy2D (kap. 4) udmærker sig særligt ved:

1. Den kan i 2D beskrive strømning og transport til dræn og grundvand.
2. Den kan beskrive præferencestrømning og -transport i store bioporer med særlig fokus på forholdene omkring dræn.
3. Den kan tage strømning og transport i sprækkesystemer i regning.
4. Den kan simulere kolloidfaciliteret transport.

Ad. 1. Der eksisterer i dag en række modeller, der kan beskrive strømning og transport i 2D eller 3D. De mest kendte er Hydrus (Simunek et al., 1999), FEFLOW (Diersch og Kolditz, 2002). og HydroGeoSphere (Therrein et al., 2006).

Ad. 2. Vi har ikke kendskab til modeller, der anvender samme koncept til beskrivelse af præferencestrømning og -transport i store bioporer (se afsnit 2.3), som er anvendt i nærværende projekt. Præferencestrømning og -transport er i andre modeller blevet beskrevet ved at tillægge de store bioporer særlige retentions- og ledningsevneegenskaber (e.g. Klaus and Zehe, 2010; Rosenbom 2009). Dette "retentionskoncept" betyder, at de områder i jorden, hvor de store bioporer befinder sig, tillægges et "sug", der afhænger af et stedspecifikt vandindhold i bioporen. Dette betyder eksempelvis, at der også optræder et "sug" i bioporen, når denne er tom. I nærværende koncept optræder der kun "sug" i bioporen, når den er aktiveret under en præferencestrømningshændelse, og under disse forhold bestemmes "suget" af længden af den hængende vandsøjle, som er opbygget under hændelsen. Sidstnævnte koncept er bl.a. i overensstemmelse med Tofteng et al. (2002) og Fox et al. (2004). Hvor godt "retentionskonceptet" kan efterligne strømning i store bioporer afhænger af de særlige retentions- og ledningsevneegenskaber, der tillægges bioporene. Det i Daisy2D anvendte koncept betyder at bioporer, der er forbundet med dræn får særlige egenskaber:

- De fyldes ikke op og vil således kunne udøve et "sug" på omgivende jord længere tid end bioporer, der har et mindre effektivt afløb.
- Da det ikke sker filtrering af kolloider i disse bioporer, etableres der en særlig transportvej for kolloidfaciliteret transport til dræn.

Ad. 3. og 4. Disse faciliteter er ikke unikke for Daisy, men heller ikke almindeligt forekommende i standard-pesticidudvaskningsmodeller.

Samlet vurderer vi at den i nærværende projekt udviklede model er unik.

I kapitel 6 er Daisy blevet testet mod eksperimentelle data fra Rørrendegård og fra VAP stationerne Estrup og Silstrup. Testet består i sammenligning mellem målte og simulerede variable.

Måleresultater er behæftet med usikkerhed. Desværre har det generelt ikke været muligt at kvantificere denne usikkerhed. Usikkerheden knytter sig både til målemetodikken og til målingernes repræsentativitet. Usikkerheden på sidstnævnte skyldes i særlig grad rumlig variabilitet. Det forventes at, jo større jordvolumen en måling repræsenterer, desto mindre usikkerhed er der på målingens repræsentativitet. Dvs. at målinger i eller af drænafstrømningen forventes at være behæftet med væsentlig mindre usikkerhed end enkelte målinger i jorden som f.eks. jordvandsmålinger med TDR eller

koncentrationsmålinger i sugekopper. Yderligere forventes målingerne i de dybe, horisontalt udbredte filtre at være behæftet med mindre usikkerhed på grund af rumlig variabilitet end fx sugekopmålinger.

Tilsvarende er simuleringresultater behæftet med usikkerhed. Traditionelt opdeler man i modelleringsstudier usikkerhed i modelusikkerhed og i parameteriseringsusikkerhed. Førstnævnte skyldes, at en model altid er en simplificering af virkeligheden og at modellen derfor kun i begrænset omfang repræsenterer denne. Sidstnævnte skyldes at værdifastsættelsen af modellens parametre er behæftet med usikkerhed. Givet at den nødvendige information er til stede, vil denne usikkerhed i princippet kunne adresseres med statistiske metoder. Dette er en meget omfattende opgave, som falder uden for dette projekts rammer.

Modelusikkerheden knytter sig til den valgte konceptualisering af virkeligheden herunder valget af hvilke naturlige processer, der skal medtages i modellen. Vi mener, at modeltesten understøtter, at den valgte konceptualisering og detaljeringsgrad overordnet set er forsvarlig. Men den peger også på processer, som i visse tilfælde er betydningsfulde, og som ikke er inddraget i modellen eller som ikke er beskrevet på fuld tilfredsstillende vis. F.eks. burde frost-tø processen inddrages, da udvaskning typisk er et vinterfænomen. Derudover pegede modeltesten på, at modelusikkerheden i særlig grad knytter sig til overfladeprocesser og -egenskaber så som:

- Ændringen i hydrauliske egenskaber i de øverste jordlag som følge af jordbehandling og efterfølgende vejrlig.
- Kolloidgenerering og mobilisering på jordoverfladen som følge af jordbehandling og efterfølgende vejrlig.
- Sorption og transport på jordoverfladen
- Betydningen af planterester på jordoverfladen for interception og nedbrydning af pesticider.

I flere tilfælde er ny viden en forudsætning for, at der kan gives en væsentlig modelmæssig forbedret beskrivelse.

Parameteriseringsusikkerheden knytter i særlig grad an til ufuldstændig viden om jordens egenskaber og den meget betydelige rumlige variabilitet, der eksisterer i disse egenskaber. Hertil kommer, at mange egenskaber også er behæftet med en betydelig tidlig variabilitet. Yderligere knytter der sig usikkerhed til pesticiders egenskaber i miljøet, her specielt i jordmiljøet.

Efter at have fremhævet usikkerheden på testdata og modelresultater, mener vi alligevel, at resultaterne rapporteret i kapitel 6 berettiger den konklusion, at det udviklede modelkoncept med efterfølgende implementering i Daisy kan give en retvisende beskrivelse af virkeligheden.

Den gennemførte modeltest kan ikke betegnes som en validering i dette ords egentlige betydning. Det er vores opfattelse at modeller af Daisy's type ikke lader sig validere, da enhver modelanvendelse indeholder et vist mål af kalibrering og bruger-"guesstimat". Tillid til modelresultater opbygges gennem erfaring med succesfuld anvendelse af en model. Vi anbefaler derfor, at yderligere erfaringer med modellen opnås ved at konfrontere med flere eksperimentelle data. Sideløbende med en sådan konfrontation anbefaler vi, at der sker en løbende videreudvikling af modellen.

Modelarbejdet har været med til at underbygge den erkendelse, at pesticidudvaskning meget ofte er hændelsesdrevet (jf. kapitel 6 og 7). Dette betyder, at udvaskning for en given lokalitet ikke kan predikteres alene på grundlag af generelle lokale forhold, men at viden om de helt specifikke forhold, da hændelsen indtraf, er afgørende. Endvidere påviste modelarbejdet betydningen af kolloidfaciliteret transport for transport af et stærkt adsorberende pesticid som f.eks. glyfosat. Dette er i god overensstemmelse med eksperimentelle studier (se f.eks. Gjettermann et al. 2009; Gjettermann et al. 2010).

Et modelarbejde, hvor modellen konfronteres med eksperimentelle data, vil kunne bidrage til at identificere de hændelser, der i særlig grad bidrager til pesticidudvaskningen. Dette vil kunne bidrage til at afklare under hvilke omstændigheder, der er særlig stor risiko for pesticidudvaskning. Et sådant katalog over disse særlige omstændigheder vil eventuelt kunne bidrage til at opstille overordnede regler for, under hvilke forhold det ikke er hensigtsmæssigt at udbringe pesticider. En sådan viden vil kunne anvendes i reguleringssammenhæng.

På baggrund af analysen af VAP-simuleringerne (afsnit 7.1) konkluderede vi, at der ikke er nogen simpel sammenhæng mellem drænvandskoncentrationer og koncentrationer i vand, der bevæger sig uden om drænene til grundvandet. Jacobsen og Kjær (2007) anfører "Used critically, it is thus believed that drainage water concentrations can serve to characterize the flux-averaged concentration of pesticides at drain depth". Hvis man med "used critically" forstår avanceret matematisk modellering, som med nærværende model, der specifikt adresserer strømning og transport i bioporedomænet, er vi delvist enige. Det vil dog være yderst vanskeligt at opnå en tilstrækkeligt korrekt modelparametrisering af bioporedomænet omkring 1 meters dybde. Et estimat af pesticidfluxen under bioporedomænet vil være forbundet med væsentlig mindre usikkerhed.

Kobling af Daisy modellen til en oplandsmodel, MIKE SHE, giver mulighed for at de nye processer, som er udviklet i Daisy kan anvendes på oplandsskala. MIKE SHE er i stand til at repræsentere grundvandsdynamikken i tid og rum, samt strømningsveje til recipienter via grundvand og igennem drænsystemet over hele oplandet. I dette arbejde har vi søgt at finde bevis for at dette koblede modelkoncept er holdbart, dvs "proof of concept". Vi udviklede en dynamisk kobling mellem de to modeller ved brug af OpenMI teknologi og efter afprøvning af koden anvendte vi den koblede model til beregning af pesticidtransport i Lillbæk oplandet. Resultaterne synes lovende. Selvom modellen ikke er i stand til præcist at reproducere de observerede pesticid koncentrationer, giver det en langt mere plausibel repræsentation af de observerede pesticid hændelser, hvilket ikke var tilfældet ved tidligere modelstudier, (Styczen et al., 2004).

På baggrund af resultaterne i nærværende projekt foreslår vi at:

- Der lægges større vægt på pesticidkoncentrationer målt i horisontalt udbredte filtre uden for bioporedomænet end på målinger inden for bioporedomænet, når koncentrationer i perkolation til grundvand skal vurderes.
- Vandfluxe og pesticidkoncentrationer målt i drænvand anvendes sammen med målte pesticidkoncentrationer under bioporedomænet ved matematisk modellering af pesticidfluxe til grundvandet

(gennemsnitskoncentrationer). Fluxene simuleres under bioporeområdet.

8 Konklusion

Vi har udviklet et modelsystem til beskrivelse af pesticiders skæbne i miljøet. Modelsystemet opererer i markskala og på oplandsskala. Markskalamodellen består af en 2D beskrivelse af strømning og transport af stof til dræn. Oplandskalamodelsystemet består af ovennævnte markskala model der på kodeniveau via "OpenMI" er koblet til den hydrologiske oplandsmodel MIKE-SHE. "OpenMI" er en protokol, der beskriver kobling mellem modeller.

Markskalamodellen er en videreudvikling af jord-plante-atmosfære system modellen Daisy. De vigtigste modeludvidelser er:

- Beskrivelse af strømning og transport i 2D
- Beskrivelse af strømning og transport i 3 domæner
 - Primært domæne (typisk jordmatrix eller del af matrixdomæne med lille transporthastighed)
 - Sekundært domæne (typisk sprækkedomæne eller del af matrixdomæne med stor transporthastighed)
 - Tertiært domæne (typisk makropore domænet – domænet med store bioporer)
- Beskrivelse af udveksling mellem domæner
- Beskrivelse af kolloidgenerering og kolloidmobilisering på jordoverfladen
- Beskrivelse af kolloidfiltrering i jordmediet (de 3 domæner)
- Beskrivelse af kolloid-faciliteret transport
- Beskrivelse af interception i planterester på jordoverfladen og frigivelse af interceperede pesticider

Forud eksisterende funktionaliteter i Daisy af særlig betydning for pesticiders skæbne i miljøet:

- 1. ordens nedbrydning influeret af jordtemperatur, jordfugtighed og dybde.
- Ligevægtssorption (lineær)
- Sorptionskinetik med flere sorptionsdomæner

Udformningen af markskalamodellen bygger på tidligere erfaringer samt på markskalaforsøg udført på Rørrendegård i projektperioden. Hovedresultaterne fra markforsøgene var:

- Antallet og fordelingen af bioporer er ikke influeret af, om man er i eller uden for drængroften
- Der er mulighed for god makroporeforbindelse til drænet i et snævert område i og omkring drængroften
 - Der kan skabes lokal vandmætning omkring bioporer ved drængroften, hvilket fører til strømning i dræn
 - Jorden omkring drænrøret blev blåfarvet, dvs. at der her er mulighed for sorption og remobilisering
- Fordelingen af blåfarvede, hydraulisk aktive bioporer er ikke påvirket af afstanden til drængroften
- De blåfarvede bioporer er meget heterogent fordelt i de undersøgte profiler

- Fordelingen af blåfarvede bioporer kan være påvirket af, om der er forbindelse til sprækker eller dræn

Markskalamodellen er blevet testet mod data fra Rørrendegård og VAP lokaliteterne Estrup og Silstrup.

Resultaterne fra modeltesten på Rørrendegård viste at:

- Modellen var i stand til at beskrive jordvandsdynamikken tilfredsstillende
- Modellen var i stand til at beskrive drænafstrømningen tilfredsstillende
- Modellen var kun delvis i stand til at beskrive bromidtransport og udvaskning tilfredsstillende. Problemerne med beskrivelsen tilskrives problemer med at give en korrekt beskrivelse af bromids indtrængen i jorden efter udbringning. Dette skete i forbindelse med en længere periode med frost i jorden. Frost/tø hændelser, som ikke beskrives i modellen, synes at have en betydelig indflydelse på transportdynamiken.
- Modellen gav ikke en fuldt tilfredsstillende beskrivelse af kolloidudvaskningen til dræn. Kolloidudvaskningen sker i forbindelse med enkeltstående hændelser. Dynamikken beskrives ganske godt af modellen, men den udvaskede mængde beskrives ikke tilfredsstillende. Vi tilskriver sidstnævnte en manglende evne til at beskrive kolloidgenereringen og dermed forholdene på jordoverfladen korrekt. Forhold som fugtighedsforholdene ved jordbehandling, den tidlige afstand fra jordbehandling, frost og tø m.m. tilskrives stor betydning. Disse forhold er ikke taget i regning.

Resultaterne fra Estrup viste:

- Modellen var i stand til at beskrive drænafstrømningen tilfredsstillende
- Modellen var i stand til at give en relativt god beskrivelse af bromidtransport og udvaskning. Det tidlige forløb af drænudvaskningen er tilfredsstillende beskrevet men den totale mængde er undervurderet. For at opnå denne beskrivelse var det nødvendigt at tillade en betydelig lateral strømning og transport i pløjelaget over pløjesålen. Bromidindhold i porevandet og i de dybe filtre skønnes tilfredsstillende beskrevet.
- Modellen var i stand til at give en relativt god beskrivelse af glyfosattransport og udvaskning. Det tidlige forløb af drænudvaskningen er tilfredsstillende beskrevet men den totale mængde er undervurderet. Målingerne viser en lang hale i udvaskningen, som undervurderes i simuleringen. Der er givet plausible forklaringer på afvigelsen.
- Modellen gav også en tilfredsstillende beskrivelse af transport og udvaskning af dimethoat og fenpropimorph.

Resultaterne fra Silstrup viste:

- Modellen var i stand til at beskrive drænafstrømningen tilfredsstillende
- Modellen var i stand til at give en tilfredsstillende beskrivelse af bromidtransport og udvaskning. For at opnå denne beskrivelse var det nødvendigt at tillade en betydelig lateral strømning på overfladen.

- Modellen var i stand til at give en tilfredsstillende beskrivelse af glyfosattransport og udvaskning. For at opnå denne beskrivelse var det nødvendigt at antage at en del af det udbragte glyfosat blev interceperet i planterester på jordoverfladen og efterfølgende vasket ud.
- Modellen gav også en tilfredsstillende beskrivelse af transport og udvaskning af dimethoat, fenpropimorph og met amitron i måleperioden.

Det bemærkes specielt, at forskellige faktorer har været styrende for den simulerede glyfosatudvaskning på de 2 VAP-lokaliteter, henholdsvis overfladeegenskaber (Silstrup) og hydrauliske egenskaber i den øvre del af profilen (Estrup).

Overordnet anser vi modellen for at være i stand til at beskrive strømning og transport i de øverste 1-2 meter af jordmediet inklusiv betydende præferentielle transportveje i jorden og til dræn. Vedrørende transport til dybereliggende jordlag savnes især viden om kontinuiteten af præferentielle transportveje. Vi mener at der er rum for forbedringer af modellen, specielt omkring processer på jordoverfladen.

VAP simuleringerne viste, at glyfosatkoncentrationer over drikkevandsgrænden relativt hurtigt efter udbringning kunne optræde i drædybde (indenfor bioporedomænet). Dette gjaldt både ved og mellem dræn. Simuleringerne viste også, at koncentrationsniveauet faldt gennem udvasknings sæsonen, og at koncentrationsniveauet uden for bioporedomænet holdt sig på et meget lavt niveau. Det skal dog bemærkes, at simuleringsperioden maksimalt omfattede to udvasknings sæsoner.

Udvaskningen af pesticider og kolloider med drænvand samt specielt udvaskningsdynamikken kunne ikke simuleres tilfredsstillende uden at inddrage de særlige transportforhold, som knytter sig til makroporer med direkte forbindelse til drænene. Der er ikke nogen simpel sammenhæng mellem drænvandskoncentrationer og koncentrationer i vand, der bevæger sig uden om drænene til grundvandet.

En ny metode til opskalering af Daisy-modellen fra mark til oplandsskala baseret på en koblet MIKE SHE – Daisy model er udviklet. Forvaltning og beskyttelse af grundvand foregår på oplandsskala. Da pesticider primært bevæger sig med vand, er det vigtigt at kunne beskrive strømning af vandet på oplandsskala, herunder dets strømningsvej og strømningsdynamikken. I kobling beskriver Daisy mark skala processer, mens MIKE SHE beskriver grundvandsdynamikken i tid og rum på oplandsskala, samt strømningsveje til recipienter både via grundvand og igennem drænsystemet. Metoden bygger på OpenMI (Open Modelling Interface), et nyt åbent modelleringsinterface, udviklet netop med det formål at kunne forbinde modelkomponenter fra forskellig oprindelse (Gregersen et al., 2007).

I dette arbejde har vi foretaget et ”proof-of-concept” studium, dvs. en undersøgelse af om en sådan kobling kan bruges til at simulere vandstrømning og pesticid transport fra marken til recipienter på oplandsskala. Til formålet har vi afprøvet den nye fremgangsmåde på Lillebæk oplandet. Lillebæk er valgt dels pga. eksisterende feltobservationer, og dels fordi oplandet tidligere har været genstand for oplandsmodellering.

Resultaterne viser, at den koblede model beskriver grundvandspotentialer og vandbalancen tilfredsstillende. Den simulerede afstrømning både i vandløbet og i drænene udviser et langsommere afstrømningsrespons. Da drænstrømning klart bidrager mest til strømning i vandløbet, vil det kræve yderligere undersøgelser og kalibrering af drænstrømning for at kunne forbedre resultaterne. Den koblede model er generelt meget bedre til at reproducere de kortvarige hændelser i pesticidkoncentrationen end den tidligere MIKE SHE simulering, selvom drænvandsdynamikken er langsommere. Det er sandsynligvis på grund af de nye mekanismer for pesticidtransport i Daisy, som inkluderer direkte forbindelser mellem bioporer og drænsystemet. Størrelsesordenen af den simulerede koncentration passer med de observerede koncentrationer, men variationen i tid er ikke korrekt simuleret. Det skyldes formentlig dels de simplificerede beskrivelser af afgrøders fordeling og dels usikkerhed i pesticidtilførsel. Selv om den koblede model ikke nøjagtigt reproducerer feltmålingerne i Lillebæk, viser disse første resultater at konceptet for opskalering kan bruges på opland skala, og de nye processer i Daisy på mark skala har en tydelig effekt på pesticidtransport og koncentrationer på oplandsskala.

9 Perspektivering

Beskyttelse af drikkevandet eller "grundvandet" i en større, men ikke nærmere defineret, dybde er et hovedsigte ved den administrative regulering af pesticidanvendelsen. I forbindelse med tidlig varsling og vurdering af risikoen for forurening af grundvandet med pesticider har man i Danmark valgt at fokusere på det øverste grundvand. En administrativt operativ tilgang til en vurdering af risikoen for forurening af grundvandet med pesticider er at fastsætte en referencedybde hvorunder en given grænseværdi for pesticidkoncentrationer ikke må være overskredet, f.eks. som et gennemsnit over et år. Derfor er en kvantitativ beskrivelse af transporten af pesticider fra udbringelsen på jordoverfladen til det øvre grundvand af betydelig interesse. Endvidere skal det bemærkes at pesticider også kan have en økologisk betydning i vandløb og søer. Som de udviklede værktøjer også kan bidrage til at undersøge, i relation til myndighedernes administration af vandrammedirektivet.

I nærværende projekt er udviklet en matematisk model (Daisy2D) der simulerer vandstrømning og stoftransport i de øverste 1-2 m af jorden i systemer med markdræn. Eksperimentelle undersøgelser har vist, at præferentiel strømning og præferentiel transport i store bioporer potentielt kan spille en afgørende rolle for transporten af specielt stærkt adsorberende pesticider. Derfor er der ved modeludviklingen lagt særlig vægt på disse transportveje. Test af den udviklede model viste at den er i stand til at simulere udvaskning til markdræn af såvel svagt som stærkt adsorberende stoffer. Vi har derfor konkluderet, at modellen er i stand til at simulere pesticiders skæbne i den øverste del af jorden. Desuden har vi analyseret en række senarier ved at anvende modellen. Hovedresultaterne af analysen er:

1. Det er af meget stor betydning for simuleringsresultaterne, om de nedadgående stoffluxe beregnes i en dybde, der er inden for bioporedomænet eller uden for dette domæne.
2. Der er ingen simpel sammenhæng mellem drænvandskoncentrationer og koncentrationer i vand, der bevæger sig uden om drænene til grundvandet.

En konsekvens af punkt 1 er at man i administrativ sammenhæng bør vælge en referencedybde der ligger under bioporedomænet. Og en konsekvens af punkt 2 er at eksperimentelle resultater som f.eks. fra VAP-programmet bør fortolkes ved anvendelse af en model som f.eks. Daisy2D inden de anvendes ved vurdering af risikoen for forurening af grundvandet.

Derudover er anvendelsen af de nye proces-beskrivelser i Daisy udvidet, ved at koble Daisy med en MIKE SHE oplandsmodel, for af den vej, at beskrive pesticidtransporten på oplandsskala inklusiv grundvandsdynamikken og påvirkningen af recipient. Indledningsvis er foretaget et "proof-of-concept" studie, hvor det er bevist at en sådan kobling baseret på OpenMI teknologi kan bruges til, på oplandsskala, at simulere vandstrømning og pesticidtransport fra mark til recipient. Efterfølgende anvendelse af prototypemodellen på Lillebæk oplandet viser, at den koblede model generelt er bedre til, at reproducere de kortvarige hændelser i målte

pesticidekoncentrationer end resultater fra tidligere modelkørsler, på grund af de nye beskrivelser af pesticidtransporten i Daisy.

Fremadrettet bør modellen yderligere testes ved konfrontation med måleresultater. Dette vil medvirke til øget forståelse af modellens muligheder og begrænsninger, ligesom det vil være med til at øge troværdigheden af simuleringresultaterne. I denne sammenhæng udgør VAP et helt unikt datasæt, med en kombination af målinger i dræn og jord som vi håber fortsætter. Ved planlægning af fremtidige målinger bør de særlige databehov ved brug i modellering dog i endnu højere grad inddrages.

Yderligere test af modellen bør foregå sideløbende med nødvendige modeljusteringer. Vi er allerede blevet opmærksomme på, at frost-tø processen burde inddrages, da udvaskning typisk er et vinterfænomen. Endvidere pegede modeltesten på manglende viden, der i særlig grad knytter sig til overfladeprocesser og egenskaber så som:

- Ændringen i hydrauliske egenskaber i de øverste jordlag som følge af jordbehandling og efterfølgende vejrlig.
- Kolloidgenerering og mobilisering på jordoverfladen som følge af jordbehandling og efterfølgende vejrlig.
- Sorption på jordoverfladen.
- Betydningen af planterester på jordoverfladen for interception og nedbrydning af pesticider.

Modelarbejdet har været med til at underbygge den erkendelse, at pesticidudvaskning meget ofte er hændelsesdrevet. Dette betyder, at udvaskning for en given lokalitet ikke kan prædikteres alene på grundlag af generelle lokale forhold (f.eks. oplysninger om jordtypen), men at viden om de helt specifikke forhold (f.eks. oplysninger om overfladens øjeblikkelige beskaffenhed), da hændelsen indtraf, er afgørende. Et modelarbejde hvor modellen konfronteres med eksperimentelle data vil kunne bidrage til at identificere de hændelser, der i særlig grad bidrager pesticidudvaskningen. Dette vil kunne bidrage til at afklare under hvilke omstændigheder, der er særlig stor risiko for pesticidudvaskning. Et sådant katalog over disse særlige omstændigheder vil eventuelt kunne bidrage til at opstille overordnede regler for, under hvilke forhold det ikke er hensigtsmæssigt at udbringe pesticider. En sådan viden vil kunne anvendes i reguleringssammenhæng.

Med hensyn til den koblede model er der et stykke vej fra prototypemodellen til et mere operationelt modelværktøj. Videreudvikling bør bl.a. fokusere på en mere avanceret udveksling af pesticid mellem de to modeller omkring grundvandsspejl samt udveksling af kolloider for stærkt adsorberende stoffer. Efterfølgende burde den koblede model ligeledes konfronteres med feltmålinger, herunder især de typer af feltdata, som findes i Lillebæk-oplandet, hvor der er foretaget samtidige målinger af både vandtransport og pesticidkoncentrationer i dræn og recipienter. Det vil både kunne bidrage til at dokumentere pålideligheden af værktøjet og til at identificere de væsentligste hændelser, der bidrager til pesticidpåvirkninger i recipienterne, også i forhold til Vandrammedirektiv. Derudover skal det koblede modelværktøj gøres mere brugervenligt, hvis det skal have en mere udbredt praktisk anvendelse.

10 Referencer

- Abrahamsen, P. and Hansen, S. (2000). Daisy: an open soil-crop-atmosphere system model. *Env. Modelling Softw.*, 15, 313-330.
- Allerup P. Madsen H, and Vejen F. (1998). Standardværdier (1961-90) af nedbørskorrektioner. Technical Report 98-10. DMI 18 pp.
- Barlebo, H.C, Rosenbom, A.E and Kjær, J (2007). Evaluation of Pesticide Scenarios for the Registration Procedure. Environmental Project No. 1178. Danish Ministry of the Environment. Environmental Protection Agency.
- Baun, D.L., Styczen, M., Lønborg, M.J., Clausen, T., Grøn, C. Koch, C.B. Gjettermann, B. & Petersen, C. (2006): Kvantificering af kolloid-faciliteret transport af pesticider. *Pesticidforskning 2007*
- Burkhardt, M., Kasteel, R., Vanderborght, J. & Vereecken, H. (2008) Field study on colloid transport using fluorescent microspheres. *European Journal of Soil Science* 59, 82-93
- Butts, M. B., Payne, J. T., Kristensen M. and Madsen. H. (2004). An evaluation of the impact of model structure on hydrological modelling uncertainty for streamflow prediction. *Journal of Hydrology*, Volume 298, Issues 1-4, 1 October 2004, 242-266.
- Butts, M.B. and Graham, D.N. (2008) Evolution of an integrated surface water-groundwater hydrological modelling system. In *Proceeding of International Association of Hydraulic Engineering and Research (IAHR) International Groundwater Symposium - Flow and Transport in Heterogeneous Subsurface Formations: Theory, Modelling & Applications*, Istanbul, Turkey, June 18-20, 2008.
- Børgesen CD, Jacobsen OH, Hansen S and Schaap MG (2006): Soil hydraulic properties near saturation, an improved conductivity model. *J. Hydrology* 324, 40-50.
- Daraghmeh, O.A., Jensen, J. R. & Petersen C.T. (2008). Near-saturated hydraulic properties in the surface layer of a sandy loam soil under conventional and reduced tillage. *Journal of Soil Science Society of America*, 72(6):1728-1737.
- DHI (2011), MIKE SHE – An integrated hydrological modelling framework Volume 1 Users Guide
- Diersch H-JG, Kolditz O (2002) Variable-density flow and transport in porous media: approaches and challenges. *Advances in Water Resources* 25 (2002) 899–944.
- DJF (2004). Proceedings fra Seminar om binding, transport og nedbrydning af Glyphosat ved landbrugsmæssig anvendelse den 15. september 2004. Forskningscenter Flakkebjerg.) Svenningsen S.B. og Jacobsen, J (eds.).

- Edwards, C.A., Bohlen, P.J. (1996): *Biology and Ecology of Earthworms*. Chapman & Hall, London.
- Ewing, RP, Horton R (1999) Discriminating Dyes in Soil with Image Analysis. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 63:18-24
- FOCUS (2000). Focus groundwater scenarios in the EU review of active substances. FOCUS Groundwater Scenarios Workgroup, EC Document Reference Sanco/321/2000 rev.2, 202pp.
- FOCUS (2002). Generic guidance for focus groundwater scenarios. Version 1.1.
- Forrer, I, Papritz, A, Kasteel, R, Fluhler, H, Luca, D, (2000) Quantifying dyet racers in soil profiles by image processing. *Eur J. Soil Sci.* 51:313-322
- Fox, G.A., Malone, R., Sabbagh, G.J., Rojas, K. (2004): Interrelationship of macropores and subsurface drainage for conservative tracer and pesticide transport. *Journal of Environmental Quality* 33: 2281-2289.
- Gijbers, P. J. A., Moore, R. V. and Tindall C. I. (2002) HarmonIT: Towards OMI, an open modelling interface and environment to harmonise European developments in water related simulation software. *Hydroinformatics 2002*. (<http://www.openmi.org>).
- Gjettermann, B., Nielsen, K. L., Petersen, C.T., Jensen, H. E. & Hansen, S. (1997): Preferential flow in a sandy loam soil as affected by irrigation intensity. *Soil Technology* 11:139-152.
- Gjettermann, B, Styczen, M., Hansen, H.C.B., Vinther, F.P., and Hansen, S. (2008) Challenges in modelling dissolved organic matter dynamics in agricultural soil using Daisy. *Soil Biology & Biochemistry* 40.
- Gjettermann, B. Petersen, C.T., Koch, C.B., Spliid, N. H., Grøn, C., Baun, D.L., Styczen, M. (2009): Particle-Facilitated Pesticide Leaching from Differently Structured Soil Monoliths. *J. Environ. Qual.* 38:2382–2393 (2009).
- Gjettermann, B. Petersen C.T., Hansen S., Koch C.B., Styczen M. (2010): Kinetics of glyphosate desorption from mobilized soil particles. *Soil Science Society of America Journal* 75:2011 (doi:10.2136/sssaj2010.0198)
- Gjettermann, B., Styczen M., Koch C.B., Hansen S., Petersen C.T. (2011): Evaluation of sampling strategies for pesticides in a macroporous sandy loam soil. *Soil and Sediment Contamination* (in print)
- Graham, D.N., Chmakov, S, Sapozhnikov A, Gregersen, J.B. (2006) OpenMI Coupling of MODFLOW and MIKE 11. 7th International Conference on Hydroinformatics HIC 2006, Nice, France. <http://www.hic06.org/>
- Graham, D.N. and Butts, M. B. (2006) Flexible, integrated watershed modelling with MIKE SHE. In: *Watershed Models*, (Eds. V.P. Singh & D.K. Frevert) CRC Press. 245-272, ISBN: 0849336090

Gregersen, J. B., Gijsbers P. J. A. and Westen S. J. P. (2007) OpenMI: Open modelling interface, *Journal of Hydroinformatics* Vol 9 No 3 175–191 © IWA Publishing 2007 doi:10.2166/hydro.2007.023

Hansen, S. (1984). Estimation of Potential and Actual Evapotranspiration. *Nordic Hydrology* 15, 205-212.

Hansen, S., Jensen, N.E., Nielsen, N.E., Svendsen, H. (1990). Daisy - Soil Plant Atmosphere System Model, NPo-forskning fra Miljøstyrelsen, A10.

Hansen, S. (2000): Daisy, a flexible Soil-Plant-Atmosphere system Model. 47 pages

Hansen, S., and Abrahamsen, P. (2008) Modeling Water and Nitrogen Uptake Using a Single-Root Concept: Exemplified by the Use in the Daisy Model. In: Ma, L., Ahuja, L.R. and Bruulsema, T.W. and. (Eds.) *Quantifying and Understanding Plant Nitrogen Uptake for System Modeling*. CRC Press, 169-195.

Hansen, J. R., Refsgaard, J. C., Hansen, S. & V. Ernsten (2007): Problems with heterogeneity in physically based agricultural catchment models. *Journal of Hydrology*, vol. 342, issue 1-2, p. 1-16.

Horton, R., Ankeny, M.D. & Allmaras R.R. (1994) Effects of Compaction on Soil Hydraulic Properties. In Soane, B.D. & Ouwerkerk, C. van (eds.): *Soil Compaction in Crop Production*, Elsevier, 662pp.

ImageJ: Rasband, W. ImageJ, U.S. National Institutes of Health, Bethesda, Maryland. <http://rsb.info.nih.gov/ij/> 1997-2008.

Iversen, H.L., Kronvang B., Vejrup, K., Mogensen, B.B. Hansen, A.M. and Hasen L.B. (2003). Pesticides in streams and subsurface drains within two arable catchments in Denmark: Pesticide application, concentration, transport and fate. Ministry of Environment, the Danish Environmental Protection Agency. Pesticide Research No. 69.

Jacobsen, O.H., Kjær, J. (2005): Is drainage water representative of root zone leaching of pesticides? Report, available at the Geological Survey of Denmark and Greenland, Copenhagen (ISBN 87-7871-167-3), 20 pp

Jacobsen, O.H., Kjær, J. (2007): Is tile drainage water representative of root zone leaching of pesticides? *Pest Management Science* 63: 417-428.

Jarvis, N.J. (2007) A review of non-equilibrium water flow and solute transport in soil macropores: principles, controlling factors and consequences for water quality. *European Journal of Soil Science* 58, 523-546

Jaynes, D.B., Logsdon, S.D. & Horton, R. (1995) Field Method for Measuring Mobile/Immobile Water Content and Solute Transfer Rate Coefficient. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 59:352-356

Jørgensen, P.R., Hoffmann, M., Kistrup, J.P. & Bryde, C. (2002): Preferential flow and pesticide transport in a clay-rich till: Field, laboratory, and modelling analysis. *Water Resour. Res.*, 38(11), 1246, doi:10.1029/2001WR000494.

- Jørgensen, P.R., Klint, K.E. & Mølgaard, M.R. (2008): SprækkeJAGG, Regneark til risikovurdering af sprækker i moræneler. Videncenter for Jordforurening, Teknik og Administration Nr. 2
- Kjaergaard, C., de Jonge, L.W., Moldrup, P. & Schjønning, P. (2004a): Water-Dispersible Colloids: Effects of Measurement Method, Clay Content, Initial Soil Matric Potential, and Wetting Rate. *Vadose Zone Journal* 3, 403-412.
- Kjaergaard, C., Moldrup, P., de Jonge, L.W. & Jacobsen, O.H. (2004b): Colloid Mobilization and Transport in Undisturbed Soil Columns. II. The Role of colloid Dispersibility and Preferential Flow. *Vadose Zone Journal* 3, 424-433
- Kjær, J., Olsen, P., Barlebo, H.C., Juhler R. K., Plauborg, F., Grant, R., Gudmundsson, L, and Brüsch, W (2004): The Danish Pesticide Leaching Assessment Programme. Monitoring results May 1999 - June 2003. Danmarks og Grønlands Geologiske Undersøgelse - GEUS (http://pesticidvarsling.dk/publ_result/2003.html).
- Klaus, J. and Zehe E. (2010) Modelling rapid flow response of a tile-drained field site using a 2D physically based model: assessment of 'equifinal' model setups. *Hydrol. Process.* 24, 1595–1609
- Klint, K.E.S. (2004): Undersøgelse af de geologiske forhold ved Gjorslev, Højstrup, mammen og Grundfør. Bilag 2 i: Afprøvning af undersøgelsesmetoder med henblik på etablering af et zoneringskoncept for danske lerjorde: Statusrapport. (Koncept for Udpegning af Pesticidfølsomme Arealer, KUPA). Miljøministeriet, København, Danmark, Red: Vibeke Ernstsen.
- Larsbo, M. and Jarvis, N. (2003). MACRO 5.0. A model of water flow and solute transport in macroporous soil. Technical description. Swedish University of Agricultural Sciences, Department of Soil Sciences, Division of Environmental Physics.
- Lee, K.E. (1985): Earthworms. Their ecology and relations with soils and land use. Academic Press, North Ryde, Australia
- Lægdsmand, M., Villholth, K.G., Ullum, M. & Jensen, K.H. (1999): Processes of colloid mobilization and transport in macroporous soil monoliths. *Geoderma* 93, 33-59.
- Miljøstyrelsen (1998): Drikkevandsudvalgets betænkning. Betænkning fra Miljøstyrelsen Nr. 1, 1998.
- Montagne, D., Cornu, S., Le Forestier, L. & Cousin, I. (2009) Soil drainage as an active agent of recent soil evolution: A review. *Pedosphere* 19, 1-13
- Nielsen, M.H. (2010): On preferential flow pathways in and between drain trenches in a sandy loam till – a study of the quantity, distribution and connectivity of biopores and the distribution of Brilliant Blue, bromide and 1 µm microspheres along macropores. PhD afhandling, Københavns Universitet.

- Nielsen, M.H., Styczen, M., Ernstsén, V., Petersen, C.T. & S. Hansen (2010): Field study of preferential flow pathways in and between drain trenches. *Vadose Zone J.* 9:1073-1079
- Nielsen, M.H., Styczen, M., Ernstsén, V., Petersen, C.T. & S. Hansen (2011): Distribution of bromide and microspheres along macropores in and between drain trenches. *Vadose Zone J.* 10:doi10.2136/vjz2010.0078
- Olesen, S.E. (2009): Kortlægning af potentielt dræningsbehov på landbrugsarealer opdelt efter landskabsselement, geologi, jordklasse, geologisk region samt høj/lavbund. Intern rapport fra Det Jordbrugsvidenskabelige Fakultet, DJF Markbrug Nr. 21, 31 pp.
- Petersen, C.T., S. Hansen & H.E. Jensen (1995): Strømningsmønstre og stoftransport i jord. *Vand og Jord* 2: 47-51.
- Petersen, C.T., Hansen, S. & Jensen, H. E. (1997a): Tillage-induced horizontal periodicity of preferential flow in the root zone. *Soil Sci. Soc. Amer. J.* 61:586-594.
- Petersen, C.T., Hansen, S. & Jensen, H.E. (1997b): Depth distribution of preferential flow patterns in a sandy loam soil as affected by tillage. *Hydrology and Earth System Sciences*, 4, 769-776
- Petersen, C., Jensen, H.E., Hansen, S. & Bender Koch, C. (2001): Susceptibility of sandy loam soil to preferential flow as affected by tillage. *Soil & tillage research* 58, 81-89.
- Petersen, C.T., Holm, J., Koch, C.B., Jensen, H.E. & Hansen, S. (2002): Movement of pendimethalin, ioxynil and soil particles to field drainage tiles. *Pest Management Science* 59, 85-96
- Petersen, C., Hansen, S., Jensen, H.E., Holm, J. & Bender Koch, C. (2004): Movement of suspended matter and a bromid tracer to field drains in tilled and untilled soil. *Soil Use and Management* 20, 271-280
- Petersen, C.T., Nielsen, M. H., Gjettermann, B., Hansen, S. (2009): Makroporetransport på drænet jord. Sammendrag af indlæg fra Plantekongres 2009, Dansk Landbrugsrådgivning, Landscentret, pp. 144-146
- Pers. komm. K. E .S. Klint 2006: Samtale angående sprækkesystemer i Danske jorde.
- Pers. komm. C. Petersen 1995: Samtale angående dybder for sandlinse, kalk - og redoxgrænsened Rørrendegård.
- Philip, J.R. (1957a). Numerical solution of equations of the diffusion type with diffusivity concentration-dependent II. *Australian Journal of Physics*, 10: 29-42.
- Philip, J.R. (1957b). The theory of infiltration: 1. the infiltration equation and its solution. *Soil Sci.*, 83:345-357.
- Philip, J.R. (1958). The theory of infiltration: 6. effect of water depth over soil. *Soil Sci.*, 85:278-286.

Plauborg, F. and J.E. Olesen (1991): Development and validation of the model MARKVAND for irrigation scheduling in agriculture. Tidsskrift for Planteavl's Specialserie. Beretning S 2113. Danish Institute of Plant and Soil Science. Foulum. Denmark. (In Danish).

Poesen, J. (1981): Rainwash Experiments on the Erodibility of Loose Sediments. *Earth Surface Processes and Landforms*, 6, 285-307.

PPDB (2009). The Pesticide Properties Database (PPDB). Developed by the Agriculture & Environment Research Unit (AERU), University of Hertfordshire, funded by UK national sources and the EU-funded FOOTPRINT project (FP6-SSP-022704). Extracted from <http://sitem.herts.ac.uk/aeru/footprint/en/index.htm> 2010-05-17.

Refsgaard, J.C. and B. Storm (1995) MIKE SHE, In *Computer Models of Watershed Hydrology* (ed. V.P. Singh) Water Resources Publications, Colorado, USA, 809-846.

Robert, M. & Terce, M. (1989): Effect of Gels and Coatings on Clay Mineral Chemical Properties. I: Inorganic Contaminants in the Vadose Zone. (Eds. Bar-Yosef, B., Barrow, N.J. & Goldshmid, J.

Rosenbom, A. (2004): Flouriserende tracere til kortlægning af hydrauliske aktive strømningsveje i moræner ved Gjorslev, Bilag 7 i: Afprøvning af undersøgelsesmetoder med henblik på etablering af et zoneringskoncept for danske lerjorde: Statusrapport. (Koncept for Udpegning af Pesticidfølsomme Arealer, KUPA). Miljøministeriet, København, Danmark. Red: Vibeke Ernsten

Rosenbom, A. (2005): Preferential Flow and transport in Variably Saturated Fractured Media. Danmark og Grønlands Geologiske Undersøgelse Rapport 2005/36

Rosenbom, A., Ernsten, V., Flühler, H., Jensen, K.H., Refsgaard, J.C., Wydler, H. (2005): Fluorescence Imaging of Tracer Distribution in Variably Saturated Fractured Clayey Till. I: Preferential Flow and transport in Variably Saturated Fractured Media. Danmark og Grønlands Geologiske Undersøgelse Rapport 2005/36

Rosenbom, A.E., Ernsten, V., Flühler, H., Jensen, K.H., Refsgaard, J.C. & Wydler, H. (2008): Fluorescence Imaging Applied to Tracer Distributions in Variably saturated Fractured Clayed Till. *Journal of Environmental Quality* 37, 448-458

Rosenbom, A.E, Kjær, J, Henriksen, T, Ullum, M, Olsen, P (2009). Ability of the MACRO Model to Predict Long-Term Leaching of Metribuzin and Diketometribuzin. *Environ.Sci.Technol.* 43, 3221-3226.

Ryan, J.N., Illangasekare, T.H., Litaor, M.I. & Shannon, R. (1998): Particle and Plutonium Mobilization in Macroporous Soils during Rainfall Simulations. *Environ.Sci.Technol.* 32, 476-482

SAFIR (2009a): D3_2 Final version and documented models available. Part of project "Safe and High Quality Food Production using Low Quality

Waters and Improved Irrigation Systems and Management” co-funded by the European Commission within the Sixth Framework Programme. URL: <http://www.safir4eu.org/Lib/SAFIR/Deliverable/D3_2.pdf>.

SAFIR (2009b): D7_1&2 decision support system for irrigation with low quality water: system, underlying models, and tests. Part of project “Safe and High Quality Food Production using Low Quality Waters and Improved Irrigation Systems and Management” co-funded by the European Commission within the Sixth Framework Programme. URL: <http://www.safir4eu.org/Lib/SAFIR/Deliverable/D7_1_D7_2.pdf>.

Schaetzl, R.J. & Anderson, S. (2005): Soils. Genesis and Geomorphology. Cambridge University Press, Cambridge, England.

Schelde, K., Moldrup, P., Jacobsen, O.H., de Jonge, H., de Jonge, L.W. & Komatsu, Toshiko. (2002): Diffusion-Limited Mobilization and Transport of natural Colloids in Macroporous Soil. *Vadose Zone Journal* 1, 125-136.

Shipitalo, M.J. & Gibbs, F. (2000): Potential of Earthworm Burrows to Transmit Injected Animal Wastes to Tile Drains. *Soil Science Society of America Journal* 64: 2103-2109.

Simunek J, Sejna M and van Genuchten MTh, (1999). The HYDRUS-2D Software Package for Simulating Two-dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably Saturated Media. Version 2.0, IGWMC-TPS-53. International Ground Water Modeling Center, Colorado School of Mines, Golden, CO, 251 pp.

Stamm, C., Sermet, R., Leuenberger, J., Wunderli, H., Wydler, H., Flühler, H. og Gehre, M. (2002). Multiple tracing of fast solute transport in a drained grassland. *Geoderma* 109, 245-268.

Styczen, M., Petersen, S., Kristensen, M., Jessen, O. Z., Rasmussen, D., Andersen, M. B., Sørensen, P. B. (2004) Calibration of Models Describing Pesticide Fate and Transport in Lillebæk and Odder Bæk Catchment. Pesticide Research No. 62. ISBN no. 87-7614-274-4.

Therrien R, McLaren RG, Sudicky EA and Panday SM, (2006). *Hydrosphere A Three-dimensional Numerical Model Describing Fully integrated Subsurface and Surface Flow and Solute Transport: User Manual*, Groundwater simulation group, Université Laval, p. 275

Tofteng, Ch., Hansen, S., and Jensen, H.E. (2002). Film and Pulse Flow in Artificial Macropores. *Nordic Hydrology* 33 (43) 263-274

Ullum, M. (2001): Effects of Water Content and Soil Structure on Colloid Transport in Porous Media. Series Paper 78. Department of Hydrodynamics and Water Resources (ISVA), Technical University of Denmark, Lyngby.

Uusitalo, R., Turtola, E., Kauppila, T., & Lilja, T. (2001): Particulate Phosphorus and Sediment in Surface Runoff and Drainflow from Clayey Soils. *J. Env. Qual.* 30: 589-595.

van Genuchten, M.Th. (1980). A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America Journal* 44 (5): 892-898.

van Genuchten, M. T. og Alvesm W.-J. (1982). Analytical solutions of the one-dimensional convective-dispersive solute transport equation. United States Department of Agriculture.

van Genuchten, M.Th.; F.J. Leij and S.R. Yates (1992). The RETC code for quantifying the hydraulic functions of unsaturated soils. Project summary, EPA'S Robert S. Kerr Environmental Research Lab., Ada ,OK, USA.

Villholth, K.G., Jensen, K.H. & Fredericia, J. (1998): Flow and transport processes in a macroporous subsurface-drained glacial till soil –I: Field investigations. *Journal of Hydrology*. 207 (1-2), 98-120.

Resumé

Daisy2D simulerer pesticiders skæbne i landbrugsjord med markdræn. Den bygger på en eksisterende jord-plante-atmosfære system model (Daisy). Pesticiddelen omfatter transport, nedbrydning og sorption. Transport sker i opløst form samt som kolloidfaciliteret transport. Transportveje er: 1) jordmatrix, 2) sprækkesystem, og 3) bioporer. Vigtige er store bioporer, der ender i eller ved markdræn. Nedbrydning afhænger af jordfugtighed, temperatur, dybde og/eller biologisk aktivitet. Sorptionsbeskrivelserne inkluderer sorptionskinetik. Daisy2D er succesfuldt testet mod eksperimentelle data og er succesfuldt koblet til MIKE-SHE modellen for beregning af pesticiders skæbne i oplandsskala.



Miljøministeriet
Miljøstyrelsen

Strandgade 29
DK - 1401 København K
Tlf.: (+45) 72 54 40 00

www.mst.dk