

ATV møde 10.05.22

Non target analyser anvendt i TUP-projekt

Udvidelse af værktøj til vurdering af pesticidsårbarhed med non-target screening analyse

Miljøstyrelsens Teknologiuudviklingspulje (TUP)

‘TUP Projekt: Anvendelse af non-target analyser til sårbarhedsforudsigelser’

v. Eva Birch Karlsen, COWI

Udvidelse af værktøj til vurdering af pesticidsårbarhed med non-target screening analyse

Projektplanlægning under Miljøstyrelsens Teknologiuudviklingspulje, 1. maj 2021.

Problem

Fund af pesticider i grundvandet har de seneste år givet store udfordringer for vandforsyningerne. Funderne kan lide at tilbageføre forurening og lukning af vandforsyningsskibe. I etableret bruges traditionelle måleanalyser til at finde pesticider, men de til dato kendte metoder eller ikke monteret pesticider kan være til stede i grundvandet og forblive ubemærket. Vi har foreslået udviklet non-target screening analyse (NTS) og med denne detektere tilstedeværelsen af stoffer (grundvandsprøver). Men med de nuværende og bedre værktøjer er det svært at sige hvilke af de mange stoffer er pesticider. I denne opgave gør de store NTS-databaser det meget besværligt at sammenligne de mange stoffer på tværs af grundvandsprøver til eksempelvis skillevandsskærm.

Målsætning

Denne TUP projekt vil hjælpe Regioner og myndigheder til at fremme grundvandsprøvet og forbedre forståelsen af forureningsprædning, forureningskomponenter og risikovurdering.

Formål

Projektet vil som det første sigte mod at sammenstille avanceret NTS data og pesticidforureningsmodeller som GIS-lag. Vi vil sammenstille COWI's nye skærm til risikovurdering af pesticidforurening i grundvandet og NTS grundvandsdata.

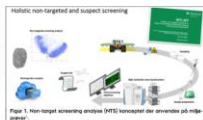
Baggrund

COWI har udviklet et nyt værktøj, som skal gøre det muligt at planlægge fremtidig vandforurening så vi undgår pesticider i vores skærm. Via Machine Learning har COWI udviklet en algoritme, som kan forudsige risikoen for, at der findes pesticider eller nedbrytningsprodukter i grundvandet i et givent punkt.

Algoritmen anvender offentlige miljødata (f.eks. den Nationale forureningsdatabase, Apnet), som beskriver jord- og grundvandsforhold. Derudover anvendes data for pesticider og nedbrytningsprodukter, generelt grundvandskemi og hydrologiske parametre. Disse data kan sammenknyttes med andre betydende faktorer, som f.eks. nedbør, jordbundsfugt og forurening af overfladevand. Data bliver sammenstillet til en række bevægende parametre, som indgår i den endelige model. De beskrevne parametre er mere udvalgt for at give det bedste mulige grundlag til det endelige værktøj. Værktøjet består af et GIS-lag for hvert grundvandsmagasin, der viser risikoen for fund af pesticid i hvert punkt.

Non-target screening analyse (NTS) er et holistisk koncept som hovedsageligt (P. Hansen, Aarhus Universitet) har udviklet og arbejder med de senere år og laboratoriet ved Aarhus Universitet har tem forskellige

højt opløselige masspektrometri NTS-platforme til rådighed til nærværende projekt (Figur 1). Disse er gas, væske og ion ionomografiske teknologier til OMS-konceptet foruden masspektrometri og observerer et bredt kemisk rum.



Et indledende samarbejde mellem Region Sjælland og Aarhus Universitet har genereret et unikt NTS dataset på grundvandsprøver fra 18 boringer ved området Hede-land der siden 1940'erne har været brugt til råstofudvin-ning og deponi (Figur 2). Samarbejdet med NTS analyser, så har Region Sjælland også fået lavet 'den store analyse pakke' på alle prøverne, dvs. inklusive 233 pesticider og metabolitter, 20 lægemidler, 30 chemoerende og polære opløsningsmidler, 15 BTEX og kulbrinter, bisphenol A, 12 PFAS, 19 uorganiske stoffer og 15 restor parametre.



Figur 2: Oversigtskort af Hede-land over Roskilde. Overblik over ca. 3 x 3 km. Røde punkter indikerer grundvandsprøvet og de enkelte boringer (Region Sjælland).

Introduktion til TUP-projektet

- Aarhus Universitet og COWI har i samarbejde ansøgt og fået tildelt midler fra TUP-puljen.
- Projektets tidsramme: september 2021 til juni 2022.

Projektets formål

I projektet sammenstilles NTS analysedata og alm. analyseresultater med GIS-lag for Pesticidsårbarhed.

Fase 1

Sammenstilling af analyseresultater fra Hedelandområdet (V2 kortlagt) og pesticidesårbarhedsværktøj

Fase 2

Sammenstilling af analyser fra GRUMO boringer, NTS og pesticidesårbarhedsværktøj

Værktøj til vurdering af grundvandets pesticidesårbarhed

Machine learning værktøj

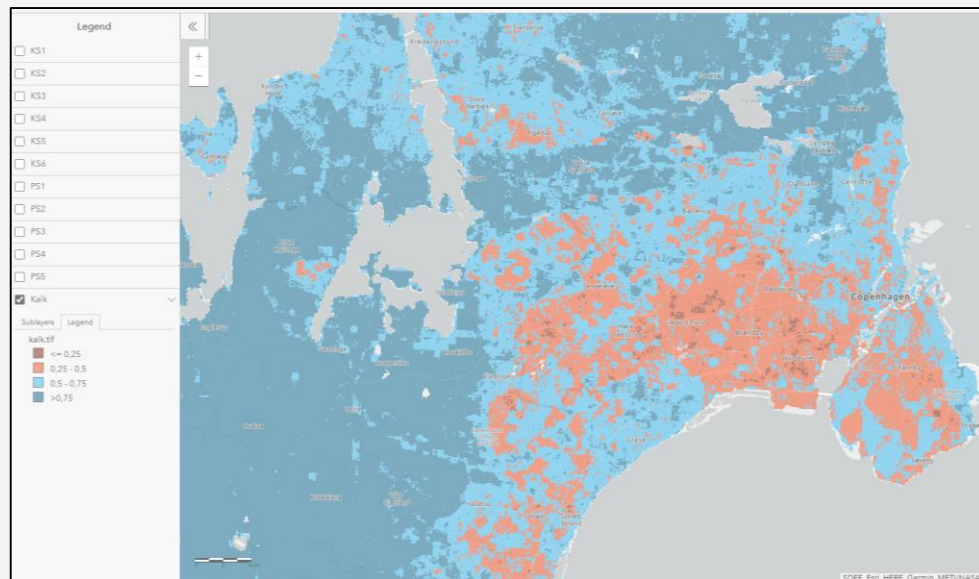
Ved brug af machine learning har COWI udviklet en algoritme, som skal forudsige risikoen for at finde pesticider og nedbrydningsprodukter i grundvandet, i et givent punkt.

Til udvikling af værktøjet er brugt en lang række miljødata vedr. jord- og grundvandsforhold.

(nedbør, jordbund, geologi, arealanvendelse, redoxforhold, dybde til grundvandsmagasin, grundvandsdannelse, magasintype, mv.)

Analyseresultater fra Jupiter er anvendt.

[Værktøj til vurdering af grundvandets pesticidesårbarhed \(cowi.com\)](https://cowi.com)

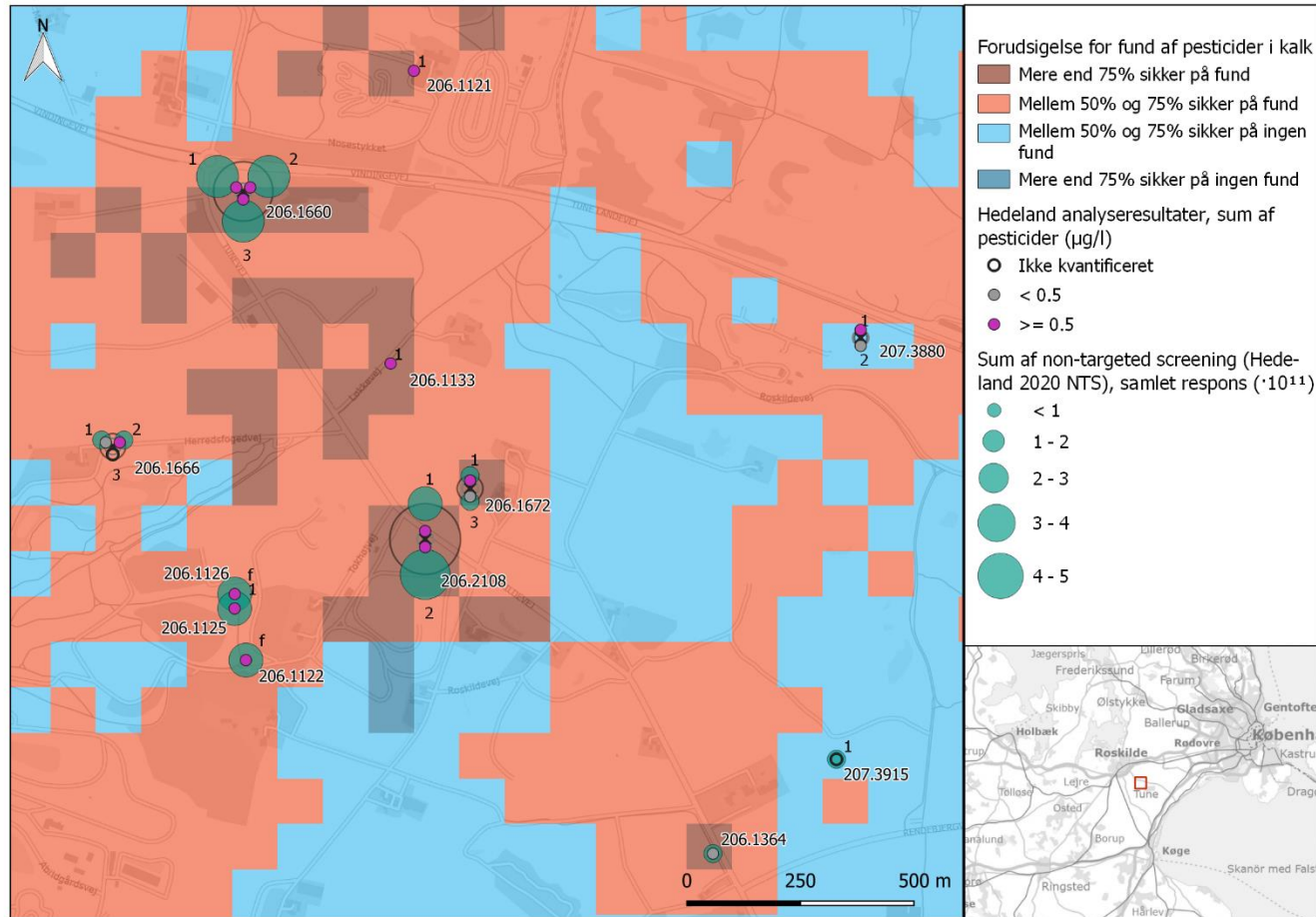


Fase 1 - Hedeland

Fase 1: Sammenstilling af

- › Region Sjællands analyser udtaget i udvalgte boringer i Hedeland området (V2 lokalitet)
- › Non-target analyser i Hedeland området i samme boringer
- › COWI værktøj til forudsigelse af pesticidsårbarhed

Fase 1: Hedeland analyser



Fase 2 – Analyser fra GRUMO boringer

Fase 2: Sammenstilling af:

- › 11 nye non-target analyser udtaget i GRUMO boringer i ultimo 2021
- › GRUMO analyser (alm. overvågningsprogram og massescreening)
- › COWI værktøj til forudsigelse af pesticidesårbarhed

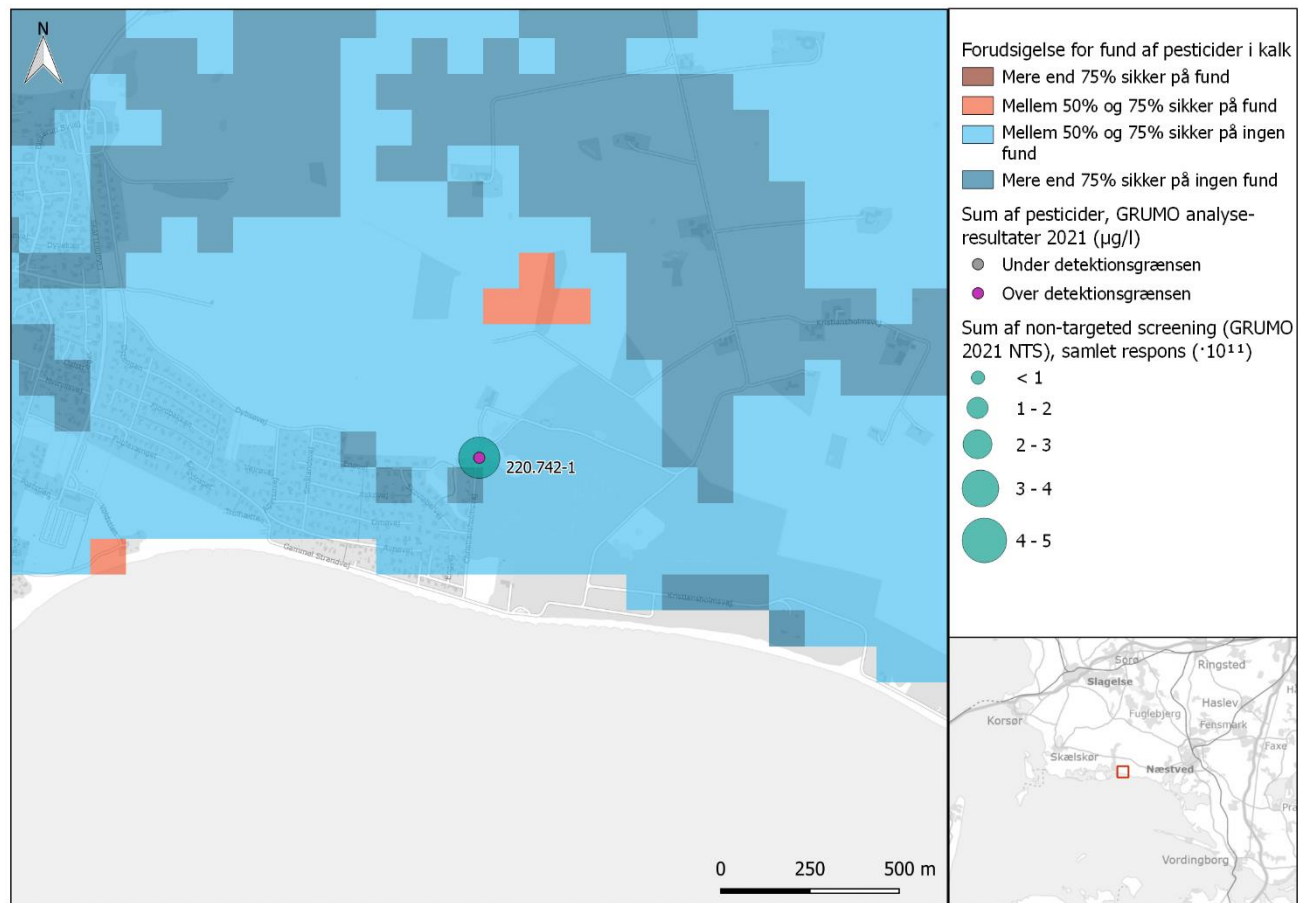
Fase 2: analyser fra GRUMO boringer



Fase 2: analyser fra GRUMO boringer



Fase 2: analyser fra GRUMO boringer



Foreløbige konklusioner og perspektiver for projektet

Projektet er ikke afsluttet endnu, og alle datasammenstillinger er ikke foretaget.

Sammenstilling af fund fra NTS og alm. analyser (Fase 1 og 2)

- Hedeland: Vi ser nogen overensstemmelse ved sammenstilling af Hedeland analyser og NTS analyser. Der er sammenfald mellem fund i NTS og fund i alm. analyser.
- NTS respons kan være både pesticider/nedbrydningsprodukter og andre stoffer.
- GRUMO: Vi ser ligeledes sammenfald mellem NTS og GRUMO fund.
- Filtrering af data nødvendig

Foreløbige konklusioner og perspektiver for projektet

Sammenstilling af analyser og værktøj til pesticidesårbarheds-forudsigelse

Analysedata er endvidere vist sammen med GIS-lag for pesticidesårbarhedsværktøjet (røde/blå områder).

Hedelandområdet:

Der er overvejende sammenfald mellem fund i analyser og 'røde områder', hvor modellen forudsiger mere end 50 % risiko for fund.

GRUMO boringer:

Ligeledes nogen sammenfald i hhv. 'røde' og 'blå' områder. GRUMO analyseresultater kan benyttes til at træne modellen?

Perspektiver – NTS analyser til at forbedre forudsigelse for fund af pesticider?

- NTS analyseresultater fra fase 1 og 2, i sin nuværende form, kan ikke bruges til træning af modellen.
- Kan vi på længere sigt bruge NTS analyser til optimering af værktøjet, og hvad kræver det?
- Filtrering af NTS resultater samt konkret viden om hvilket stof der er fundet, og i hvilken koncentration.
- IT-teknisk viden om datainput til træning af model.
- Endnu bedre identifikation af stoffer ud fra NTS bibliotek
- Filtrere de NTS fund fra som ikke er pesticid/nedbrydningsprodukt

Spørgsmål?
Tak for opmærksomhed!