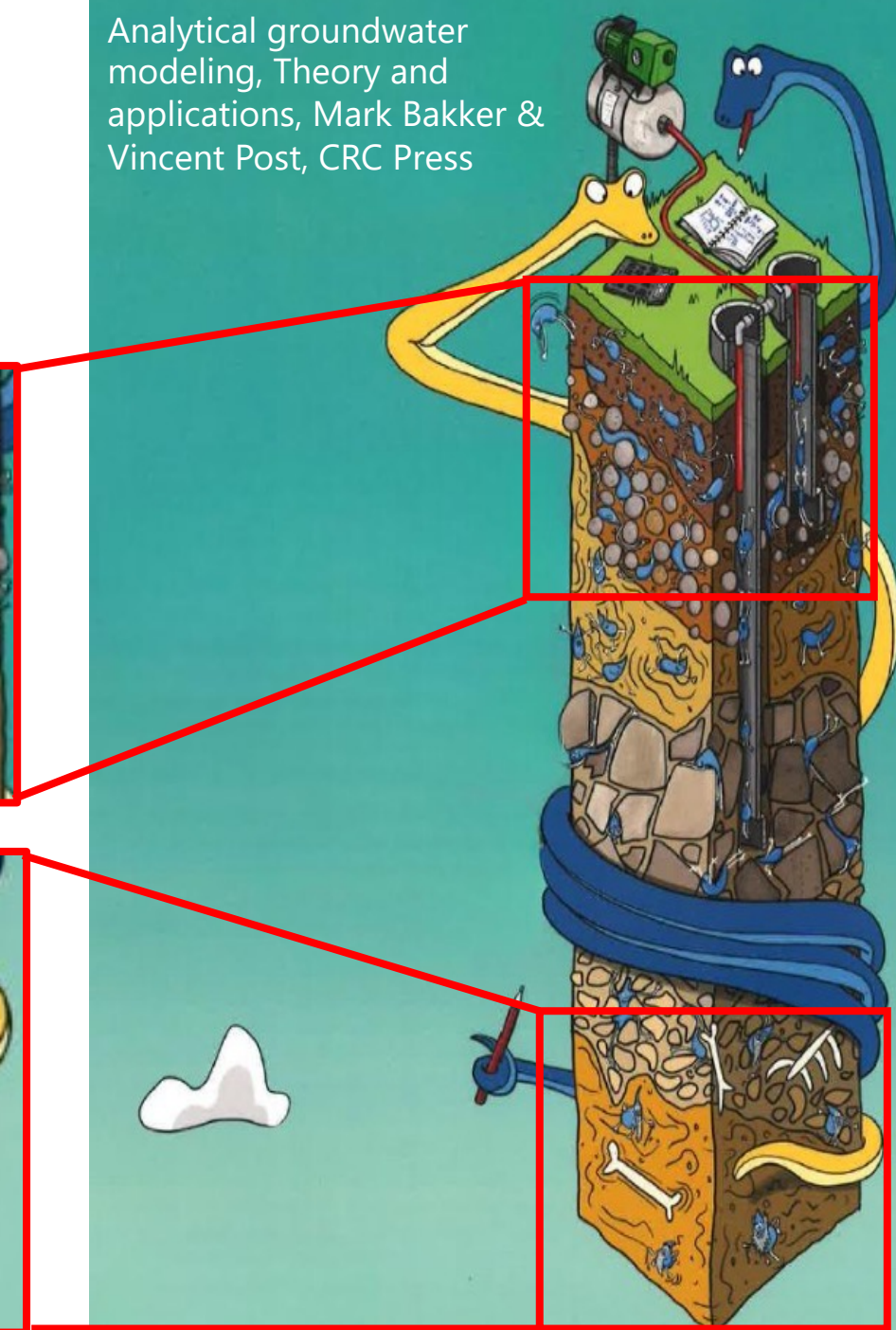
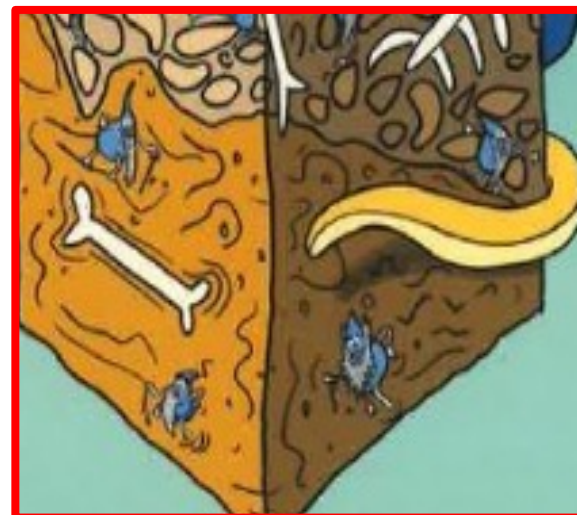


Anvendelse af grundvandskemiske data I kalibrering/validering af grundvandsmodeller

ATV Jord og Grundvand

7/2-2024

Troels Norvin Vilhelmsen
Thomas Wernberg
Tina Erenskjold Moeslund



Indhold

1. Beregning af "alder" i grundvandsmodeller
2. Anvendelse af grundvandskemiskedata i analyse af modelresultater
3. Anvendelse grundvandskemiske data i modelkalibrering
4. Andre udfordringer
5. Opsummering



Beregning af alder I grundvandsmodeller

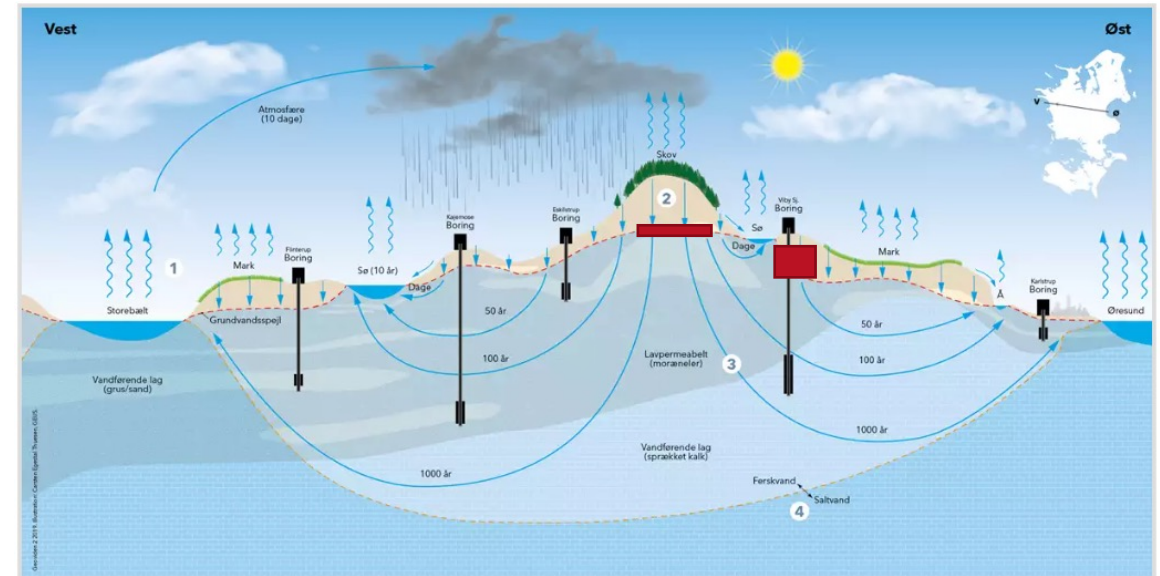
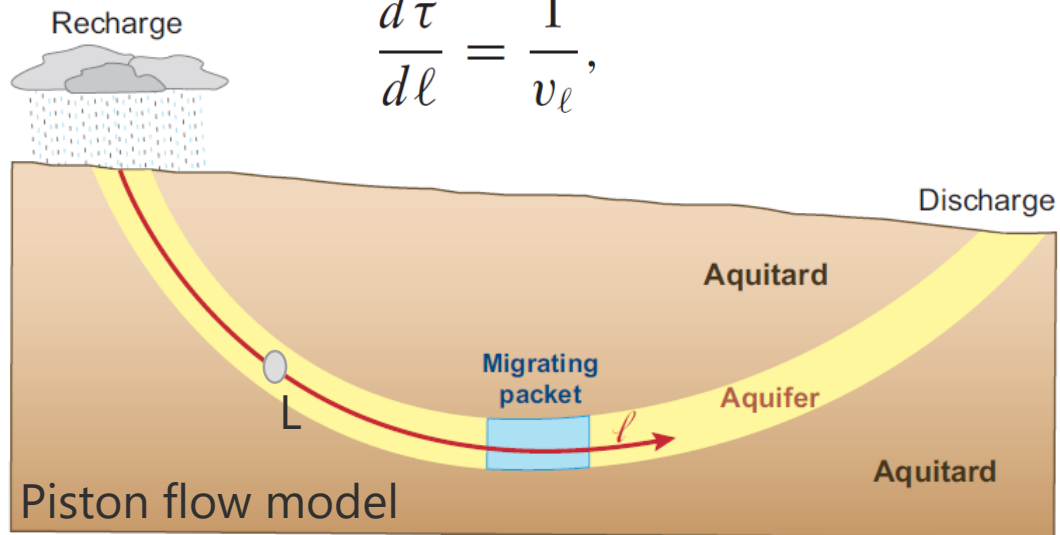
Partikel tracking

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) - W = S_s \frac{\partial h}{\partial t}$$

$$q_{xx} \rightarrow v_{xx} = \frac{q_{xx}}{n_{eff}}$$

Darcy's lov

$$\frac{d\tau}{d\ell} = \frac{1}{v_\ell}$$



$$\tau(L) = \int_0^L \frac{d\ell}{v_\ell} = \frac{L}{\bar{v}_\ell}$$

Beregning af alder I grundvandsmodeller

Partikel tracking - massebalance

$$\tau = \frac{\sum_{i=1}^n (\rho V \tau)_n}{\sum_{i=1}^n (\rho V)_n}$$

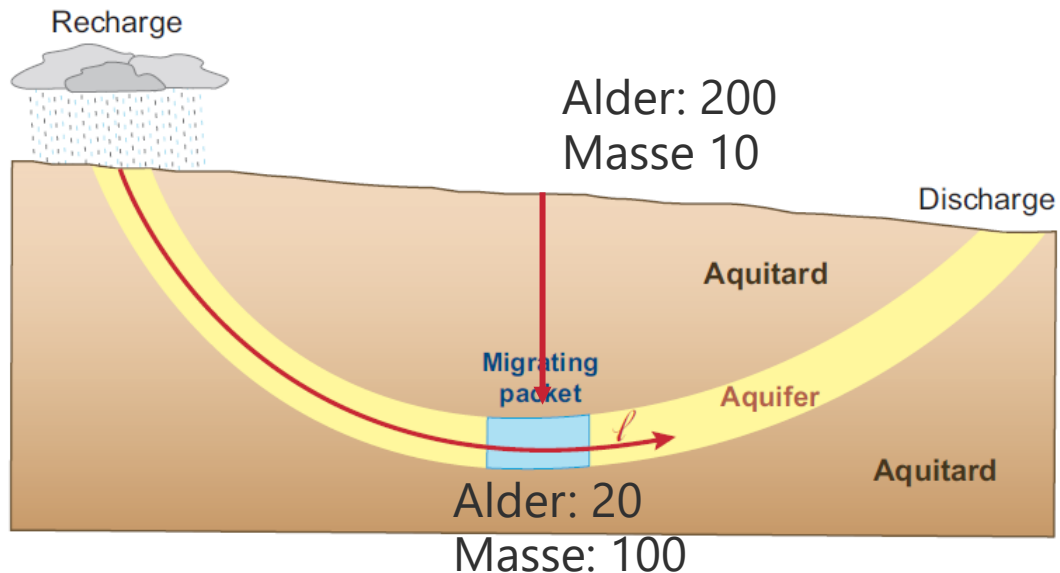
$$\tau = \frac{(\rho V \tau)_1 + (\rho V \tau)_2}{(\rho V)_1 + (\rho V)_2}$$

$(\rho V \tau)$ Produkt af masse og alder (mass age)

(ρV) masse

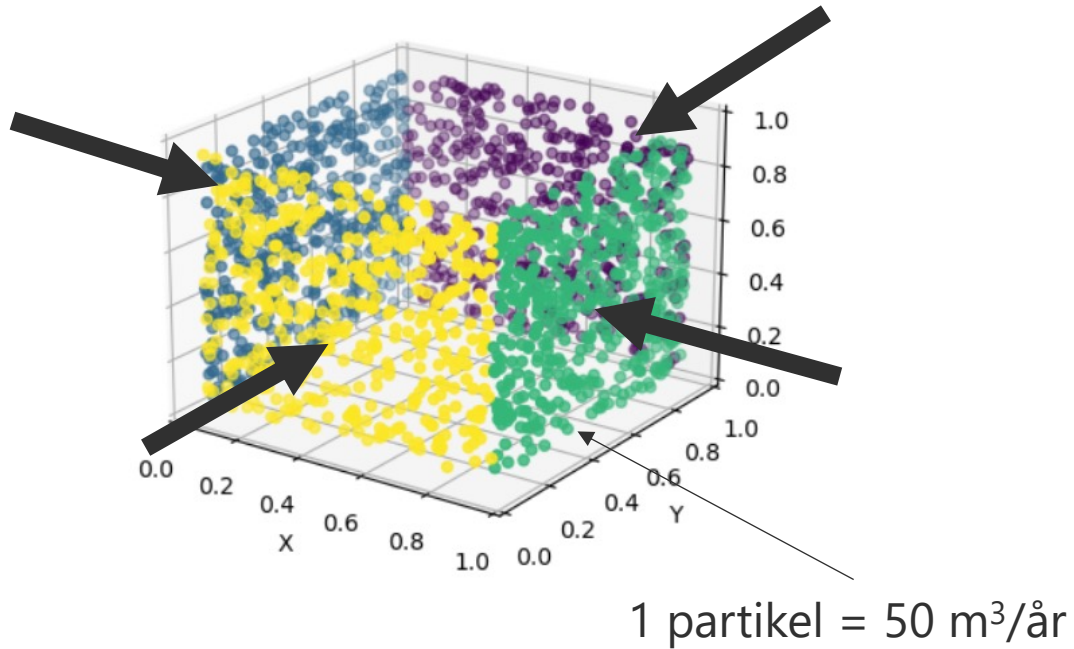
~~$$\tau = \frac{100 + 20}{2} = 60.0 \text{ år}$$~~

$$\tau = \frac{20 * 100 + 200 * 10}{100 + 10} = 36.37 \text{ år}$$



Beregning af alder I grundvandsmodeller

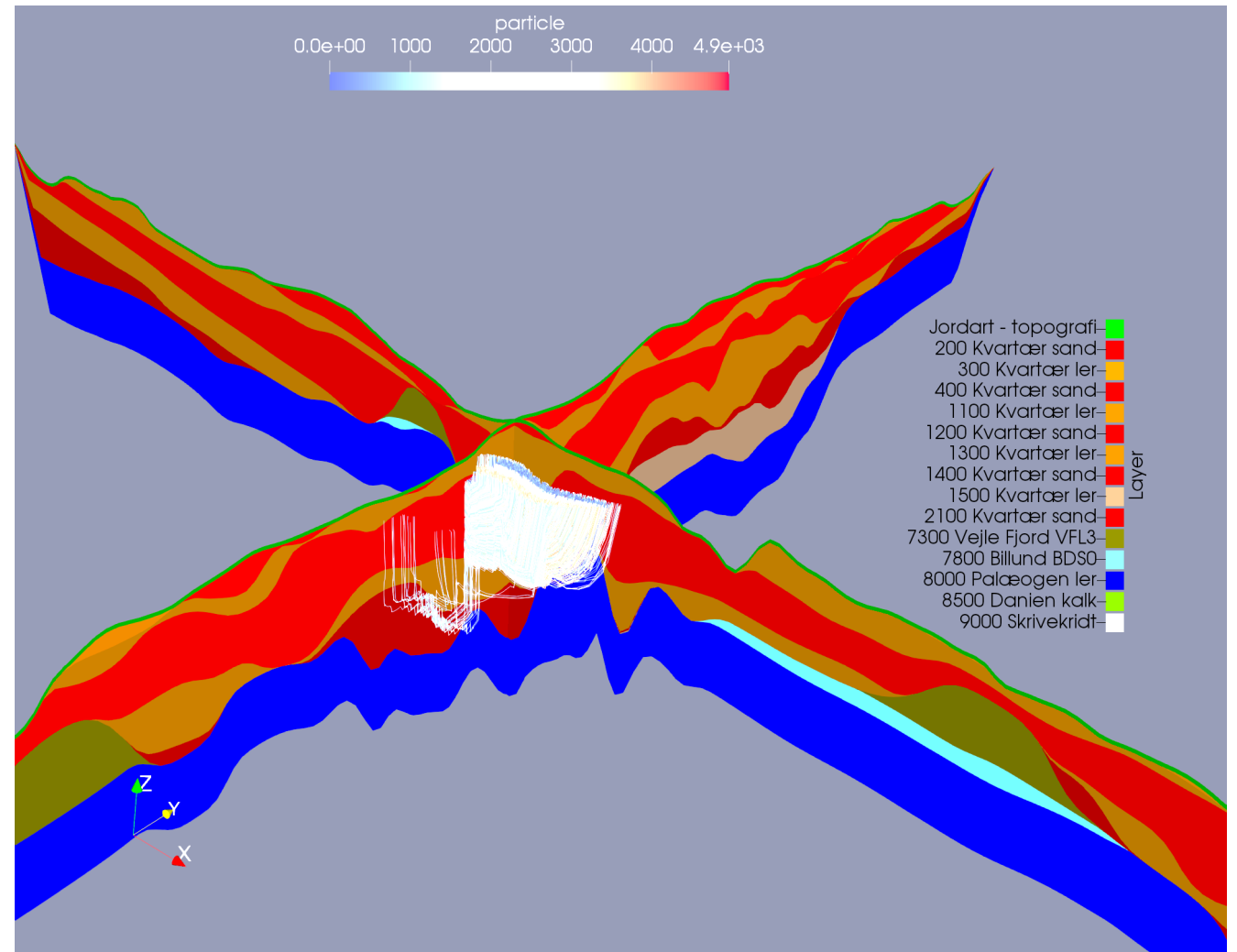
Partikel tracking - massebalance



Massebalance på celleniveau:

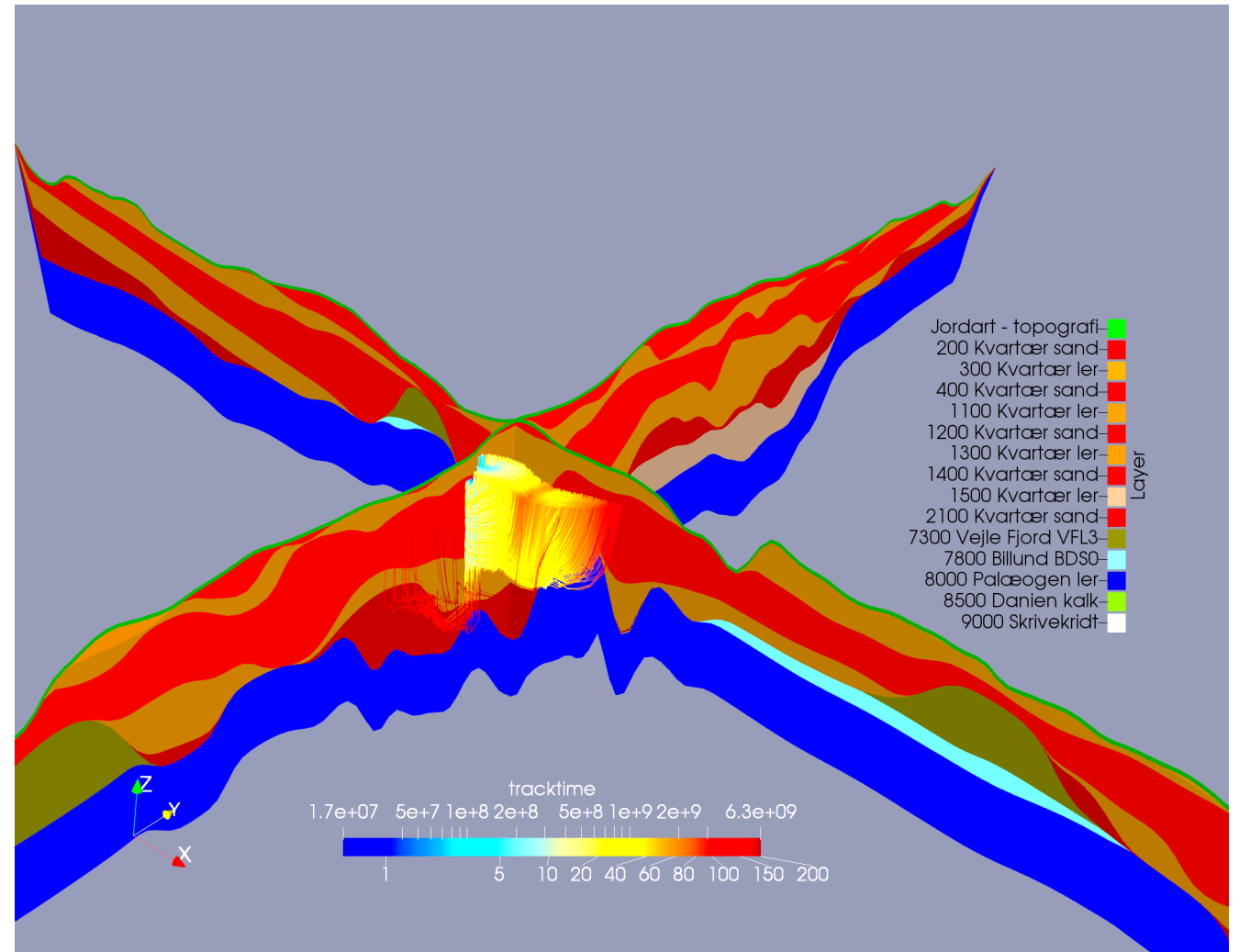
$$\sum Q_{flade} = Q_{well}$$

Partikler fordeles på baggrund af andelen af positivt flow på en given celleflade



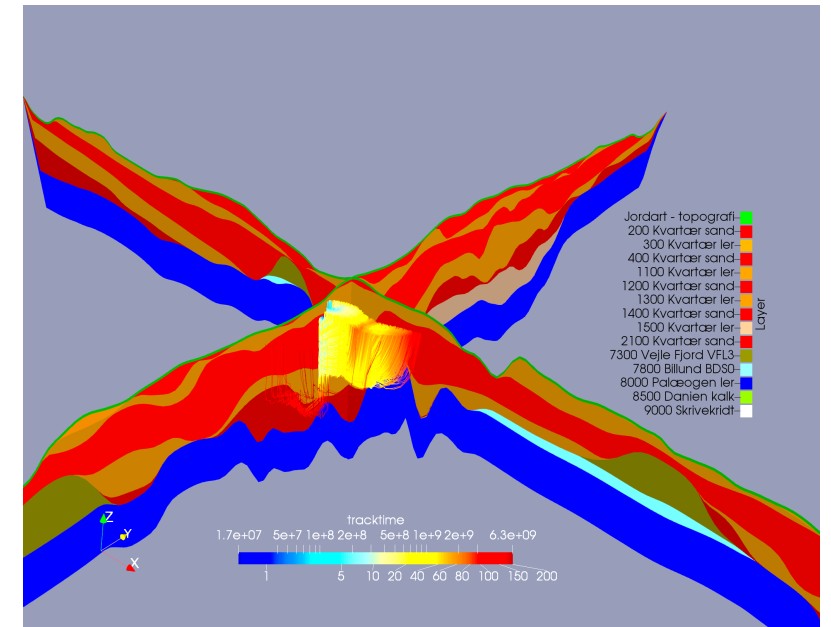
Beregning af alder i grundvandsmodeller

Partikel tracking - massebalance

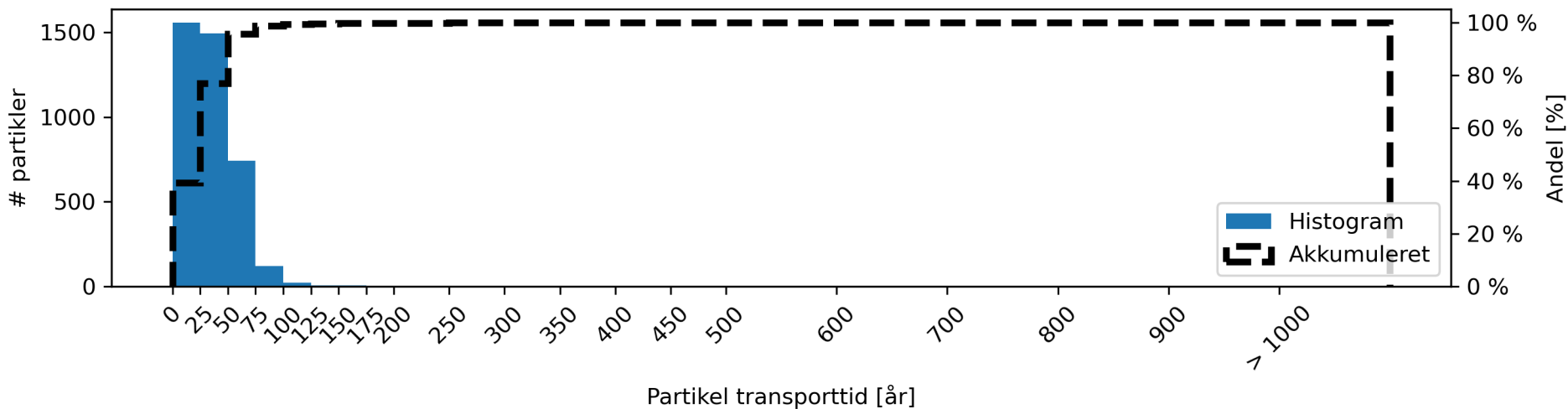


Beregning af alder I grundvandsmodeller

Partikel tracking - massebalance

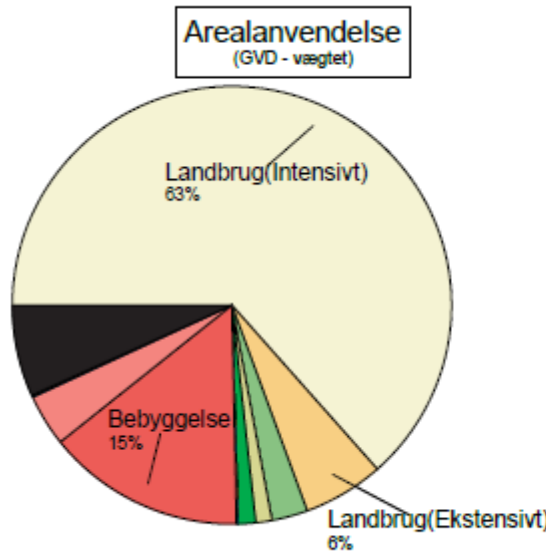
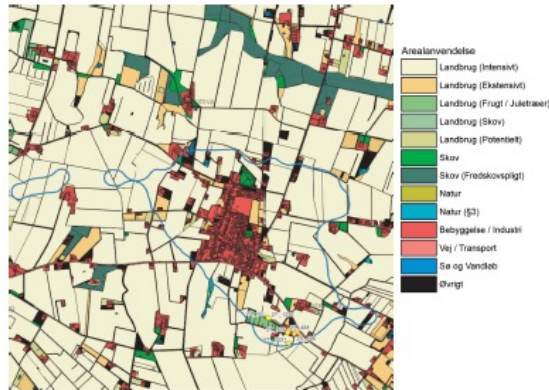


DGU 45. 1058



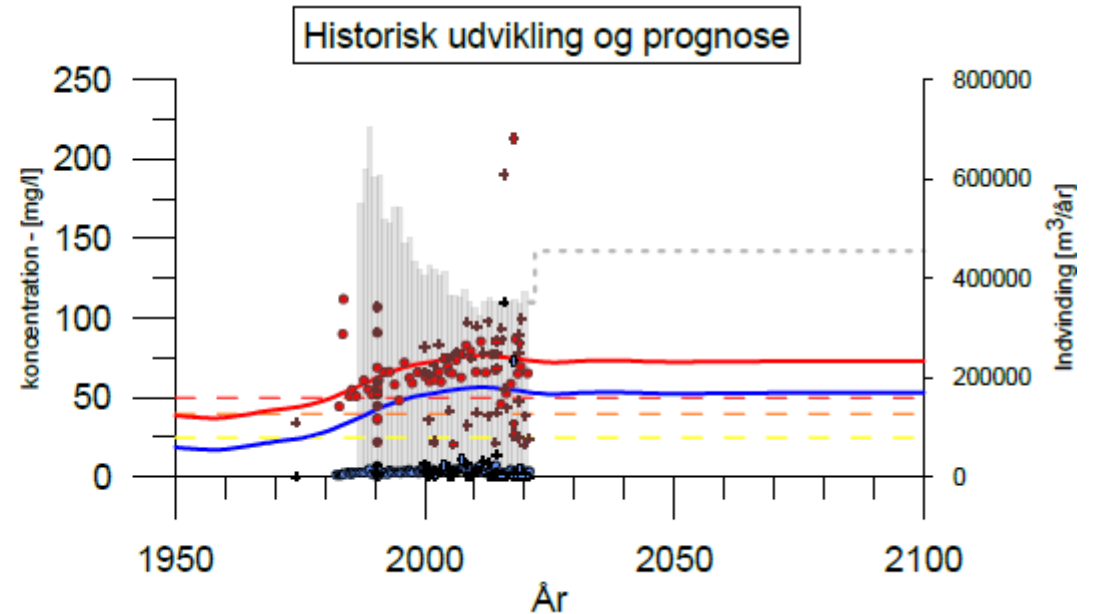
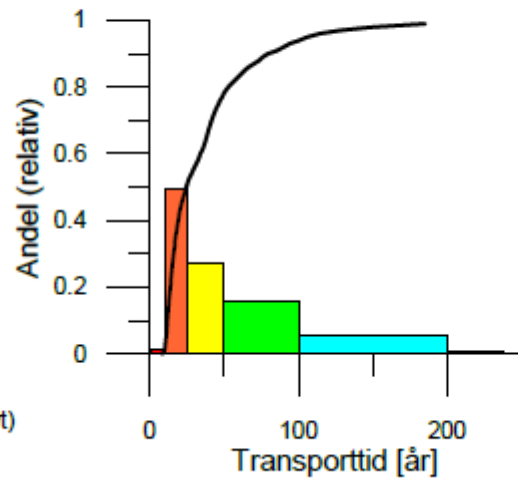
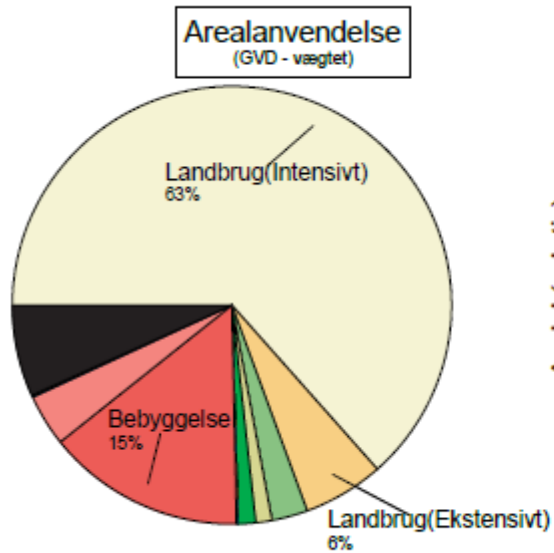
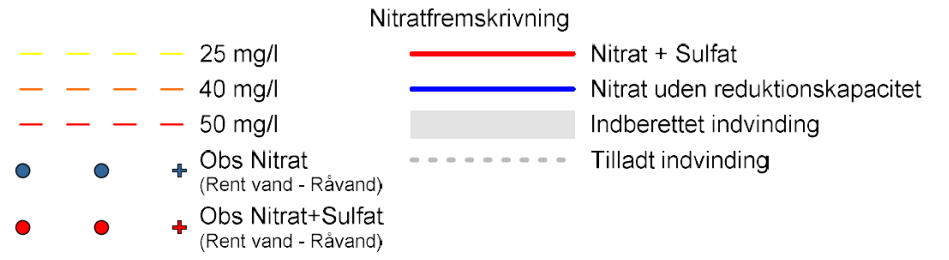
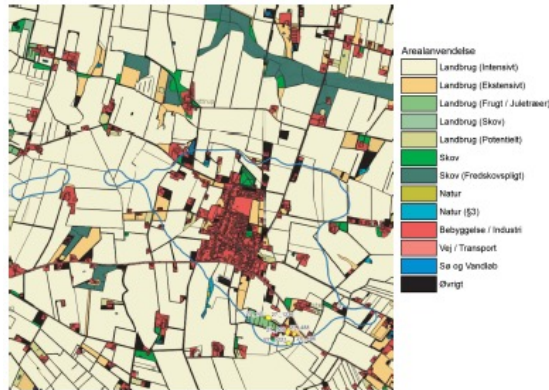
Beregning af alder I grundvandsmodeller

Partikel tracking – Nitrat prognoser



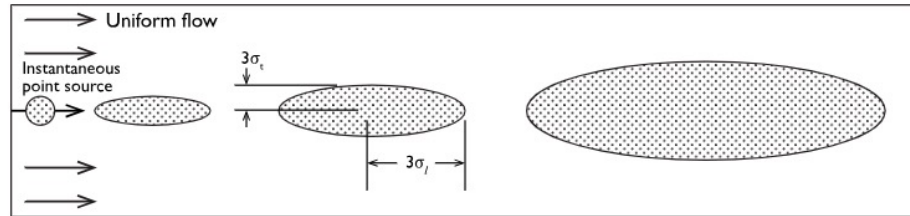
Beregning af alder I grundvandsmodeller

Partikel tracking – Nitrat prognoser

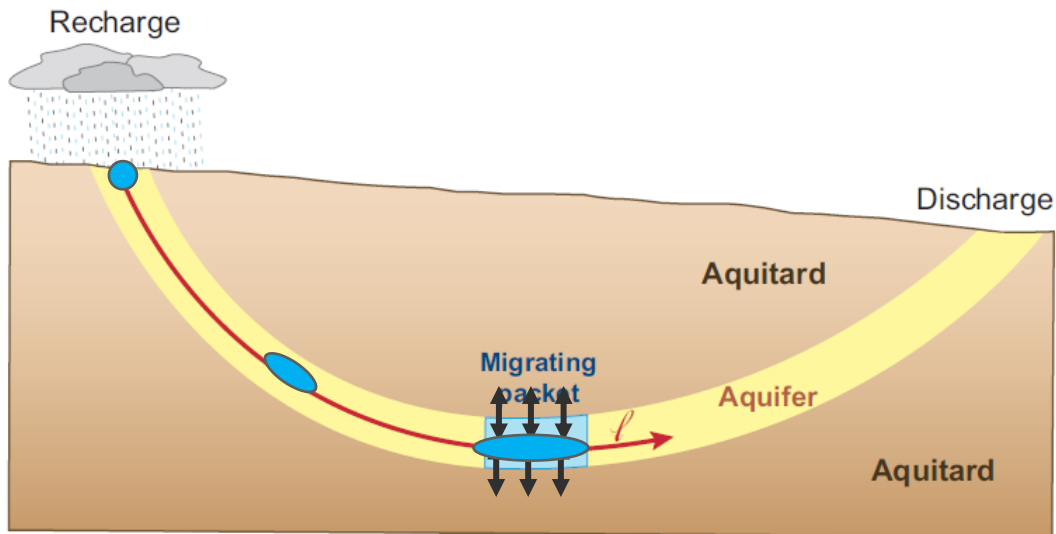
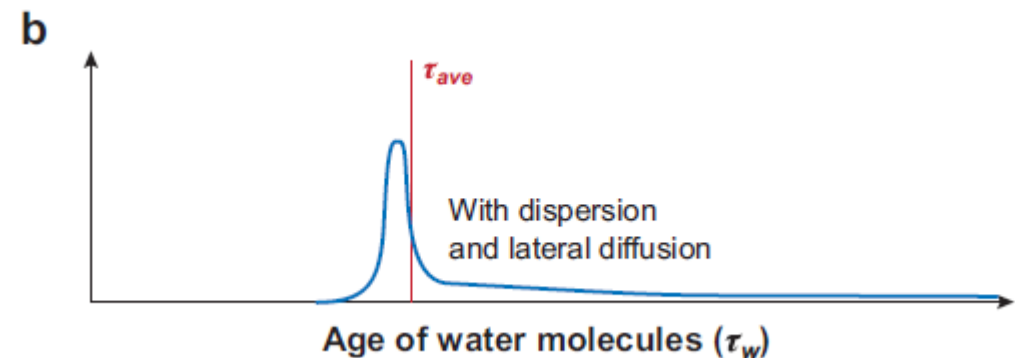
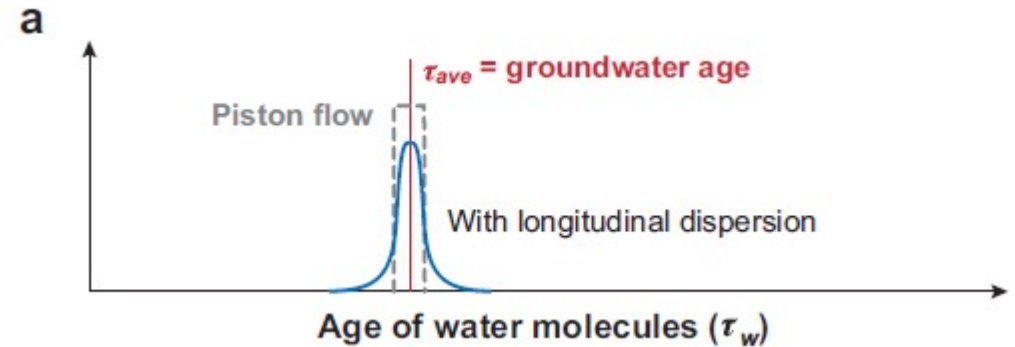


Beregning af alder i grundvandsmodeller

Alderskoncentration



(b)
Figure 9.5 Spreading of a tracer in a two-dimensional uniform flow field in an isotropic sand. (a) Continuous tracer feed with step-function initial condition; (b) instantaneous point source.



Beregning af alder I grundvandsmodeller

Alderskoncentration

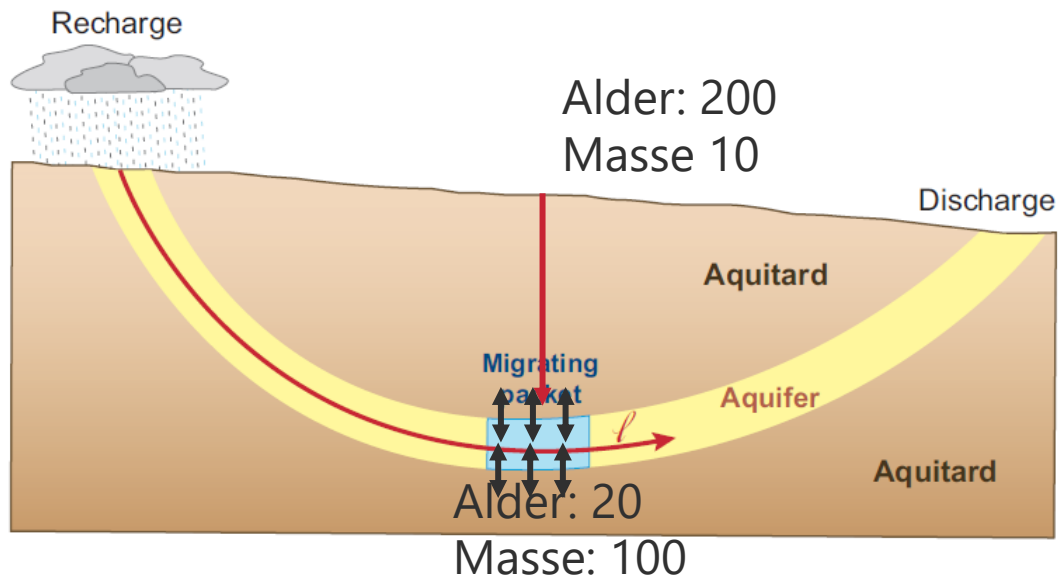
$$\tau = \frac{\sum_{i=1}^n (\rho V \tau)_n}{\sum_{i=1}^n (\rho V)_n}$$

$$\tau = \frac{(\rho V \tau)_1 + (\rho V \tau)_2}{(\rho V)_1 + (\rho V)_2}$$

$(\rho V \tau)$ Produkt af masse og alder (mass age)

(ρV) masse

$$\tau = \frac{20 * 100 + 200 * 10}{100 + 10} = 36.37 \text{ år}$$



$$\mathbf{J}^{\text{adv}} = \rho \mathbf{q} \tau = \rho \phi \mathbf{v} \tau.$$

$$\mathbf{J}^{\text{disp}} = -\rho \phi \mathbf{D} \cdot \nabla \tau,$$

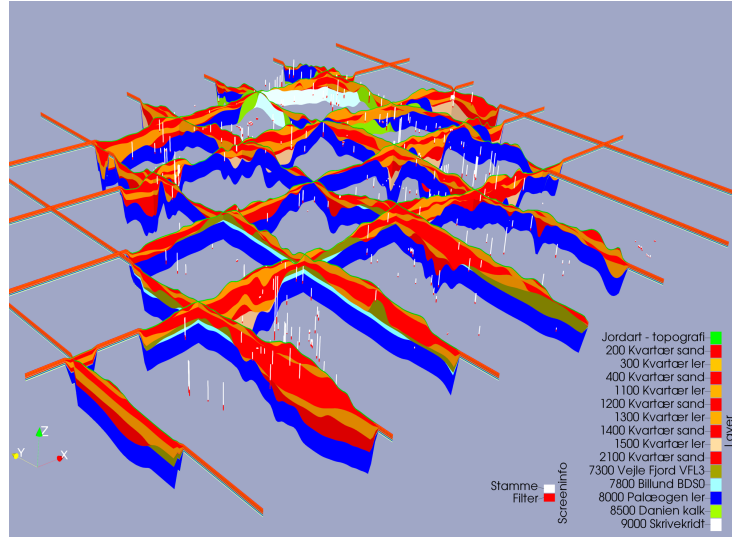
$$\frac{\partial \tau}{\partial t} = \nabla \cdot \mathbf{D} \cdot \nabla \tau - \nabla \cdot (\mathbf{v} \tau) + 1,$$

Kan løses med en stoftransportmodel (e.g. mt3d eller MODFLOW6 transport)

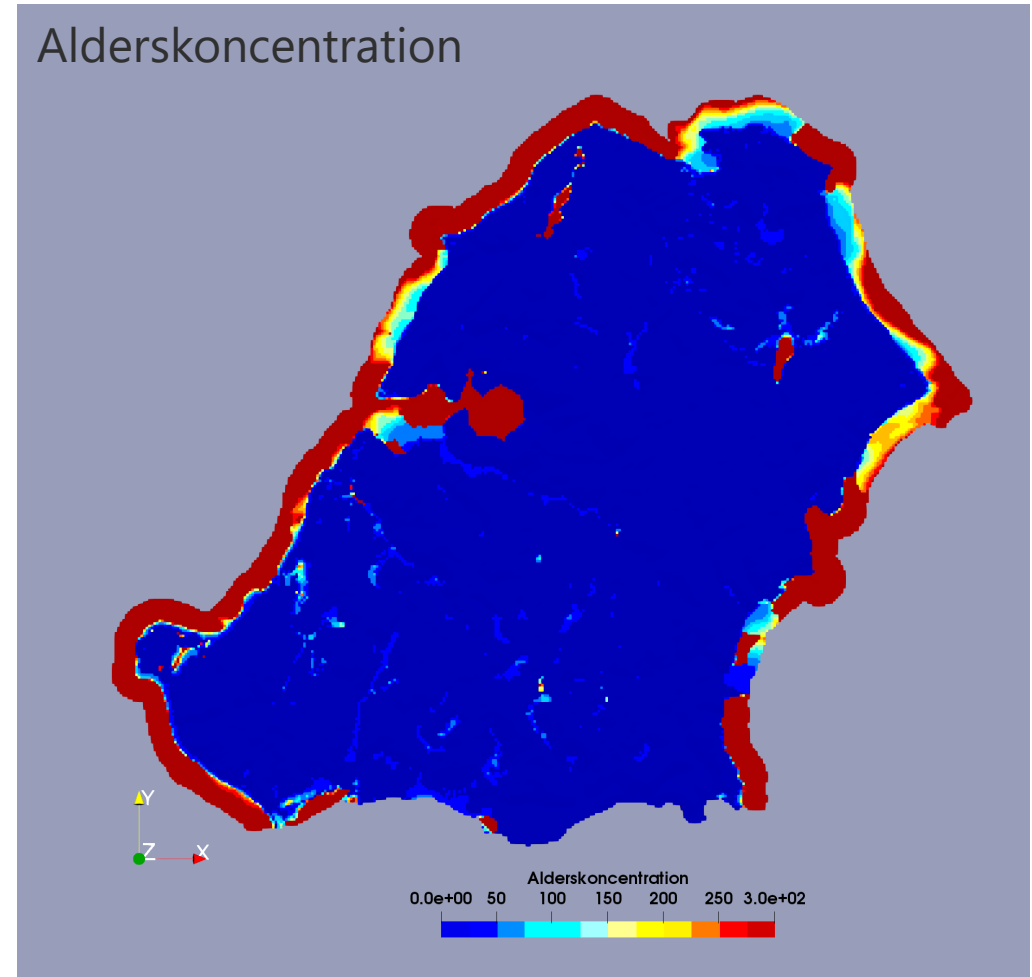
Eksempel fra Grundvandsmodellen for Salling (2023)



Modelopsætning Skærmkort - dæmpet
--- Modelafgrænsning



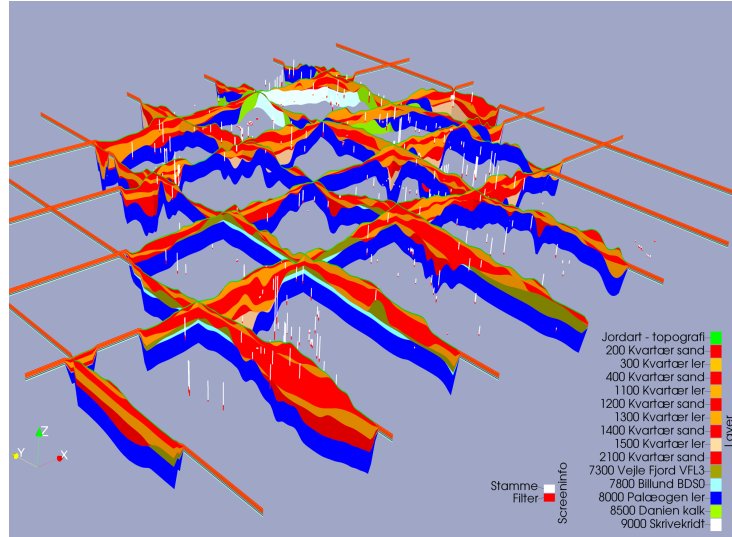
3D snit igennem modellens hydrostratigrafi sammenholdt med observationer med filtersætning



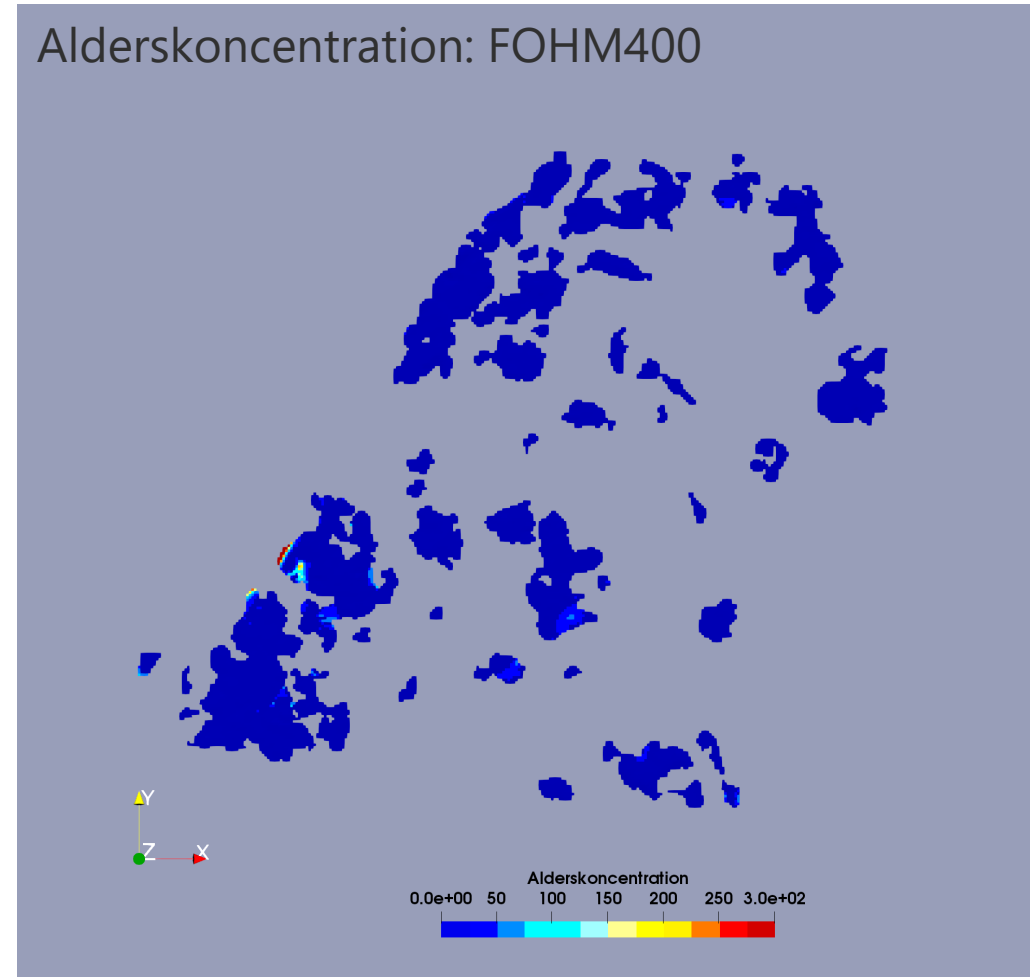
Eksempel fra Grundvandsmodellen for Salling (2023)



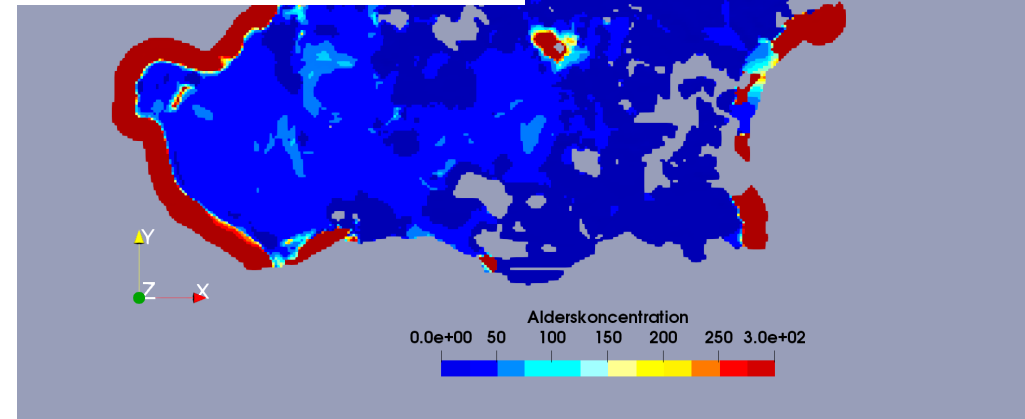
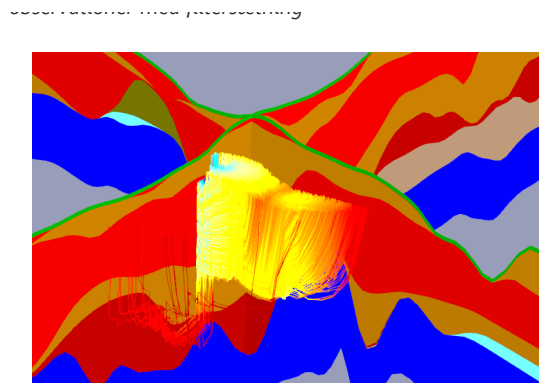
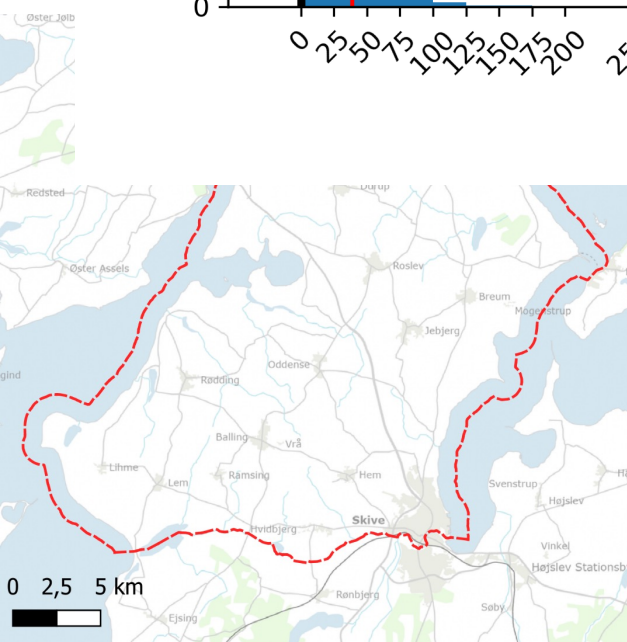
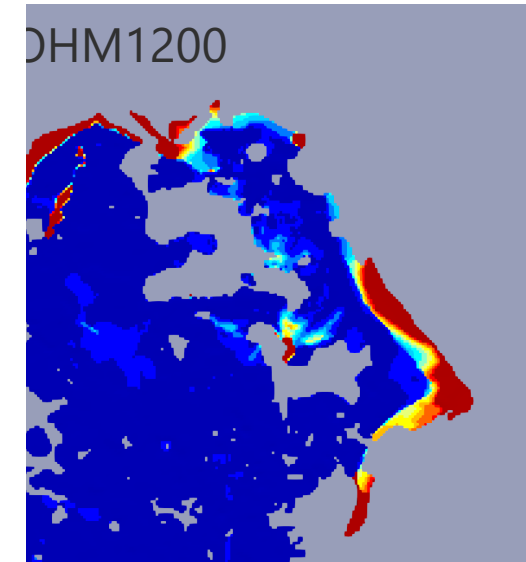
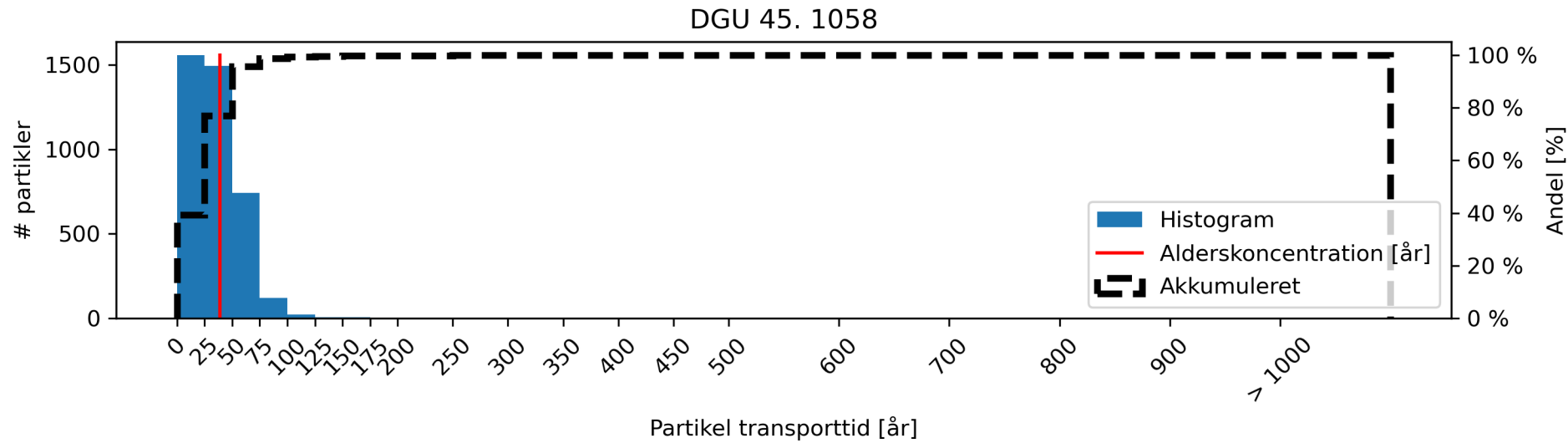
Modelopsætning Skærmkort - dæmpet
--- Modelafgrænsning



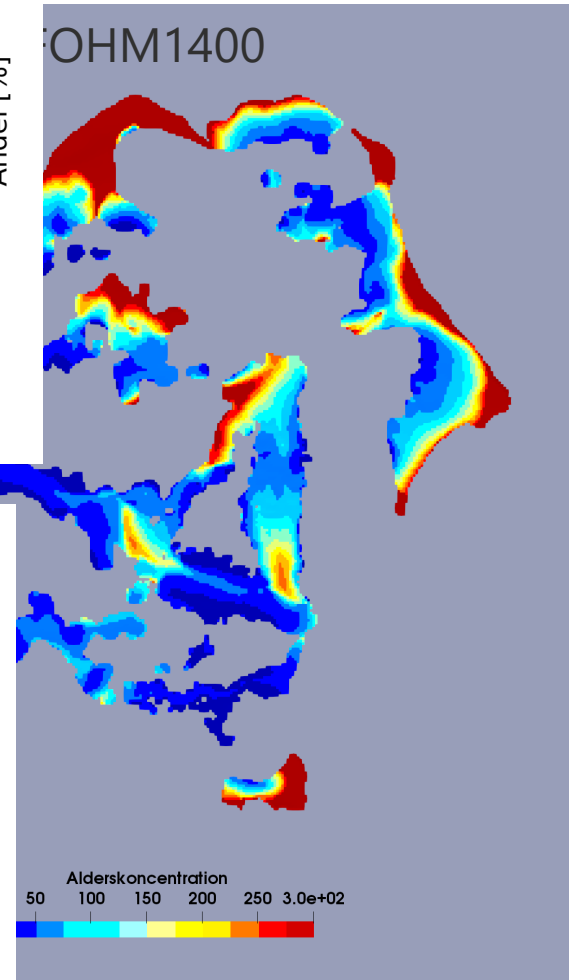
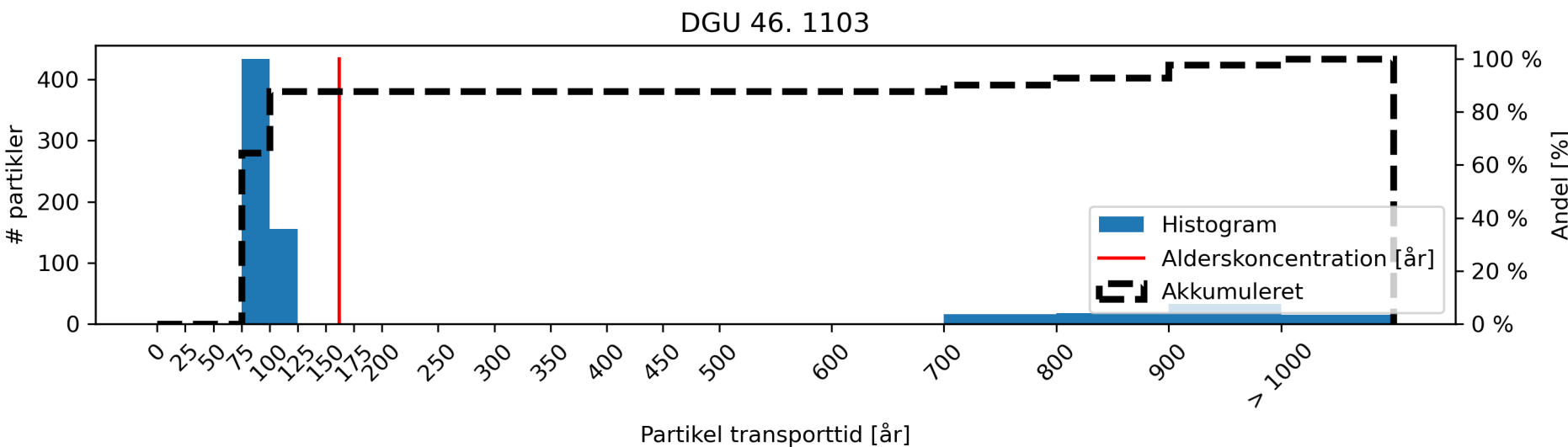
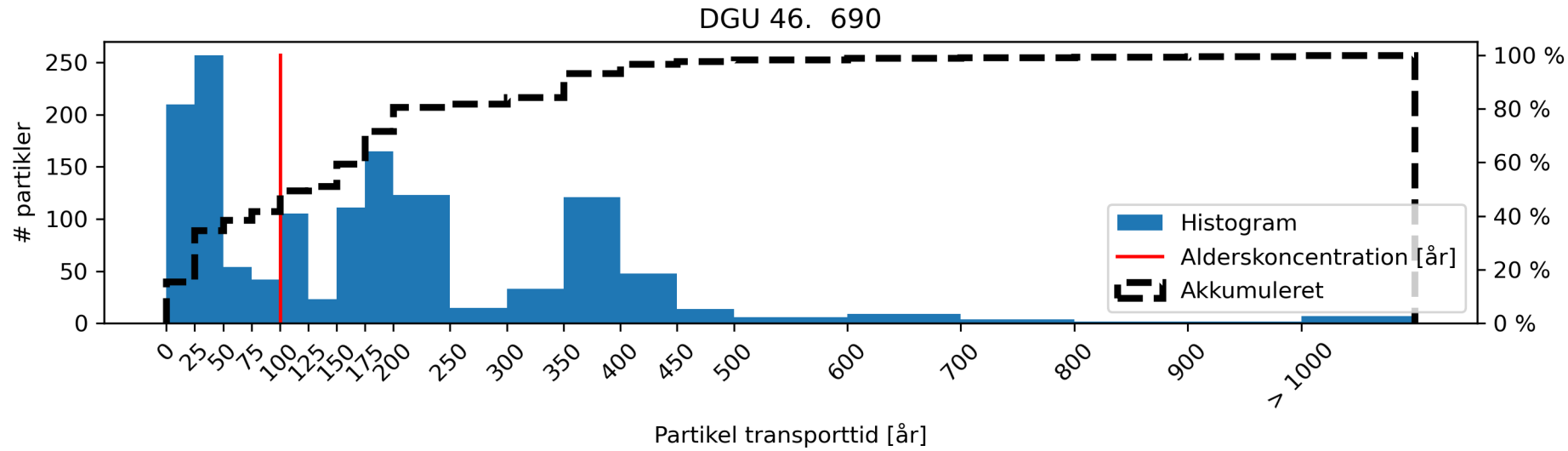
3D snit igennem modellens hydrostratigrafi sammenholdt med observationer med filtersætning



Eksempel fra Grundvandsmodellen for Salling (2023)

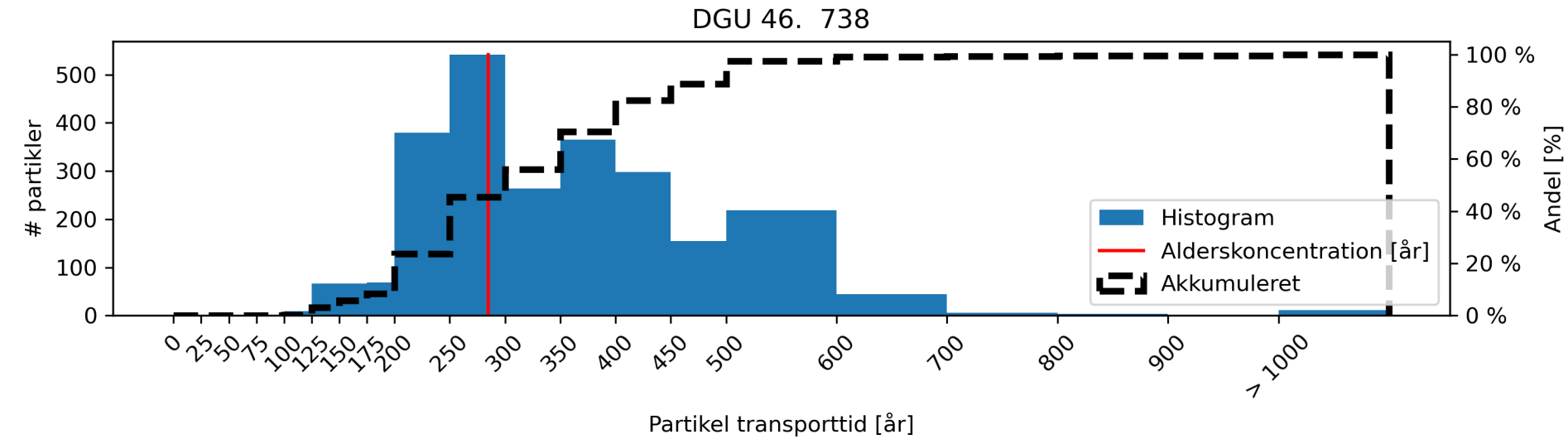


Eksempel fra Grundvandsmodellen for Salling (2023)



Eksempel fra Grundvandsmodellen for Salling (2023)

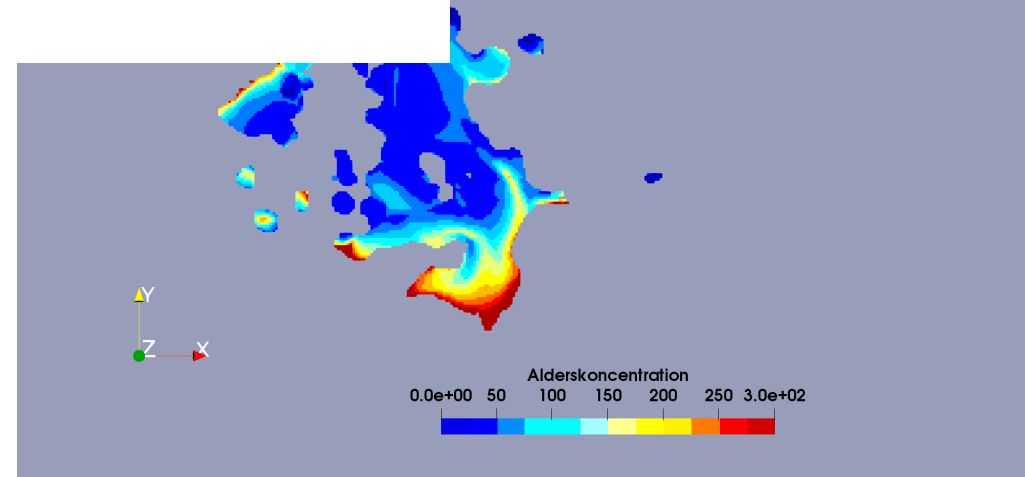
DGU 46. 738



FOHM2100



Observationer med præcisionsring



Anvendelse af aldersdata I grundvandsmodeller (a)

Inversion, partikeltracking + grundvandsmodel

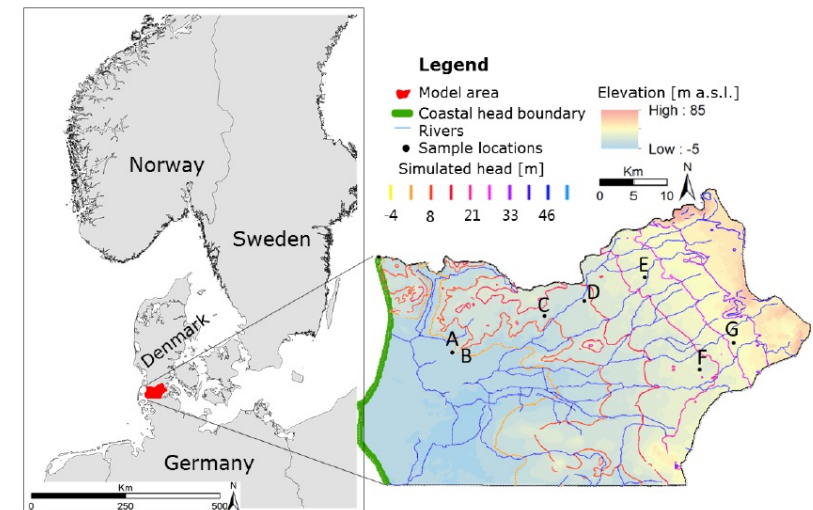
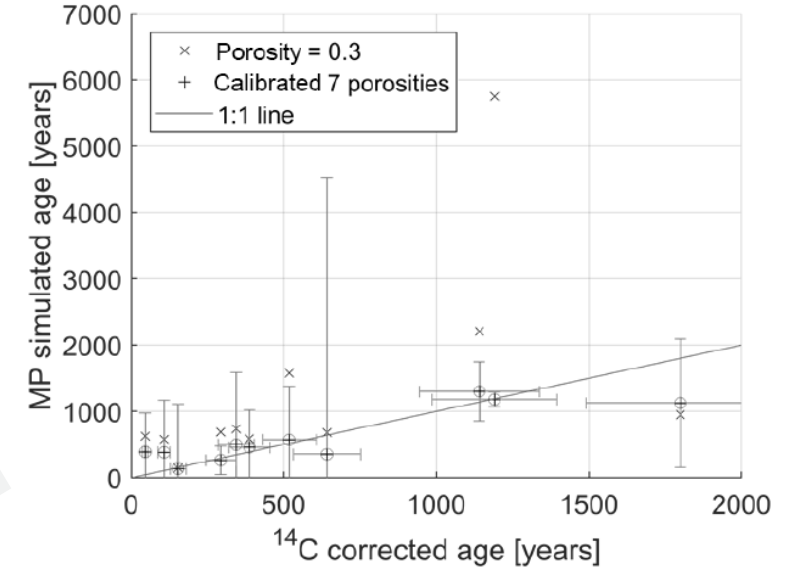
Advektionstransport

$$t(\mathbf{x}) = \int_{x_0}^{\mathbf{x}} \frac{n_e(\mathbf{x})}{q(\mathbf{x})} d\mathbf{x}.$$

$$\Phi_m = \sum (\omega_a (a_{\text{obs}} - a_{\text{sim}}))^2,$$

**KRÆVER GODT
ESTIMAT AF
GENNEMSNITSALDER**

Parameter (n_e)	Initial/preferred value		
Pleistocene sand 1	0.3	PHIMLIM	60
Pleistocene sand 2	0.3	PHIMACCEPT	100
Pleistocene clay 1	0.1	ϕ_m achieved	74
Pleistocene clay 2	0.05		
Miocene sand	0.3		
Miocene clay	0.1		
Miocene clay (Maade formation)	0.05		



Anvendelse af aldersdata I grundvandsmodeller

Inversion, partikeltracking + grundvandsmodel

Advektionstransport

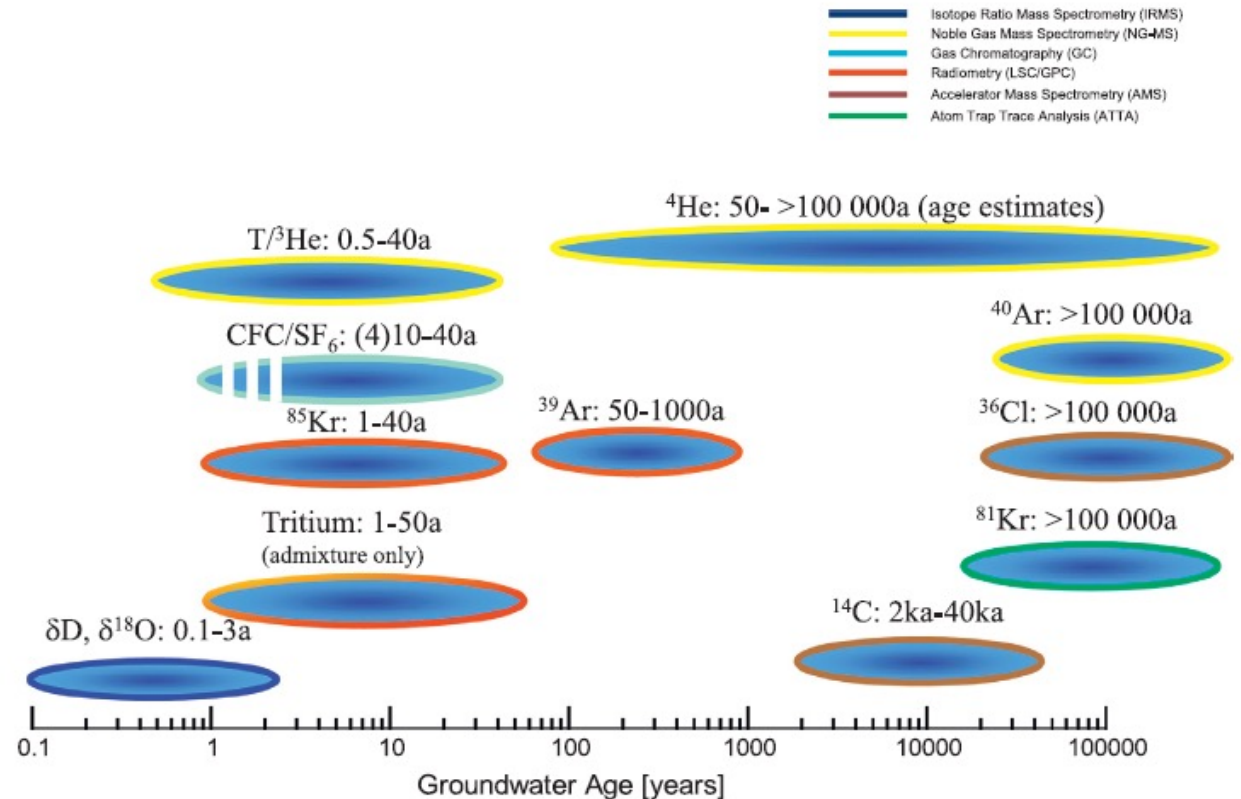
$$t(\mathbf{x}) = \int_{x_0}^{\mathbf{x}} \frac{n_e(\mathbf{x})}{q(\mathbf{x})} d\mathbf{x}.$$

$$\Phi_m = \sum (\omega_a (a_{\text{obs}} - a_{\text{sim}}))^2,$$

Ved anvendelse af "Tracer alder" skal der tages forbehold for hvad den repræsenterer.

Kræver udførelse af aldersdateringer

Er det mere fornuftigt at simulere koncentrationer med 1. ordens nedbrydning?



A. Suckow / Applied Geochemistry 50 (2014) 222–230

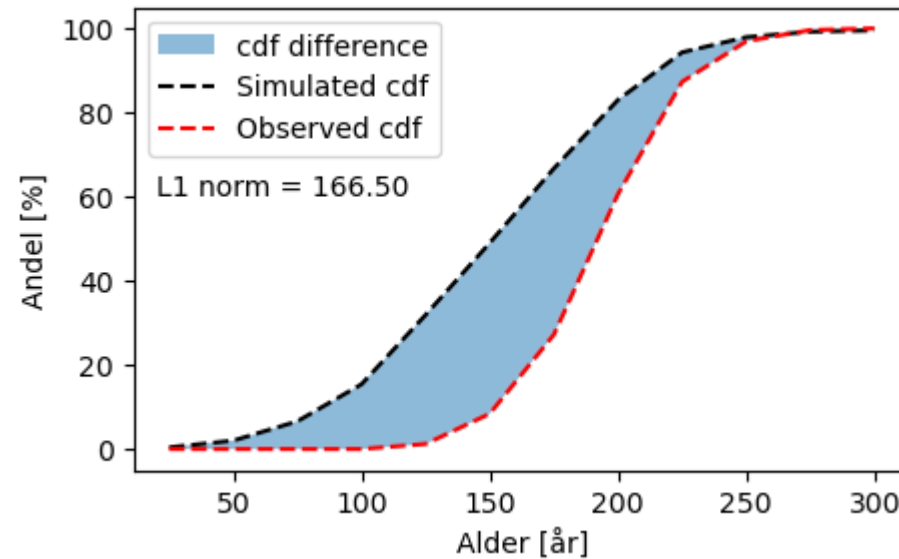
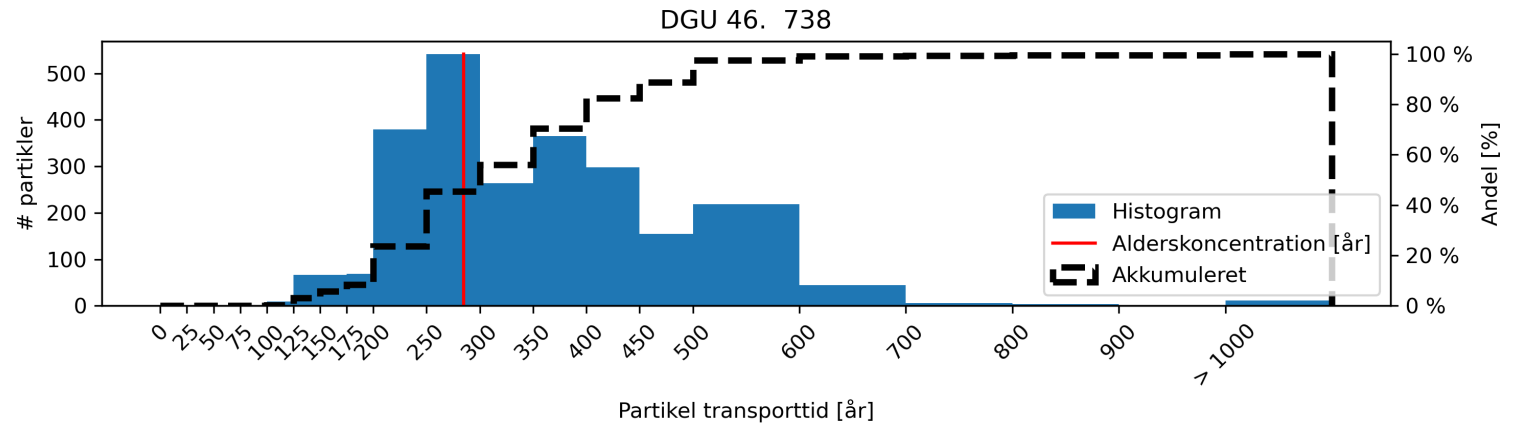
Anvendelse af aldersdata I grundvandsmodeller

Inversion, partikeltracking + grundvandsmodel

Fordelingsfunktioner for simuleret og observeret/beregnet alder

Fordel: kan sammenholde observerede aldersfordelinger direkte med observationer

Udfordring: Kan være meget vanskeligt (umuligt?) at estimere den faktiske aldersfordeling



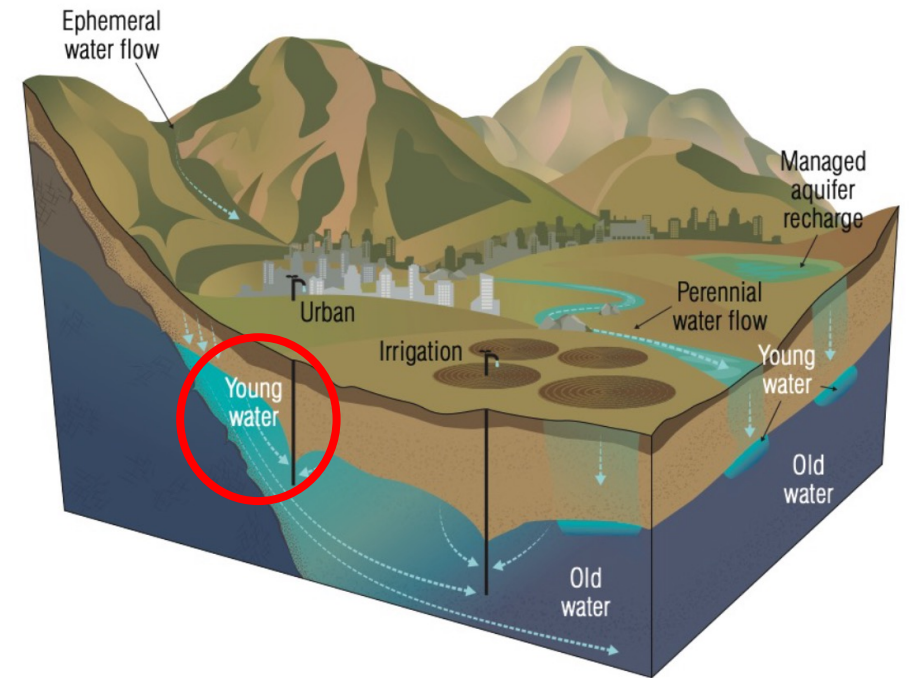
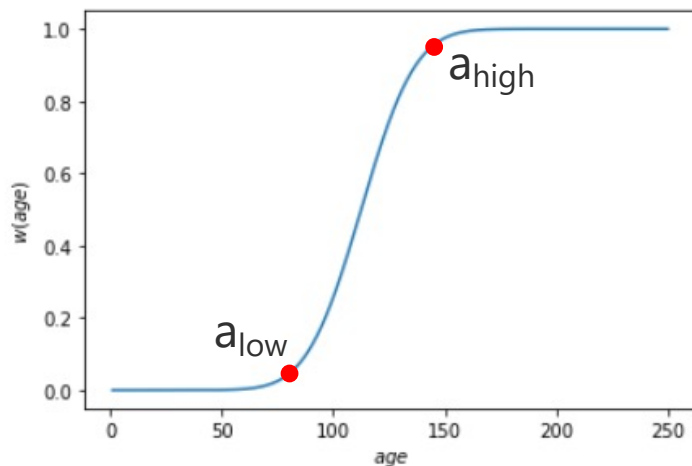
Anvendelse af aldersdata I grundvandsmodeller

Inversion, partikeltracking + grundvandsmodel

Advektionstransport

$$t(\mathbf{x}) = \int_{x_0}^{\mathbf{x}} \frac{n_e(\mathbf{x})}{q(\mathbf{x})} d\mathbf{x}.$$

Young water:



$$w(a) = 0.5 * \left(\frac{\operatorname{erfc}^{-1}(0.05) * (2 * a - a_{\text{low}} - a_{\text{high}})}{a_{\text{low}} - a_{\text{high}}} \right)$$

Anvendelse af aldersdata I grundvandsmodeller

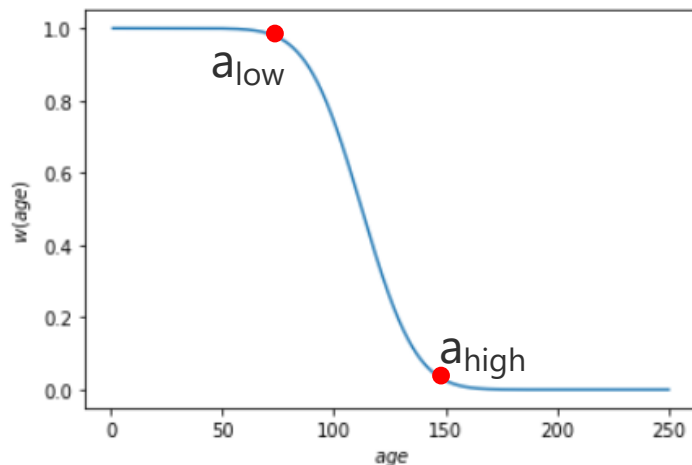
Inversion, partikeltracking + grundvandsmodel

Advektionstransport

$$t(\mathbf{x}) = \int_{x_0}^{\mathbf{x}} \frac{n_e(\mathbf{x})}{q(\mathbf{x})} d\mathbf{x}.$$

Kan nogle af de dygtige geokemikere hjælpe til med at analysere data fra Jupiter?

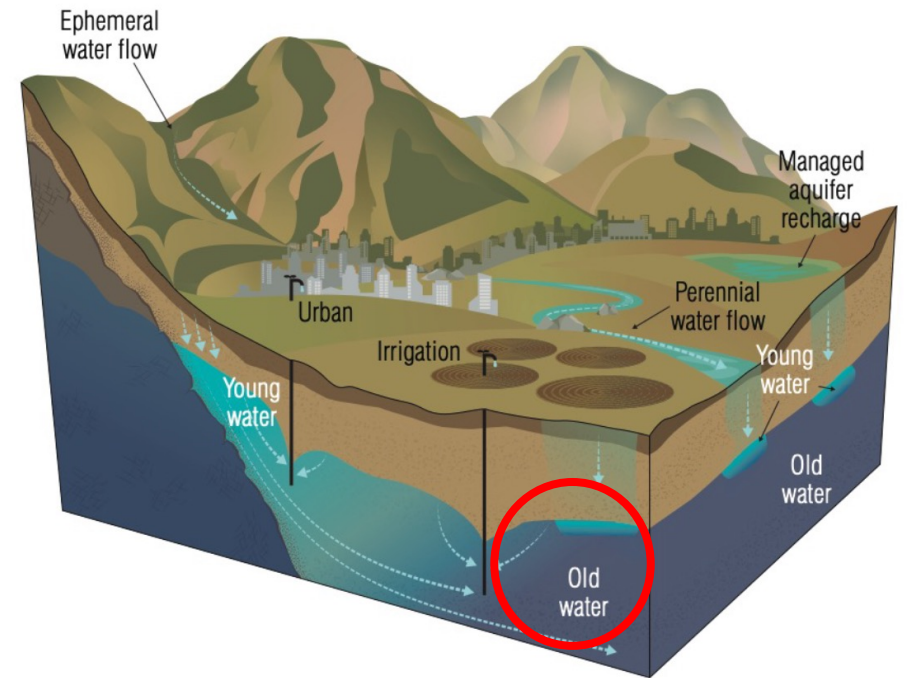
Old water:



Inversion:

$$\Phi_m = \sum_{i=1}^n \omega_{h,i} (h_{sim,i} - h_{obs,i})^2 + \sum_{j=1}^n \omega_{f,j} (f_{sim,j} - f_{obs,j})^2 + \sum_{k=1}^n \omega_{a,k} * w(a_k)^2$$

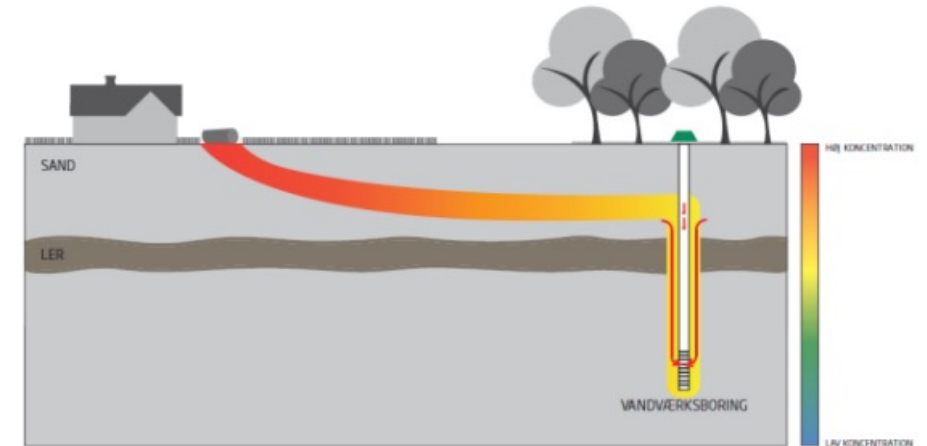
$$w(a) = 0.5 * \left(\frac{\text{erfc}^{-1}(0.05) * (2 * a - a_{low} - a_{high})}{a_{low} - a_{high}} \right)$$



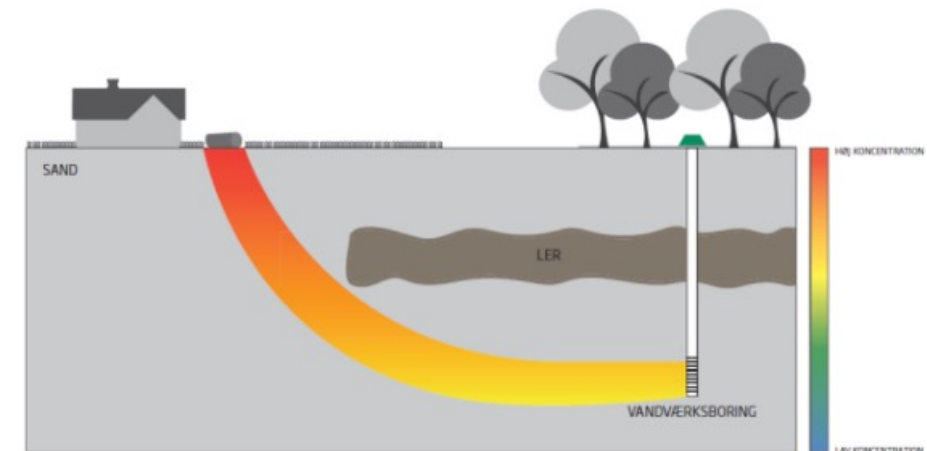
Hvad kan vi måle os frem til?

Borings- eller magasinbetinget forurening

- Utætheder – blandingsvand?
- Flere filtre – større sandsynlighed for kortslutning?
- Korrekt afpropning?
- Simuleringer
- Har vi tilstrækkelig vertical opløsning til at simulere vertikale komponenter af strømningsfeltet?
- Har vi tilstrækkelig horisontal opløsning til at opløse strømningen omkring borerne



Boringsbetinget forurening



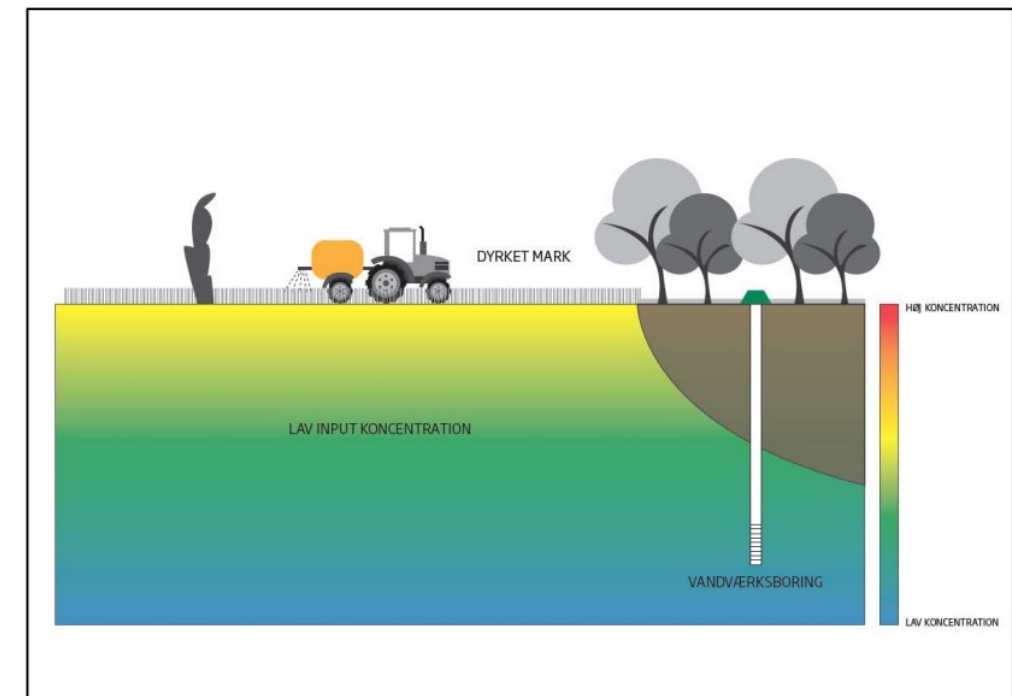
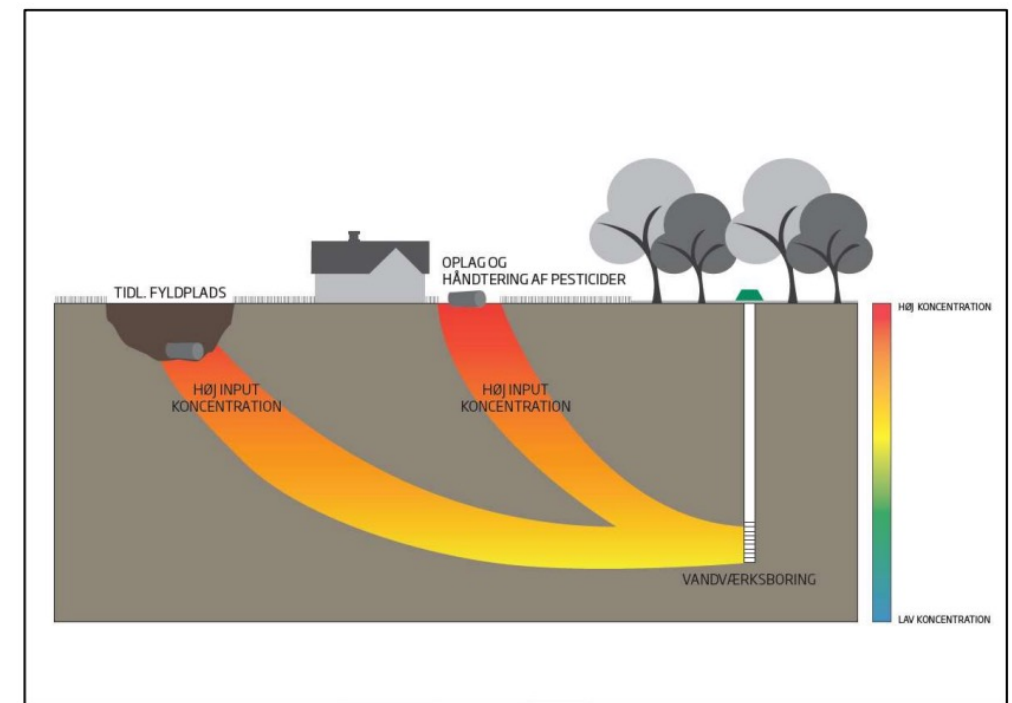
Magasinbetinget forurening

Figur fra Region Syddanmark:
Fund af pesticider i vand fra almene vandværker
- Idékatalog til vandværker og myndigheder
September 2018

Hvad kan vi måle os frem til?

Pesticider i betydelige magasiner, Region Midt

- **Hypotese:** Forureningsflux ud af lavtydende magasiner til betydelige magasiner er lille og udgør sjældent en risiko
- Gennemgang af litteratur, cases og data fra erfaringsopsamling:
 - Højeste koncentrationer af pesticider i primært magasin forekommer ved lavpermeable lokaliteter
 - For lavpermeable lokaliteter har geologi særlig betydning for risiko og masseflux



Hvad kan vi måle os frem til?

Pesticider og geologi

- Bioporer ned til 8-10 meters dybde
- Relikte rodgange fra dengang Danmark var dækket af skov
- Sprækker og forkastninger, som ofte afspejler isbevægelsesretningen, eller som er skabt ved frost/tø processer

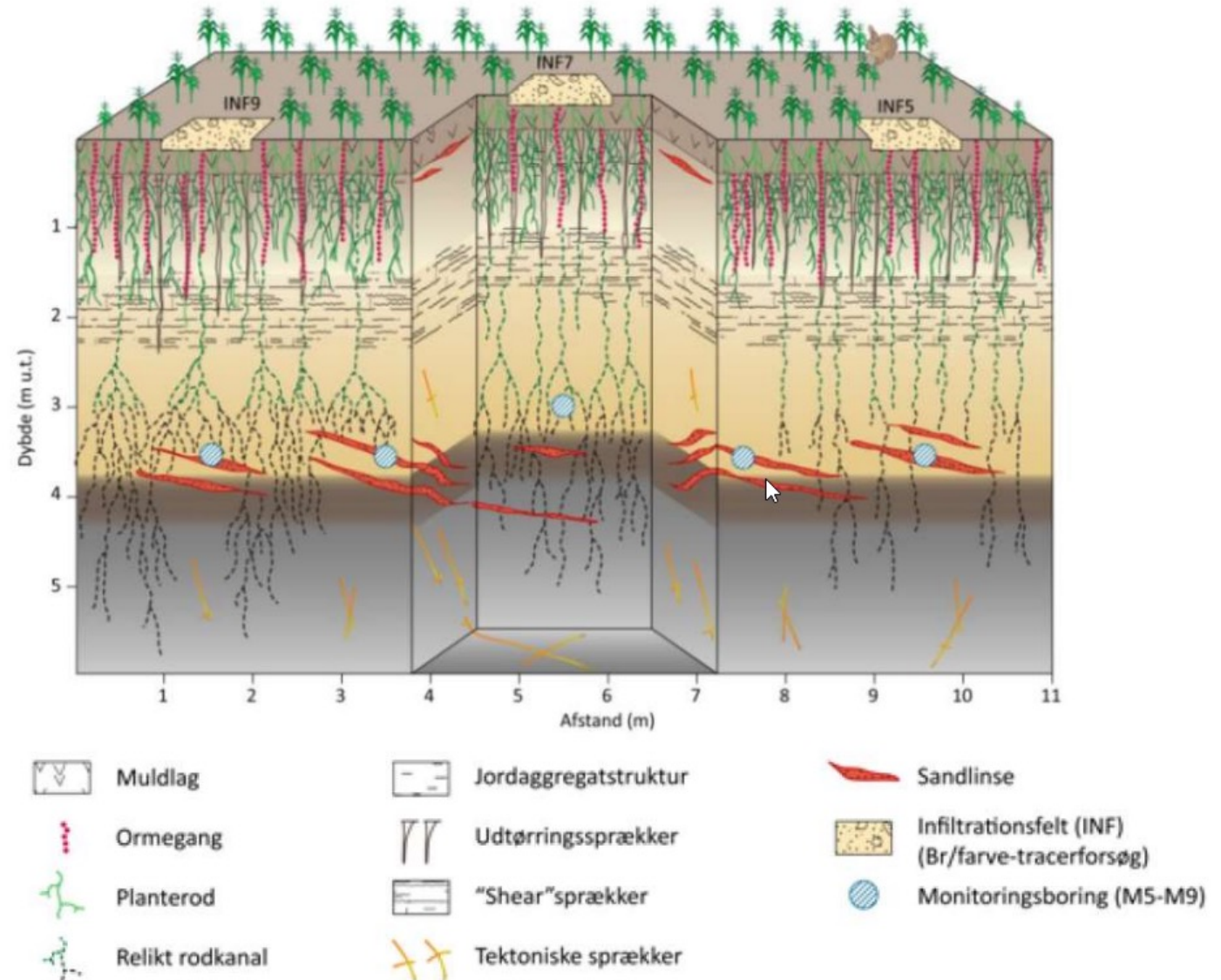


Illustration af sprækker og bioporer i moræneler (Miljøstyrelsen, 2017).

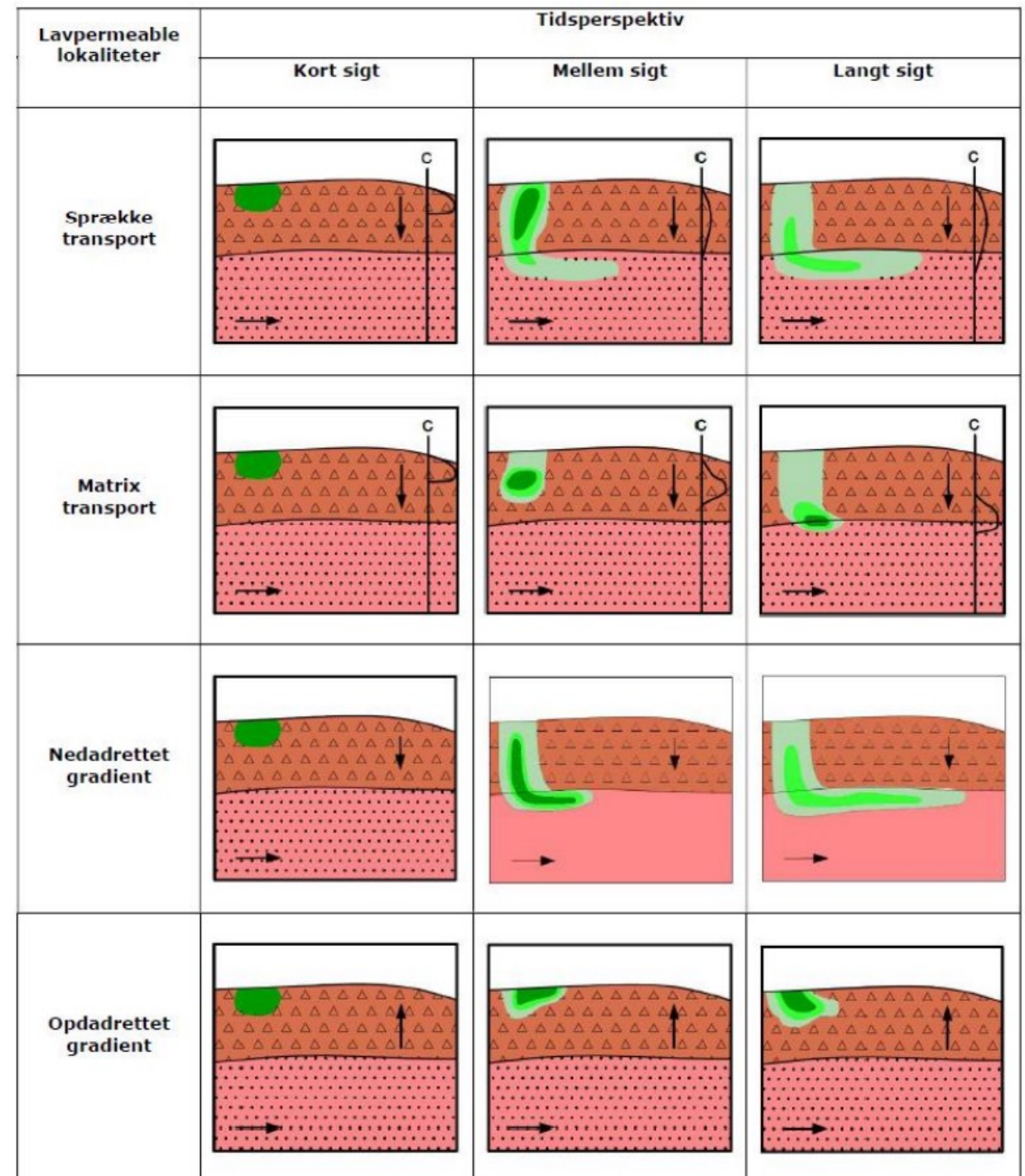
Dybe bioporers forekomst og betydning for pesticidudvaskning i moræneler

Hvad kan vi måle os frem til?

Geologi – strømning i ler

Lavpermeable lokaliteter

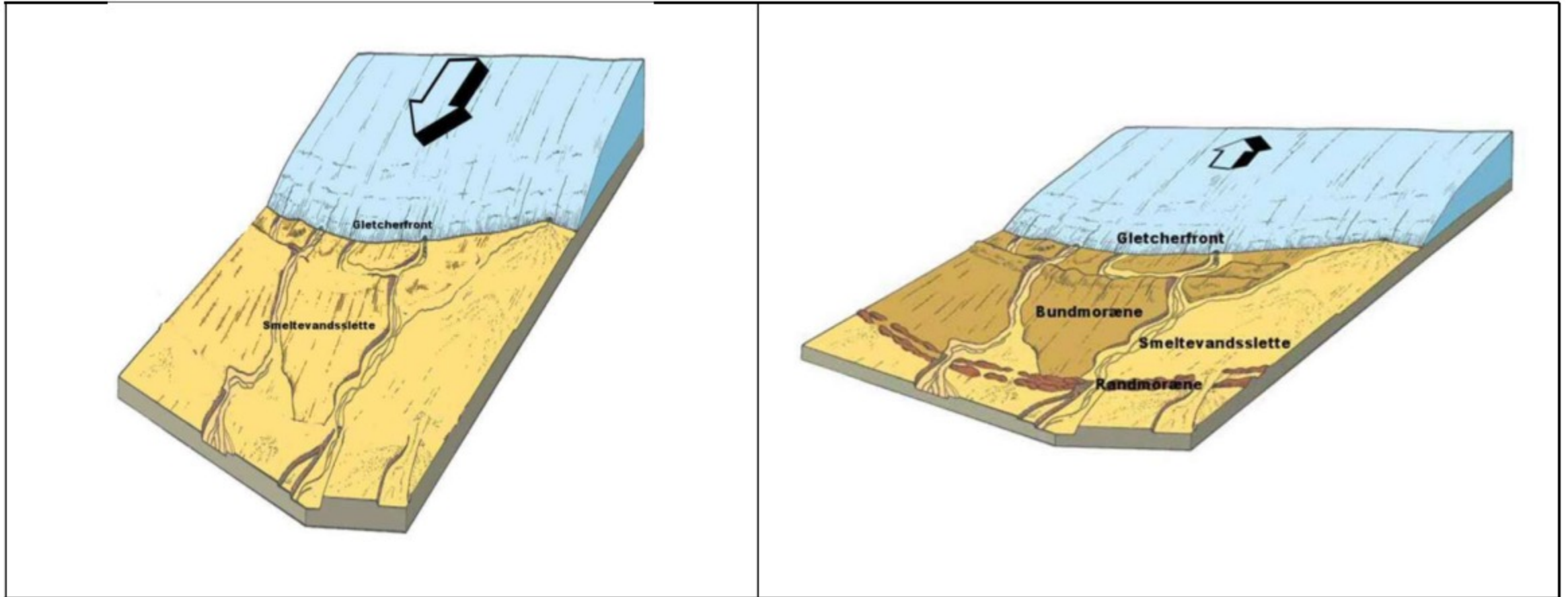
- Sprækketransport
- Matrixtransport
- Opadrettet/nedadrettet gradient



Hvad kan vi måle os frem til?

Geologi – strømning i sand

- Fining downward – aftagende hydraulisk ledningsevne
- Fining upward – stigende hydraulisk ledningsevne

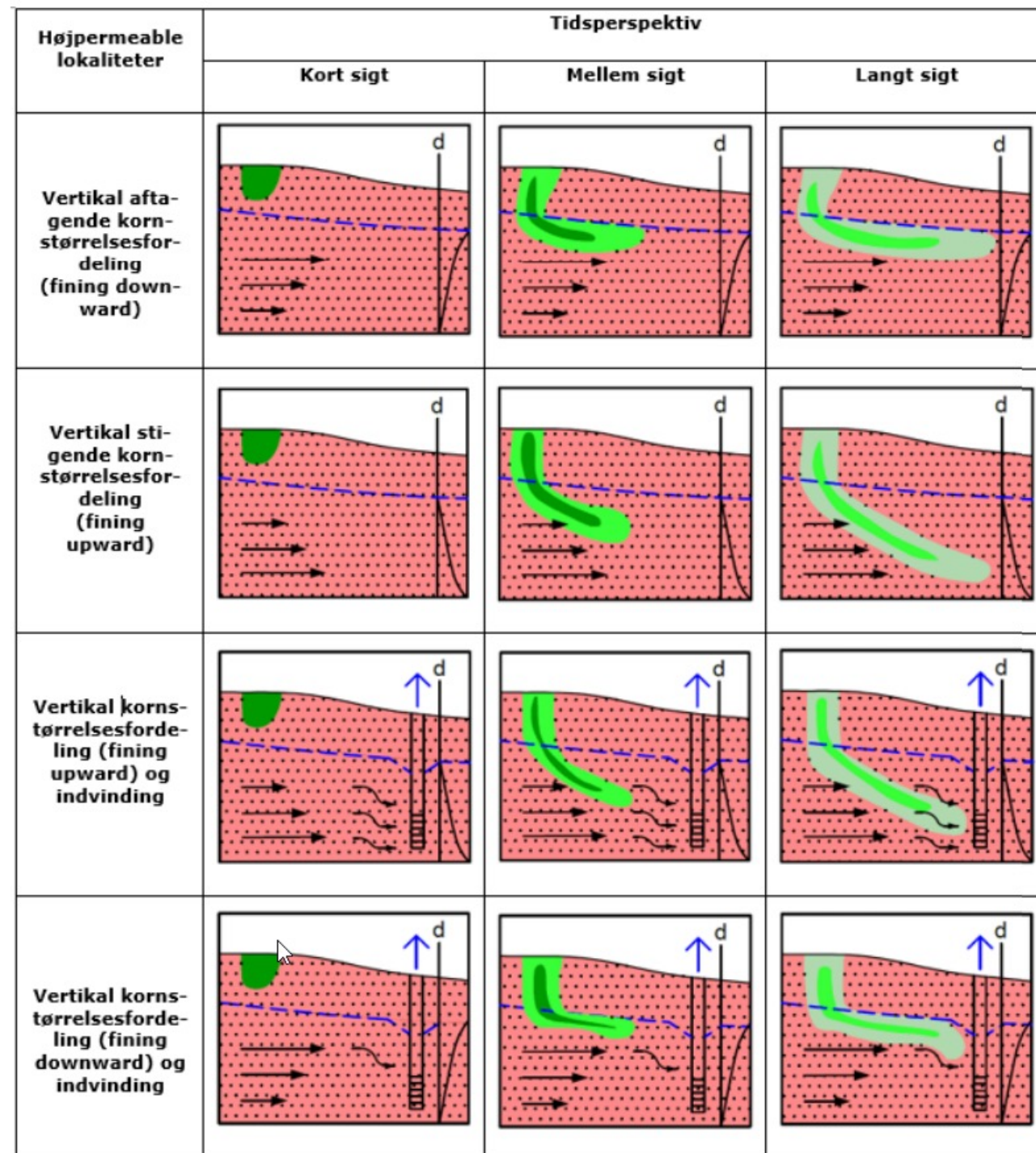


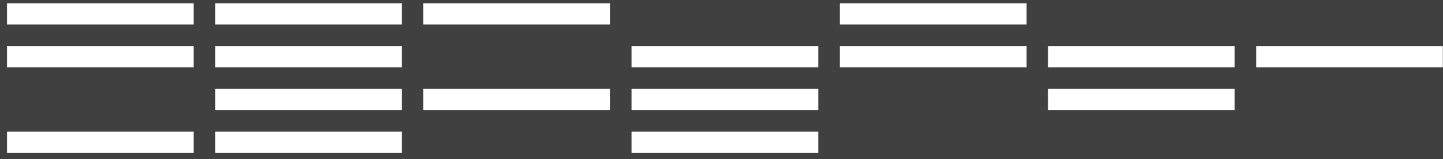
Hvad kan vi måle os frem til?

Geologi – strømning i sand

Højpermeable lokaliteter

- Vertikal kornstørrelsesfordeling (fining upward/downward afhængig af gletcher-retning)
- Fining upward medfører at fanen kan dykke ned i magasinet
- Indvinding og fining upward medfører forstærket effekt
- Forskel i alder top/bund af magasin?





Tak for opmærksomheden
