

MODELVÆRKTØJER TIL VURDERING AF GEOKEMISK BÆREDYGTIG INDVINDING AF GRUNDEVAND

Henrik Aktor, AKTOR innovation ApS

ATV MØDE
VINTERMØDE OM JORD- OG GRUNDEVANDSFORURENING

VINGSTEDCENTRET
6. - 7. marts 2007

RESUME

Sikring af den fremtidige vandkvalitet er et grundlæggende problem for en bæredygtig vandindvindingsstruktur i dansk vandforsyning og modeller er uundværlige værktøjer i løsningen. Mangel på detaljeret viden om betydning af de geokemiske processer og geologisk heterogenitet har skabt et behov for simulering af modellernes verdensbeskrivelse. Denne præsentation viser resultater fra simuleringsværktøjet Crystal Ball anvendt på analytiske løsninger i Visual Basic Applications for Excel kombineret med dedikerede numeriske modeller. Dette har givet et forbedret indblik i samspillet mellem geologisk heterogenitet, naturlig parameter variation og vandindvindingsbetingede effekter.

BAGGRUND OG FORMÅL

Stigende indhold af nikkel, hårdt vand og saltvandsproblemer er velkendte eksempler på effekten af intensiv vandindvinding rundt om de større byer. Det er i den forbindelse et grundlæggende problem, at vurdere den vandindvindingsstruktur og -mængde, der er bæredygtig på længere sigt også mht. vandkvalitet. Det skyldes, at der udover den grundlæggende usikkerhed mht. betydning af en række af de parametre, der indgår i vurderingen af de geokemiske processer, samtidigt er en betydelig naturlig variation i størrelsen af disse parametre. Et særligt problem opstår ved vurdering af drift og nyanlæg af tekniske installationer som borer, afværgeanlæg og vandværker. Hvor ”sikker” er en forudsigelse af stigende indhold af BAM på et kildefelt – vil det være nødvendigt at tage hensyn til fremtidig installation af aktiv kul adsorbere ?

Der findes et antal strømningssmodeller som kan anvendes til at beskrive stoftransport (f.eks. MODFLOW-RT3D, MIKE-SHE og FRAC3Dvs). Imidlertid er disse modeller pga. deres størrelse og kompleksitet ofte upraktiske mht. vurdering af usikkerheder i de relevante geokemiske parametre. Hvilke processer og antagelser er egentlig afgørende for resultatet. Et eksempel er ”effektiv porøsitet” – altså hvor stor en del af magasinet er aktivt vandførende – denne parametre er af stor betydning for beregning af opholdstid, dæmpning af pulser af kemiske stoffer fra jordoverfladen og tidspunkt til maksimalt gennembrud. Parameteren er dog sjældent genstand for målrettede følsomhedsanalyser.

Det springende punkt er mange gange at analysere og fastlægge de grænseflader og randbetingelser der er af afgørende betydning. Herefter kommer valget og betjening af det bedste modelværktøj ”i kassen” – som regel noget der kræver særlig indsigt og erfaring med praktisk brug. For de fleste teknikere der arbejder med disse problemstillinger er det typiske elektroniske værktøj nævnt i rækkefølge efter vigtighed: Tekstbehandling, regneark og så et enkelt eller to dedikerede simuleringsværktøjer.

Formålet med det udførte arbejde har været at udvikle og demonstrere en metodik til vurdering af vandkvalitet, der i den indledende analyserende fase – hvor grænseflade og randbetingelser vurderes – kan give en kvantitativ vurdering af modelusikkerhed, parameterusikkerhed og naturlig variation..

METODE

Programmet Crystal Ball 7.2 er blevet anvendt til at gennemføre Monte Carlo simuleringer af analytiske og numeriske geokemiske modeller opbygget i Excel. De geokemiske modeller skrevet i VBA for Excel integrerer modelresultater fra både simple boksmødder og numeriske strømningssmodeller med en geokemisk modelbeskrivelse. Crystal Ball gennemfører Monte Carlo simuleringerne ved at gennemregne Excel modellen med variation af de hydrogeologiske og geokemiske input parametre, opsamler simuleringresultaterne, samt analyserer sammenhængen mellem parametervalg og resultater.

Ordet simulering refererer her til en analytisk metode der kan efterligne den virkelige verdens systemer, specielt i de tilfælde hvor andre analyser bliver for matematisk komplekse eller for svære at reproducere.

Uden brugen af simulering ville en regnearksmodel udelukkende kunne give et resultat – typisk det mest sandsynlige eller gennemsnitlige scenarium. Med simulering kan en regnearksmodel anvendes til at analysere effekten af et varierende datagrundlag på modellens beregninger og resultater.

Monte Carlo simulering er én type af regnearks simulering, hvor der gentagende gange genereres tilfældige værdier af usikre variable for at simulere en regnearksmodel. At en variabel er usikker dækker ikke nødvendigvis over at vi ikke kan måle den. Det kan ligeså godt betyde at den i naturen blot varierer som vi kender det fra dagens vejr.

Monte Carlo simulering er opkaldt efter byen Monte Carlo, hvor hovedattraktionerne er kasinoer med chancebetonede spil. Disse spil som roulette, terninger og enarmede tyveknægte er karakteriserede ved at være tilfældige.

Selvom man ved, at et kast med en terning kan give 1, 2, 3, 4, 5 eller 6, så kender man aldrig resultatet af næste kast. Dette svarer til en situation, hvor man på grundlag af undersøgelser har en rimelig sikker forventning om kalkbjergartens indhold af pyrit (f.eks. 0,05 – 0,15 %), men man kender ikke indholdet i en tilfældig sedimentprøve udtaget i en tilfældig boring. Det er i praksis meget svært at overskue betydningen af variation og usikkerhed når man anvender modeller til at beskrive naturlige systemer. Med Monte Carlo simulering kan man analysere tusinder af scenarier, hvor vi tillader naturlig variation og ubestemthed i de variable, der indgår i f.eks. en transport model.

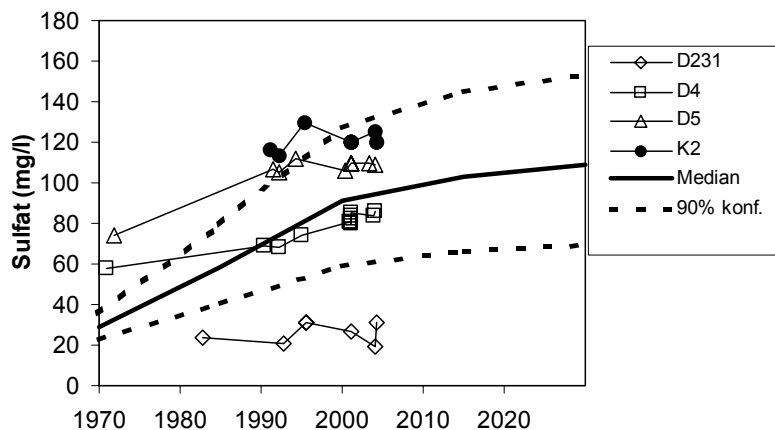
Under simuleringen beregnes talrige scenarier af modellen ved gentagen indsættelse af nye værdier for de usikre og ubestemte variable. I hvert scenarium vælger Crystal Ball en tilfældig værdi i overensstemmelse med de definerede sandsynlighedsfordelinger og genberegner regnearket.

Afslutningsvist opsamler Crystal Ball alle scenarier og analyserer sammenhængen mellem variable og resultatet (f.eks. trend analyse).

RESULTATER

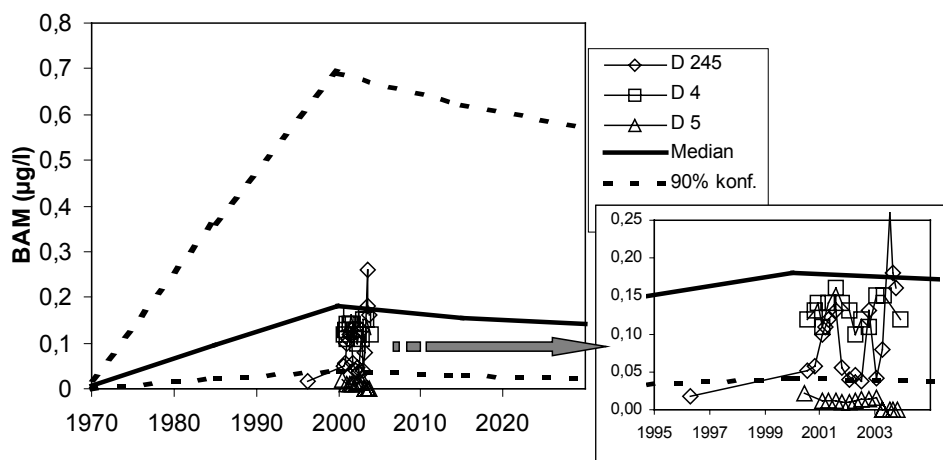
Gennembrud af BAM og sulfat til Dalum kildeplads

Modellsimulering af gennembrud af sulfat og BAM til Dalum kildeplads (Odense Vandselskab) er vist i figur 1 og 2.



Figur 1. Model af sulfat oppumpet på kildepladsen sammenlignet med målte værdier. Der er vist median og 90 % konfidensinterval, hvis sulfatudvaskningen fra landbrug og pyritoxidation varierer jævnt mellem 70–170 mg/l.

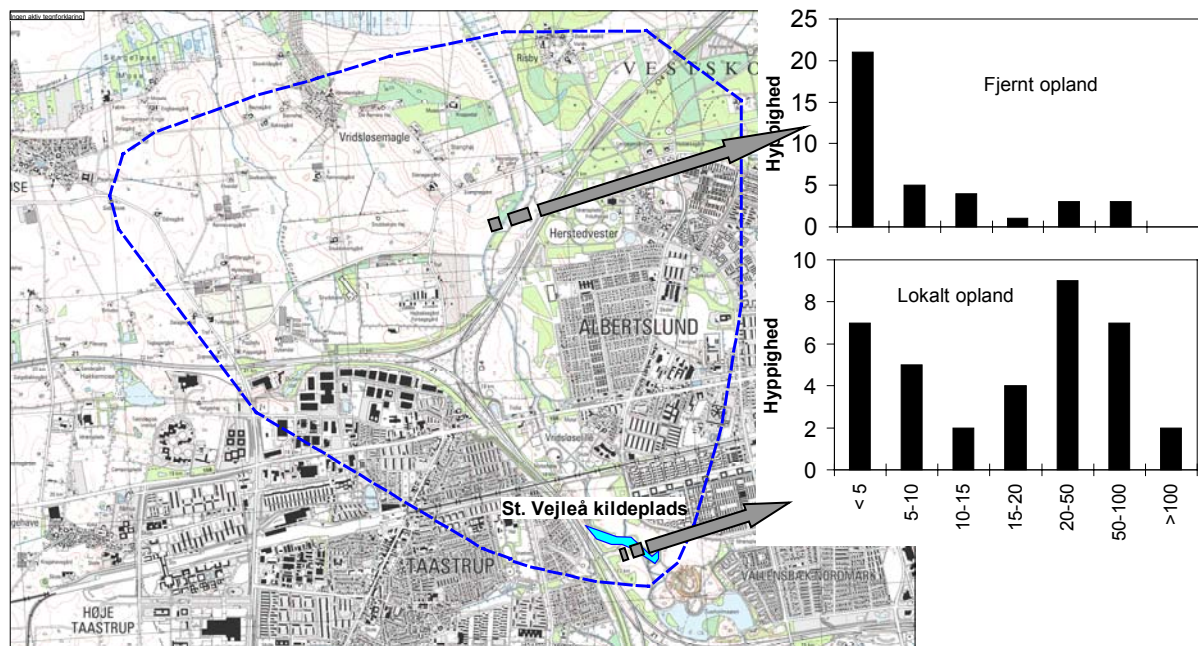
Regnearksmodellen er baseret på en relativ aldersfordeling der var et delresultat fra opstilling af en stationær strømningsmodel for et område noget større end kildepladsens grundvandsdannende opland (MIKE-SHE). Regnearksmodellen blev oprindeligt opstillet (2001) for at vurdere det fremtidige (plads-)behov for udbygning af det nye vandværk med aktiv kul adsorbere, da man havde konstateret forurening med BAM på kildepladsen. Der er efterfølgende gennemført Monte Carlo simuleringer af den simple regnearksmodel som er sammenlignet med målte værdier. Rimelige variationer af de oprindelige parameterverdier kan give særdeles store variationer (især for BAM) og de reelt målte værdier viser også en væsentlig spredning pga. de naturgivne variationer. Modellen af sulfat indholdet kan bruges til at undersøge den hydrauliske opholdstid i magasinerne.



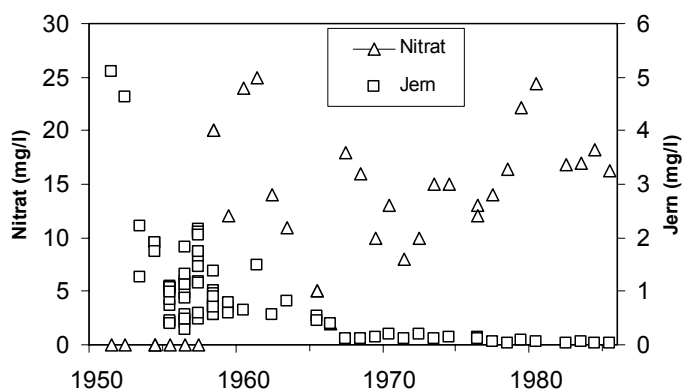
Figur 2. Model af BAM udvaskning sammenlignet med målte værdier. Model anvender en retardationsfaktor $R=1,5$ og variable værdier for massebalance og nedbrydning i overjord. Nedbrydningsraten for BAM (1. ordens) i mættet zone er lognormal fordelt med en middelværdi på $0,02 \text{ år}^{-1}$ og en standardafvigelse på $0,02 \text{ år}^{-1}$.

Vurdering af nikkel indhold i kalkmagasinet ved St. Vejle Å (Københavns Amt)

I forbindelse med diskussionen af en mulig halvering af oppumpningen (1,4 mio. m³/år) fra Københavns Energis (KE) tidligere kildeplads (nu afværgeanlæg) ved St. Vejle Å, ønskede Københavns Amt en vurdering af de mulige effekter på indholdet af nikkel som er ret højt i området, særligt tæt på kildefeltet (se figur 3).



Figur 3. Den gamle KE kildeplads ved St. Vejle Å afværgepumper årligt ca. 1,4 mio. m³. Nikkelindholdet i kalkmagasinet i nærområdet ved kildefeltet er ret højt sammenlignet med det fjernere opland (histogrammerne). Der er et væsentligt antal nikkelmålinger fra ressource- og forureningsundersøgelser i området.



Figur 4. Vandkemi på St. Vejle Å kildeplads ændres markant i 60'erne fra svagt reduceret til oxideret – således forsvinder jern fra grundvandet omkring 1960 og nitratindholdet stiger fra 0 til omkring 20 mg/l.

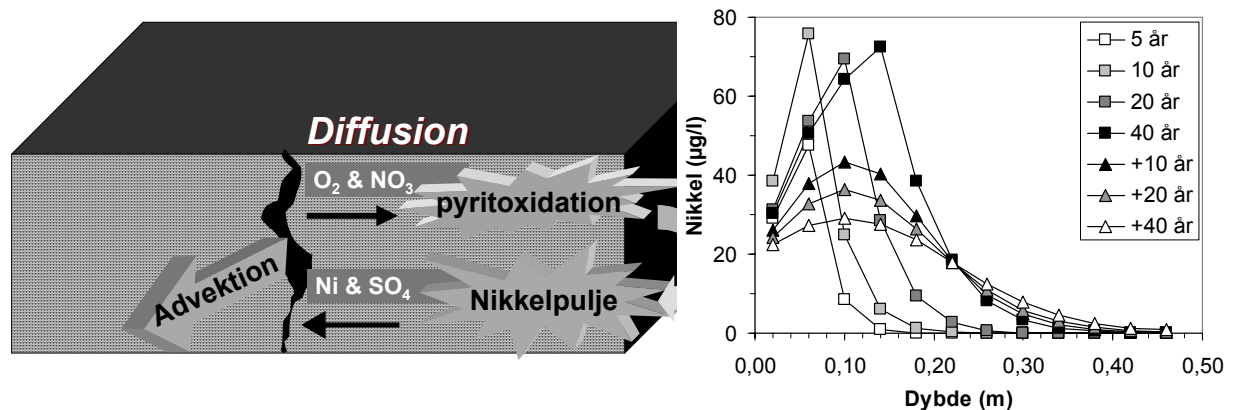
Vurderingen af grundvandskemi viser et markant skift fra svagt reduceret til oxideret vandtype op gennem 60'erne (se figur 4) med meget høje sulfatindhold (over 600 mg/l). En massebalance for svovl viser, at der i kildepladsens levetid er oppumpet ca. 7.000 ton svovl. Ved korrektion for atmosfæriske bidrag mm. vurderes, at minimum 5.700 ton svovl er blevet mobiliseret ved pyritoxidation pga. atmosfærisk ilt i umættede zoner af kalkmagasinet

eller lokale sandmagasiner i de kvartære dæklag. Dette svarer til 10.700 ton pyrit eller fuldstændig udvaskning af pyrit fra mere end 10 mio. ton sediment (6 mio. m³). Da udvaskningen næppe er fuldstændig er der tale om et volumen af påvirket sediment betydeligt større end 6 mio. m³.

Niveauspecifikke målinger afslørede, at kalkmagasinet er karakteriseret af en øvre 5 – 10 m dyb sprækkedomineret zone med oxideret vandtype, der leverer ca. 90 % af boringsydelsen og en nedre, mindre vandførende zone med svagt reduceret grundvand.

Analyse af massebalancerne for nikkel, sulfat og nitrat demonstrerede samlet, at årsagen til de høje nikkelindhold i grundvandet ved St. Vejleå er en mobilisering af nikkel ved pyritoxidation i et flere km² stort lokalområde. Det er primært atmosfærisk ilt og i mindre udstrækning nitrat, der transporteres fra sprækker ind i den tætte matrix, hvor pyritoxidationen foregår. Reaktionsprodukterne sulfat og nikkel transporteres den modsatte vej (se illustration i figur 5).

PHREEQC blev anvendt til at vurdere diffusion og reaktioner i matrix på grundlag af parameter bestemmelser der er resultater fra de nikkelundersøgelser der er blevet gennemført indenfor de sidste år /1/- /5/. Modelberegningerne viser, at nikkelfrigivelsen går langsommere og langsommere efterhånden, som den lettilgængelige pyrit i nærheden af sprækkerne opbruges. Nikkel bevæger sig samtidigt endnu langsommere ud af kalkmatrix end sulfat, fordi nikkel bindes til naturlige kalksedimenter – typiske K_D – værdier ligger i intervallet 5 – 20 kg/l. Modelberegningerne og målinger støtter hinanden i, at der er en stor pulje af løst bundet nikkel, som vil forsætte med at blive frigivet selv efter ophør af ilt og nitrat tilførsel.



Figur 5. Konceptuel model for nikkelfrigivelse ved pyritoxidation i matrix. Fra sprækkerne er der en flux af atmosfærisk ilt svarende til et iltforbrug på 2 mol/m³kalk/år. PHREEQC beregninger af nikkelindholdet i matrix-porevand som funktion af afstand fra sprækkevæg viser, at intern udfældning af gips er usandsynlig i matrix pga. af faldende massetransport af ilt når diffusionslængden bliver større. Beregningerne viser også hvordan omfordeling af nikkel i matrix vil forsætte i mere end 40 år (trekant) efter 40 års indledende pyritoxidation (firkant).

Denne indledende analyse fokuserede på sprækkeafstand og volumetrisk ilt forbrug som afgørende parametre. Iltforbruget er begrænset af diffusion af opløst ilt i matrix som er stort set vandmættet selvom de drænedes sprækker tillader advektiv transport af atmosfærisk ilt. Ud fra publicerede feltmålinger /1/ blev dette fastlagt til intervallet ½ – 2 mol O₂/m³ kalk/år.

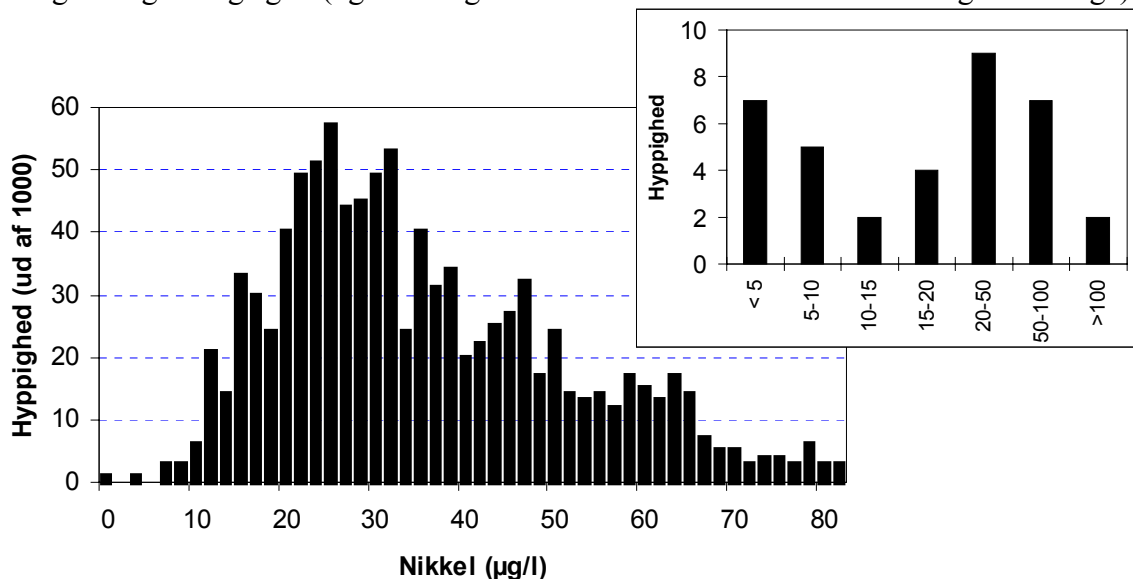
KAN*miljø* gennemførte en analyse af prøvepumpningsresultater fra kildefeltets nærområde, som viste at kalkmatrix og de smalleste sprækker bidrager med et matrixmagasintal S_m i intervallet 0,03 – 0,05. Matrix hydraulisk ledningsevne K_m kunne ligeledes vurderes ud fra prøvepumpningsresultaterne til intervallet $1-5 \cdot 10^{-8}$ m/s. Sprækkemagasintallet S_f – der er fortolket som en effektiv sprækkeporøsitet – ligger i intervallet 0,003 – 0,005 (0,3 – 0,5 %).

Analysen af vandkvalitetsudviklingen blev baseret på en Monte Carlo simulering af en massebalance for nikkel i det kildepladsnære opland (2,5 km²) opstillet i VBA for Excel. Bidragene til massebalancen for nikkel er baseret på en beskrivelse af stoftransporten i sprækker og matrix. Den opstillede massebalance for indholdet af nikkel i den ca. 5 m dybe øvre strømningszone i kalken har følgende betydende led:

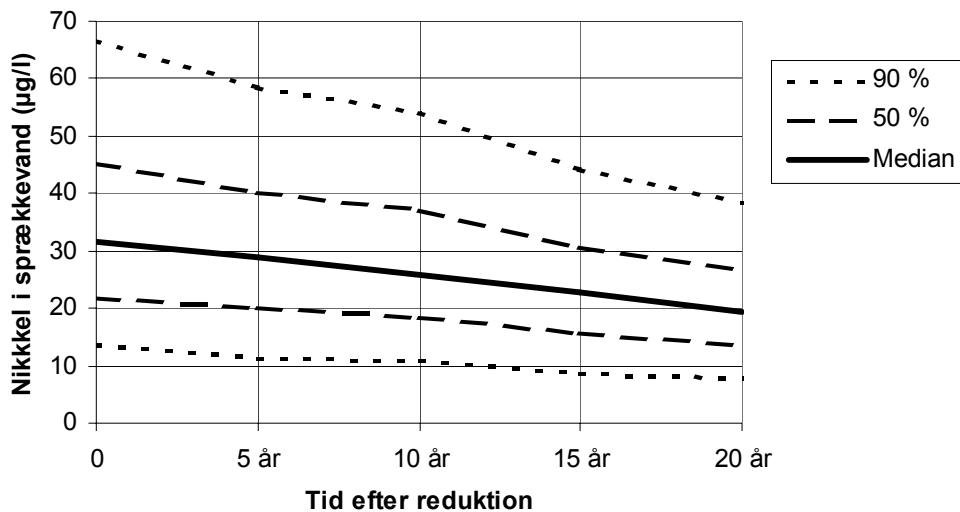
$$F_{\text{oppumpet}} + F_{\text{diffusion}} = F_{\text{opland}} + F_{\text{umættet}} + F_{\text{tidligere umættet}}$$

F_{oppumpet}	Nikkel fjernet med oppumpet grundvand fra sprækkerne
$F_{\text{diffusion}}$	Nikkel fjernet ved diffusionstransport fra sprækker ind i matrix
F_{opland}	Tilførsel af nikkel fra grundvandsdannelse i fjernt opland
$F_{\text{umættet}}$	Nikkelbidrag fra infiltrerende grundvand fra umættet zone
$F_{\text{tidligere umættet}}$	Nikkelbidrag fra infiltrerende grundvand fra tidligere umættet zone

Nogle resultater fra modelsimuleringerne med de nævnte parameterintervaller såvel som andre randbetingelser (f.eks. størrelsen af umættet zone) er vist i figur 6 og 7. Der er en rimelig overensstemmelse mellem simuleringerne og de målte værdier af nikkel i nærområdet specielt for intervallet 10 – 100 µg/l. Modelsimuleringerne viser også, at der vil gå årtier før indholdet af nikkel er faldet signifikant efter en halvering af oppumpningen. Sammenfattende, er en løsning af de lokale ressourceproblemer ved at halvere oppumpningen rigtig tænkt – men også meget langsigtet (og intet sagt om de klorerede alifater som er årsag til afværge).



Figur 6. Sammenligning af simulerede nikkelindhold i nærområdet med den målte distribution fra eksisterende borer i området (indskudt figur). Modelsimuleringen har fin overensstemmelse med den relative hyppighed af nikkelmålinger i intervallet 10 – 100 µg/l, men passer ikke med hyppigheden af nikkelindhold under 10 µg/l.



Figur 7. Median og konfidensintervaller for nikkelindholdet ved St. Vejle Å i de første 20 år efter reduktion af oppumpning, deraf følgende hævnning af vandspejlet og dermed formindsket nikkeludvaskning.

Udvikling i sulfat og klorid på Vigersted Kildeplads (Københavns Energi)

Indvindingsstilladelsen for Københavns Energi (KE) kildeplads ved Vigersted skal fornyes. Kildepladsen indvinder årligt ca. 5 mio. m³ og er dermed for tiden KE's største. Grundvandets sammensætning er generelt god, men har siden kildepladsens start ændret sig med tendens til stigende indhold af klorid og sulfat. Der er store variationer i vandkvaliteten mellem de enkelte boringer og der er også påvist væsentlige forskelle i grundvandets sammensætning i forskellige dybder.

For at vurdere i hvilken udstrækning vandindvindingen på Vigersted kildeplads er bæredygtig mht. udvikling i vandkvalitet blev der opstillet en geokemisk model i VBA for Excel som blev simuleret med Crystal Ball. Vandbalancen for det primære magasin (grønsandskalk) blev baseret på resultater fra Danmarksmodellen (1x1 km grid) med indvinding og i den "naturlige" referencesituation før indvindingsopstart /6/. Stoftransport i dæklagene blev beskrevet som en en-dimensionel lodret transport vha. analytiske løsninger i hver celle /7/.

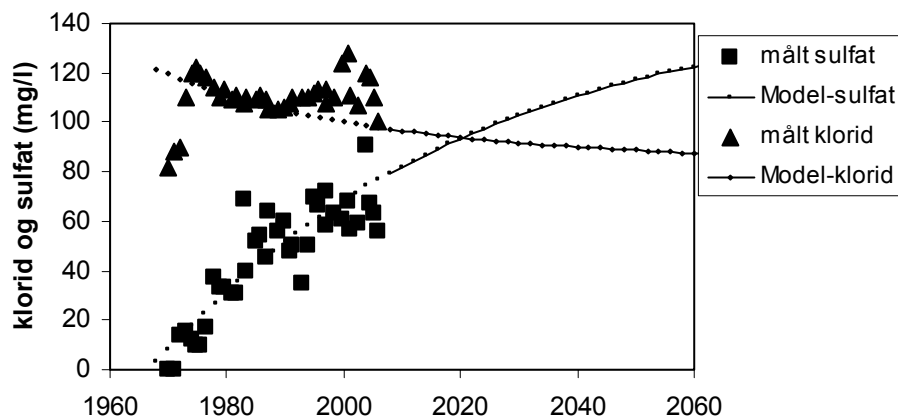
Sulfatindholdet var lavt ved etablering af kildepladsen, men steg hurtigt efter opstarten i midten af 60'erne. Derfor vurderes sulfat transporteret fra overfladenære kilder (landbrug og pyritoxidation i drænede aflejringer). Klorid indholdet steg endnu hurtigere efter kildepladsens start og der blev opstillet en hypotese for kloridindholdet i den højtydende grønssandskalk.

Klorid indholdet er modelberegnet ud fra en antagelse om diffusions betinget transport fra den lavpermeable Danienskalk under grønssandskalken. Det er antaget at saltvand i Danienskalken er af meget gammel dato – muligvis helt tilbage fra sedimenternes dannelse. Kalk/mergel grundvandsmagasinet er siden afslutningen af sidste istid blevet gennemskyllet med ferskvand og klorid indholdet i magasinet bestemmes af balancen mellem mængden af klorid der tilføres ved diffusion fra Danienskalken og mængden af ferskvand der tilføres ved infiltration. Dette problem er kendt som diffusion ind i et semi-uendeligt medium og kan løses med de aktuelle randbetingelser som:

$$Cl = Cl_{\text{baggrund}} + Cl_{\text{saltvand}} \cdot \sqrt{\frac{D_f \cdot \varepsilon^3}{\pi \cdot \tau \cdot N^2}}$$

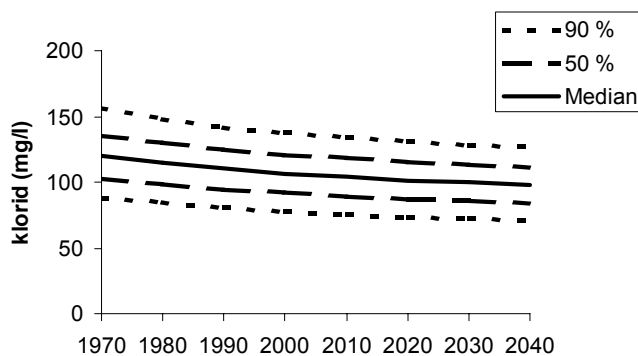
hvor

Cl	Resulterende kloridkoncentration
Cl_{baggrund}	Baggrundskoncentration (20 mg/l)
Cl_{saltvand}	Saltvandets indhold af klorid (19.000 mg/l)
D_f	Den fri diffusionskoefficient i vand ($10^{-9} \text{ m}^2/\text{s} = 0,032 \text{ m}^2/\text{år}$)
ε	Primære porøsitet i bjergarten (20 – 50 %)
τ	Tid siden udvaskning startede (10.000 – 15.000 år)
N	Infiltrationen til magasinet (0 – 100 mm/år = 0,1 m/år)



Figur 8. Sammenligning af målte værdier af klorid og sulfat i samlevandet fra Vigersted kildeplads med en enkeltstående beregning af den geokemiske model

Grundvandsdannelsen var mindre i perioden inden kildepladsen kom i drift og effekten af indvindingen i form af øget grundvandsdannelse vil blive observeret som en faldende koncentration af klorid (se figur 8). Modellen er ikke i stand til at beskrive den detaljerede ændring af vandkemien i 1990'erne, som stammer fra ibrugtagning af nye og dybere borer. Grundvandsdannelsen til de dybere del af det primære magasin er lavere og det må forventes at kloridkurven skal skifte til et højere liggende kurveforløb og sulfat til et lavere. Der er dog en tendens til at indholdet af klorid og sulfat svinger tilbage på sporet i slutningen af perioden.



Figur 9. Monte Carlo simulering af modelresultater for klorid

Resultater med kloridindholdet i grundvandet fra Monte Carlo simuleringer af Excel modellen er vist i figur 9. De variable parametre af betydning er magasintykkelse, sprække og matrix porøsitet, og tidsparameteren τ . Den gennemførte analyse danner et rimeligt sikkert grundlag for at konkludere, at lækage af kloridholdigt grundvand fra dybere lag næppe er en begrænsende faktor for den fremtidige indvinding på Vigersted kildeplads. Vandindvindingen vil tværtimod med tiden få indholdet til at falde – godt nok forholdsvist svagt. Der er væsentlig større usikkerhed omkring udviklingen i sulfat, fordi der mangler viden om sulfatindholdet i de øvre kvartære magasiner tæt ved kildepladsen.

AFSLUTTENDE BEMÆRKNINGER

VBA Excel baserede geokemiske modeller udgør sammen med Crystal Ball og andre simuleringværktøjer et enkelt og effektivt værktøj til integrering af resultater fra numeriske strømningsmodeller og Monte Carlo simulering af geokemiske processer. Med metodikken opnås resultater, der giver et betydningsfuldt indblik i samspillet mellem geologisk heterogenitet, naturlig parameter variation og vandindvindingsbetingede effekter. Metodikken er anvendelig ved vurdering af de geokemiske og hydrologiske processer der har betydning i grænseflader i naturen og ved formulering af randbetingelser for de matematiske modeller, der beskriver disse processer. En sådan dimensionering af problemstillingen er særlig velegnet, som indledende øvelse før et evt. valg af specialiserede simuleringværktøjer.

REFERENCER

- /1/ Miljøstyrelsen (2003): Nikkelfrigivelse ved pyritoxidation forårsaget af barometerånding/-pumpning. Arbejdsrapport fra Miljøstyrelsen Nr. 5, 2003.
- /2/ Miljøstyrelsen (2006): Binding af nikkel til og frigivelse fra naturlige kalksedimenter. Arbejdsrapport fra Miljøstyrelsen. (ikke udgivet endnu).
- /3/ Roskilde Amt (2005). Nikkelmobilitet i kalk. Delrapport 1 – 3. Udført af Hedeselskabet og Geologisk Institut, KU.
- /4/ GEUS, (1997): Nikkel og fluor i grundvand: Kildeopsporing i Roskilde og Storstrøm Amter. Rapport 1997/115
- /5/ GEUS, (1999): Nikkel i grundvand: København, Køge Bugt og Stevns området.
- /6/ GEUS, 2006: Optimering af DK-model for Københavns Energi. Rapport 2006/8; ed. Troldborg, L. & Henriksen, H.J.
- /7/ Domenico, P.A. and Schwartz, F.W., 1998: Physical and Chemical Hydrology. John Wiley & Sons, Inc. 506 p.