

# Nyt nationalt redoxkort i høj opløsning

Med en ny redoxprobe kan der indsamles flere data om redoxforholdene i undergrunden, men før de kan anvendes nationalt skal de bindes sammen til ét landsdækkende kort. Baseret på machine learning er der udviklet et nationalt kort over redoxgrænsen i en 100 m opløsning. Den anvendte metode giver mulighed for at estimere usikkerheden samt gennemføre en hurtig opdatering baseret på nye observationer.

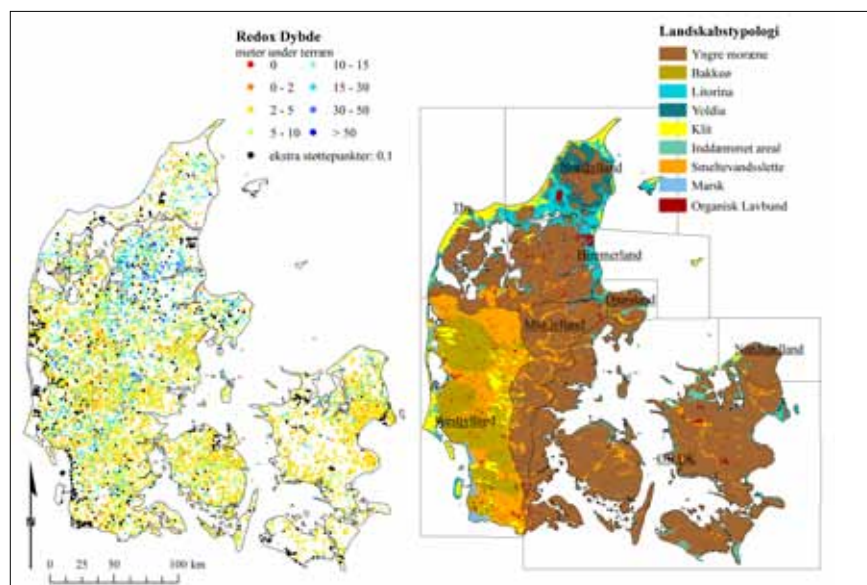
JULIAN KOCH, SIMON STISEN, JENS CHRISTIAN REFSGAARD, VIBEKE ERNSTSEN, PETER R. JAKOBSEN & ANKER L. HØJBERG

## Redoxgrænsen

Under transportvejen fra markens rodzone til fjord- og kystrecipienter bliver cirka 70 % af den udvaskede nitrat fjernet ved hjælp af forskellige processer /1/. Når vandet bevæger sig igennem jordlag, der ikke indeholder ilt (geokemisk set reducerede), kan nitrat omdannes til luftformigt nitrogen ( $N_2$ ). Redoxgrænsen, der beskriver overgangen fra den iltede (oxiderede) til den iltfrie (reducerede) zone, er derfor en væsentlig parameter til at forstå hvor nitratomsætningen finder sted i den mættede zone. I nogle områder findes der såkaldte redox-sekvenser med karakteristiske gentagne skift mellem oxiderede og reducerede lag. Kortet, som er beskrevet her, indeholder ikke disse sekvenser. I stedet bliver kun den øverste redoxgrænse angivet. Beliggenheden af denne øverste redoxgrænse varierer over såvel små som store afstande fra et par meters dybde til mere end 50 m under terræn. På grund af få data kan dybden til redoxgrænsen de fleste steder ikke bestemmes ud fra måledata alene, men kræver en detaljeret analyse med inddragelse af viden om bl.a. geologi, topografi og hydrologi.

## Datagrundlag

Ved overgangen fra oxiderede til reducerede

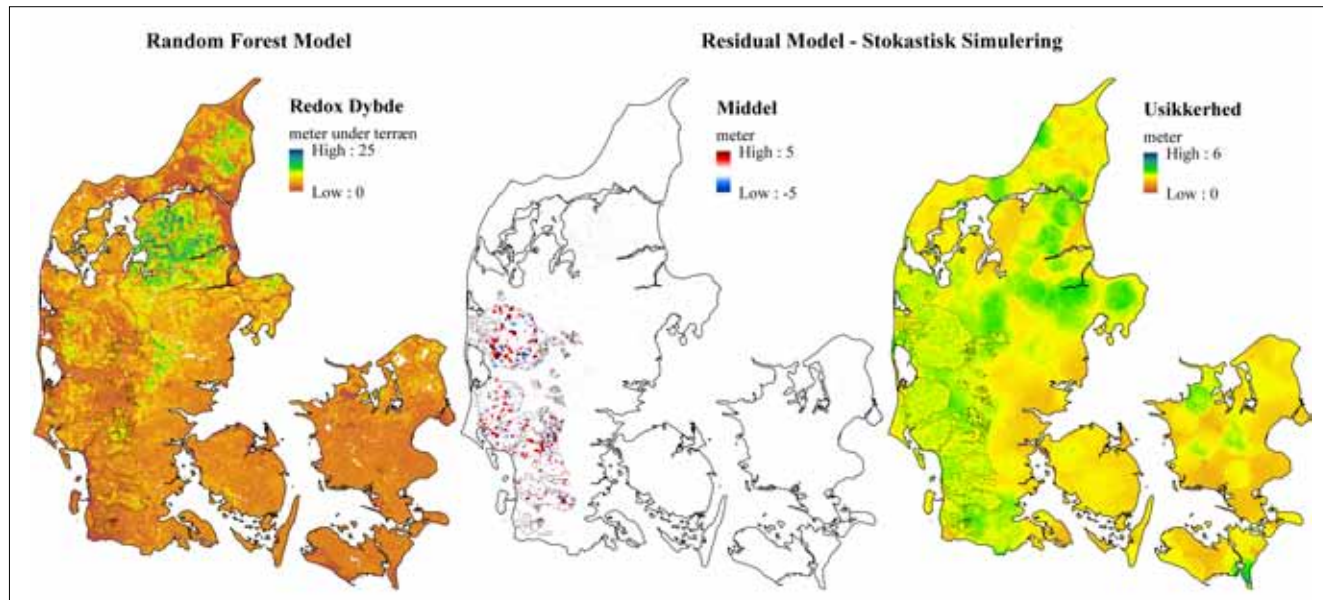


Figur 1. Kort over redoxgrænsens beliggenhed i de 13.000 borer fra Jupiter databasen og de 600 ekstra støttepunkter baseret på ekspertvurdering (venstre). Kort over Danmarks landskabstypologier, georegioner og forekomst af organiske lavbundsjord (højre).

forhold ændres jordens farve fra rød- og gul- og brunlige til grå og sorte nuancer /1/. Farveskift i sediment fra borer er derfor en god indikator for overgangen i redox forholdene og dermed dybden til redoxgrænsen, og sedimentfarve bliver beskrevet for nye borer. I forbindelse med udarbejdelsen af det første redoxkort i 1 km skala /2/ blev der etableret et omfattende datasæt baseret på Jupiter boreringsdatabasen. Dette datasæt er efterfølgende blevet opdateret og indeholder nu ca. 13.000 borer med angivelse af redoxdybden knyttet til oplysninger af jordprøvens farve /3/. På baggrund af disse data tegner der

sig et billede med forholdsvis terrænnære redoxgrænser på Sjælland og store dele af Fyn, Østjylland samt dele af Midtjylland. De dybeste redoxgrænser findes i centrale dele af Jylland, i Himmerland og på Djursland.

For at kunne anvende en datadrevet machine learning metode (næste afsnit), er det nødvendigt, at de tilgængelige data giver en god rumlig dækning og repræsenterer de forskellige typologier, der kan have betydning for redoxgrænsens placering. Efter en første analyse af boreringsdatabasen blev det vurderet, at lavbundslandskaber, som har en karakteristisk overfladenær redoxgrænse, er under-



Figur 2. Redoxdybden baseret på Random Forest (RF) modellen (venstre), middelværdien af 800 plausible realisationer af RF fejlen simulere med en stokastisk model (midten) og standard afvigelsen som udtryk for usikkerheden af de 800 realisationer (højre).

repræsenterede, idet der kun er etableret meget få borer i denne type landskabsselement. Derfor blev der tilføjet 600 støttepunkter med en redoxdybde på 10 cm i lavbundsområder med tørv, marsk samt i inddæmmede arealer /4,5/. Antallet af støttepunkter svarer til den samme datatæthed, som Jupiter data har for den resterende del af landet. Datagrundlaget er vist i figur 1 sammen med opdeling i georegioner og landskabstypologier.

**Machine Learning**

Machine Learning (ML) er en faglig disciplin inden for datalogi og anvendt statistik. ML er datadrevet, dvs. at ML trænes til at finde regler og sammenhænge baseret på eksisterende data. Ved analyser af eksisterende data kan ML lære mønstre om, hvordan redoxgrænsen hænger sammen med andre, såkaldt forklarende, variable. Dermed kan dybden til redoxgrænsen estimeres ud fra de forklarende variable i områder, hvor der er få eller ingen borer med information om redoxgrænsen. Vi anvender en ML metode, som kaldes Random Forest (RF). Den er baseret på en automatiseret opbygning af beslutnings-træer. Beslutningstræer er meget fleksible og kan dermed fange komplekse sammenhænge i store datasæt. Vi har afprøvet en lang række, forskelligartede data for mulige sammenhænge med dybden til redoxgrænsen. Tabel 1 viser de forklarende variable, som indeholder information om redoxgrænsen, og som vi derfor har benyttet til at træne RF modellen til at finde mønstre i de 13.000 borer og 600 støttepunkter. Resultatet er vist i Figur 2. En uafhængig valideringstest viser,

at RF modellen kan beskrive cirka halvdelen af den varians, der findes i træningsdata. Den halvdel, som RF ikke kan forklare, skyldes bl.a. små-skala variabilitet, som ikke kan fanges i 100 m opløsning, usikkerheder på de forklarende variable samt usikkerheder på redoxgrænsen afledt fra sedimentets farve.

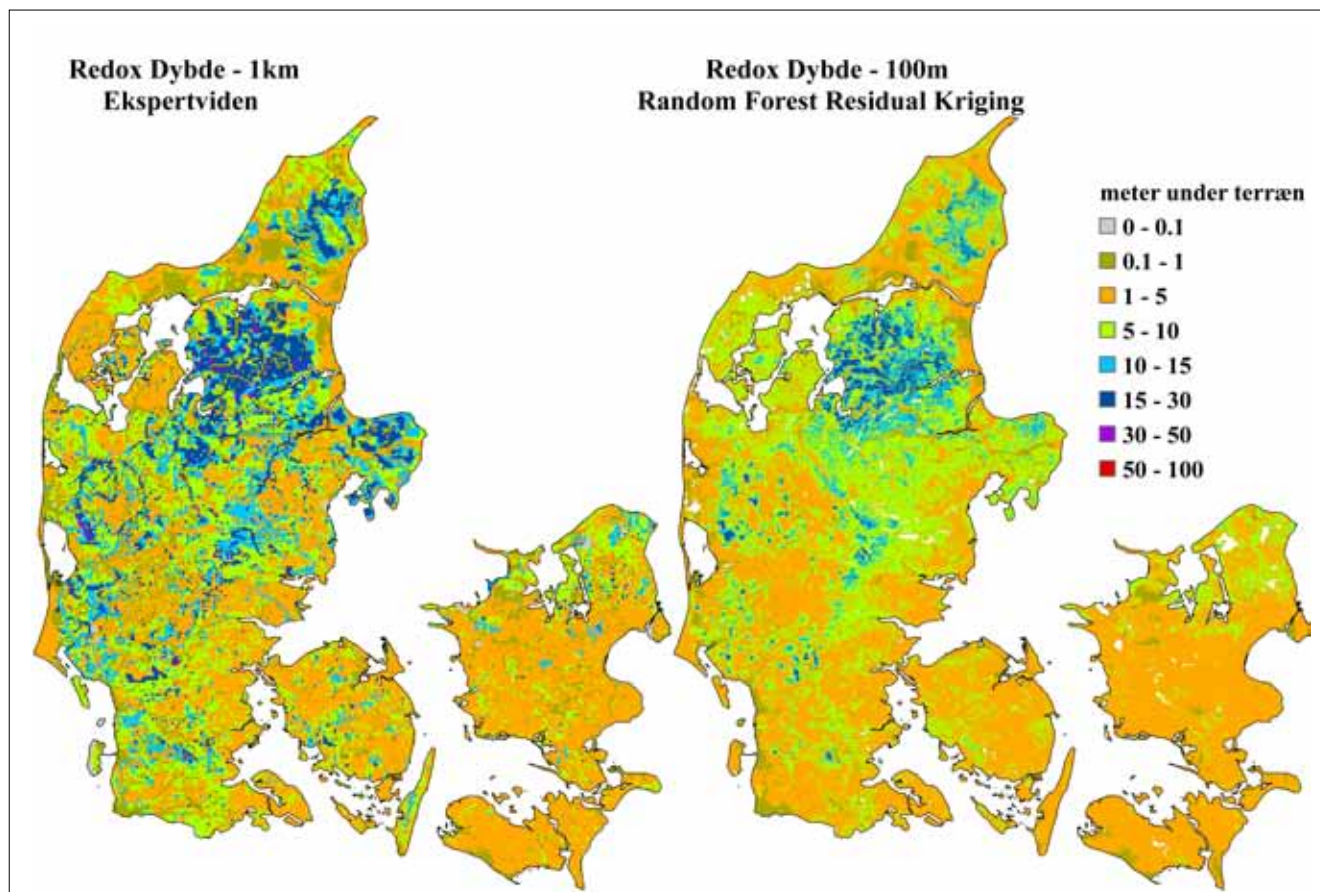
**Stokastisk Model**

I en datadrevet model som RF, vil modellen

give en relation mellem et sæt af forklarende variable og ét udfald, i dette tilfælde dybden til redoxgrænsen. Der er imidlertid ikke en unik relation mellem ét sæt forklarende variable og én redoxdybde, dvs. det samme sæt forklarende variable forskellige steder i landet, kan være associeret til forskellige redoxdybder. Dette betyder i praksis, at estimatet fra RF modellen ikke vil være korrekt alle steder, som også reflekteret i, at modellen kun kan

Tabel 1. Oversigt over de 18 forklarende variable brugt til at opbygge Random Forest modellen. Den oprindelig rumlige opløsning varierer imellem lagene, alle er dog skalerede til det samme 100 m grid. Statistikken af hver variabel giver indtryk af variationen.

Variable	Oprindelig opløsning	middel/min/max/enhed (antal af klasser)
Ler indhold i de øverste 2 m (4 lag)	30m	9,9/0,0/62,4/%
Højdemodel	1,6 m	11,9/-7,4/167,5/m
Opstrøms areal		2,1/0,0/3813,0/m <sup>2</sup>
Hældning		1,1/0,0/24,4/%
Afstand til vandløb		226,3/0,0/3196,3/m
Lavbund klassifikation (organisk/mineralsk)	25m	2 klasser: organisk/mineralsk
DK model - ler tykkelse	500 m	13,5/0,0/355,3/m
DK model – grundvandsdannelse		0,8/0,0/6,2/mm per dag
DK model – min grundvandspejl		5,5/0,0/106,3/m
DK model – middel grundvandspejl		2,1/0,0/73,1/m
Kvartær lagtykkelse	1:100.000	89,0/0,0/342,3/m
Landskabstypologi		8 klasser
Georegion		
Koordinater (utm <sub>x</sub> )	n/a	561622/441805/731605/m
Koordinater (utm <sub>y</sub> )		6202250/6050098/6401698/m



Figur 3. Sammenligning mellem GEUS' 1 km kort over redox dybden baseret på ekspertviden (venstre)/ref/ og det ny 100 m kort beregnet med hjælp af Random Forest i kombination med residual kriging (højre).

forklare ca. halvdelen af variansen i træningsdataene. For at honorere de observerede data, kan RF modellen kombineres med en rumlig model af afvigelsen (residual) mellem RF estimatet og de observerede dybder til redoxgrænsen. RF modellen benyttes således først til at give et estimat på dybden til redoxgrænsen, herefter sammenlignes RF modellen med observationerne, og der laves en model over den rumlige fordeling af residualerne, der adderes til RF estimatet.

I udviklingen af redoxkortet er der anvendt den geostatistiske model kriging til beskrivelse af residualerne, og den samlede metode benævnes Random Forest Residual Kriging (RFRK). Ved anvendelse af kriging er det muligt at tilgodese en eventuel rumlige korrelation i residualerne, hvilket er tilfældet for visse landskabstyper, og kriging af residualerne kan her benyttes til at korrigere RF modellen også for de 100 m beregningsceller, som ikke indeholder boringsdata. I andre områder vil der ikke være en rumlig korrelation i fejlen, og forskellen mellem estimatet fra RF modellen og observationerne vil optræde som "hvid støj". Her vil kriging af residualerne sikre at de observerede data honoreres, men vil ikke kunne forbedre RF estimatet andre steder. Residualerne mellem RF estimaterne og

observationerne vil imidlertid variere i forskellige dele af landet, bl.a. afhængig af hvor stor variation, der er i de forklarende variable. Variationen, eller variansen, i residualerne giver således information om, hvordan usikkerheden ved metoden varierer rumligt.

I forbindelse med kriging etableres et variogram, der beskriver variansen samt eventuel rumlig korrelation af RF residualerne. Dette kan bruges til at genere mange plausible realisationer af fejlen, som sammen med RF estimatet giver et bedste skøn på dybden til redoxgrænsen samt et mål for estimationsusikkerheden. Redoxdata fra borerne honoreres i realisationerne og usikkerheden er lav tæt på observationer og høj længere væk fra borerne. Figur 2 viser, at der i etablering af realisationerne er taget højde for den rumlige forskel i RF fejlen, der i bakkeø landskabet er relativ stor med en betydelig korrelationslængde på ca. 2 km, mens RF fejlen er ukorreleret i resten af landet.

### Vigtigheden af ekspert viden

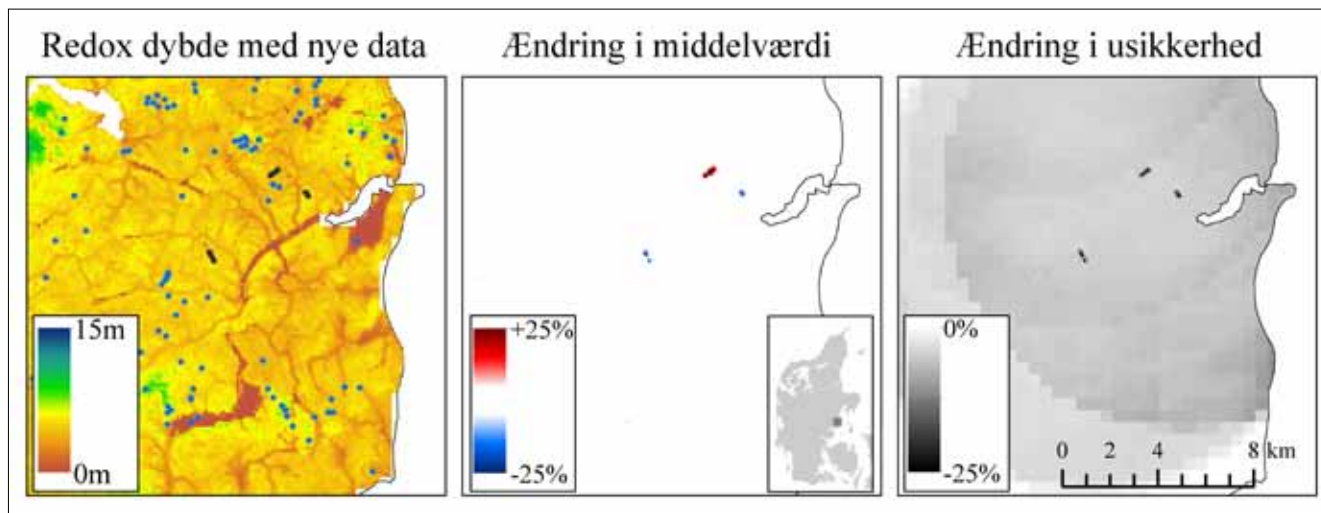
Ekspert viden spiller en væsentlig rolle i udviklingen af kortet over dybden til redoxgrænsen i 100 m opløsning. Geologisk viden indgår eksempelvis i udvidelsen af datagrundlaget med de 600 støttepunkter i

bestemte lavbundsområder. En sådan viden er nødvendig for at guide ML modellen i den rigtige retning og sikre, at resultatet bedst muligt afspejler vores konceptuelle forståelse. Fremover kan der blive behov for at tilføje nye støttepunkter, hvis det viser sig, at kortet indeholder systematiske fejl som følge af manglende data. En sådan opdatering vil være meget nem at gennemføre med RF, idet arbejdet kan automatiseres og resultaterne kan reproducere. Figur 3 sammenligner GEUS' oprindelige 1 km kort med det nyt kort i 100 m. De overordnede mønstre er afspejlet i begge kort, mens den højere opløsning i 100 m kortet giver plads til en bedre beskrivelse af heterogeniteten i landskabet.

### Et levende kort

Vi forstiller os et levende kort, der løbende opdateres, så snart nye data og ny viden er tilgængelig. I sammenhæng med TReNDS projektet blev der udviklet et nyt feltinstrument (en redoxprobe /6/) som giver mulighed for hurtig indsamling af ny information om redoxgrænsens beliggenhed. Under en test kampagne i Norsminde oplandet, gennemført i sommeren 2018, blev den nye redoxsonde brugt til at bestemme redoxprofiler ved 30 lokaliteter fordelt på 3 forskellige marker.





Figur 4. Eksempel på tilføjelse af nye data og opdatering af et lokalt redox kort. Kortet til venstre viser den opdaterede redox dybde, de oprindelige data i blå og de 30 nye observationer i sort. I midten vises ændring af middelværdien af 500 plausible stokastiske realisationer, og ændring af standard afvigelsen er vist til højre. Ændringerne er relative i forhold til det oprindelige kort over redox dybden.

Dybden til redoxgrænsen blev efterfølgende tolket, og den nye viden blev anvendt til at opdatere kortet med redoxdybden for Norsminde oplandet (Figur 4). I middel er det nye kort tilpasset de nye data, fordi de stokastiske realisationer tvinges til at give samme redoxdybde som borerne. Efter inddragelsen af de 30 nye observationer er standard afvigelsen af RF fejlen blevet reduceret, fordi der er nu flere observationer med begrænset variation og dermed begrænset varians i residualerne i oplandet. Denne ny viden bidrager til en reduceret usikkerhed på op til 25% i 100 m celler, som indeholder nye borer, og cirka 10% i et større område. RF modellen blev ikke trænet igen, fordi 30 ekstra observationer ikke ville have nogen tydelig effekt i forhold til de 13.000 observationer, som den oprindelige model er trænet imod. Genberegning med RF

modellen kræver begrænsede ressourcer og vil således kunne opdateres løbende, så snart en tilstrækkelig mængde af ny data/viden er indsamlet. Kortet med det bedste estimat af redoxgrænsens placering vil være offentlig og frit tilgængelig fra GEUS' hjemmeside.

#### Referencer

- /1/ Ernstsén, V. 2001. Principper for beregning af reduktion i jordlagene under rodzonen. Arbejdsrapport nr. 24. Miljøstyrelsen.
- /2/ Ernstsén, V., Jakobsen, P. R., & von Platen, F. 2010. Et første landsdækkende redoxkort, Vand & Jord, 4, 159–160.
- /3/ Ernstsén, V., & von Platen, F. 2015. Opdatering af det nationale redoxkort fra 2006: til brug for den nationale kvælstofmodel. GEUS.
- /4/ Kjærgaard, C., Iversen, B. V., Piil, K., & Knudsen, L. 2015. Reduktion af kvælstof i bunden af rodzonen på tre nordjyske lokaliteter. Plantekongres 2015. Seges, AU og KU.
- /5/ Blicher-Mathiesen, G., Grant, R., Kjærgaard, C., & Jensen, P. N. 2012. Notat om status for N-udledning fra lavbundsarealer. AU.
- /6/ Ernstsén, V., Ejlskov, P., & Vela, I. Y. 2019. Hvor dyb er den oxiderede zone? Vand & Jord, nr. 1:23-25.

JULIAN KOCH (juko@geus.dk) er forsker i Hydrologisk afdeling ved GEUS. SIMON STISEN og ANKER L. HØJBERG er senior forskere i Hydrologisk afdeling ved GEUS. JENS CHRISTIAN REFSGAARD er professor emeritus i Hydrologisk afdeling ved GEUS. VIBEKE ERNSTSEN og PETER R. JAKOBSEN arbejder som senior forskere i Geokemisk afdeling ved GEUS. ANKER L. HØJBERG er leder af TRENDS projektet.