

Förslag till modell av kemikaliespridning i mark anpassad för användning vid räddningsinsats

Kemspill Mark 4.0

Elin Alsterhag

REFERAT

Förslag till modell av kemikaliespridning i mark anpassad för användning vid räddningsinsats Kemspill Mark 4.0

Elin Alsterhag

Vid olyckor med kemikalieutsläpp är det av stor vikt att rätt åtgärder snabbt vidtas, både för människors säkerhet och för att minimera framtida miljökonsekvenser. Räddningsverkets RIB-enhet initierade den här studien vars mål är att ge förslag på modellteknisk förbättring av det befintliga beräkningsprogrammet *Kemspill Mark 3.4*, som ingår i programpaketet *RIB - Integrerat beslutsstöd för skydd mot olyckor*, så att det i framtiden kan användas som beslutsstöd vid räddningsinsats efter kemikalieutsläpp samt vid förebyggande planeringsarbete. En grov vägledning om kemikalies spridning anses vara av stor betydelse för att räddningstjänsten ska kunna fatta rätt beslut vid en insats.

Förslaget som presenteras i denna rapport är en icke platsspecifik spridningsmodell anpassad för vätskor med begränsad löslighet i vatten och ger en grov uppskattning av spridning i homogen och isotrop mark inom några timmar efter ett momentant utsläpp. Modellen ska kunna användas på två nivåer; för att ge en mycket grov uppskattning av spridningen även utan tillgång på uppgifter om markegenskaper, samt med större noggrannhet då informationen finns. Med anledning av detta kommer användaren ges möjlighet att välja bland fördefinierade alternativ eller att ange indata numeriskt för att öka noggrannheten. De fördefinierade valen representeras av typvärden för olika parametrar i modellen.

Den nya modellen i förslaget ger vid angiven tid vertikal och horisontell spridning av fri kemikaliefas, horisontell spridning av löst förorening i vattenfas samt hur stor andel av utsläppet som hålls kvar i marken respektive har avdunstat från spillytan. Dessutom anges kemikaliefasens maximala spridning och hur lång tid det tar för utsläppet att nå grundvattnet. För att tydliggöra modellens osäkerhet för användaren ges utdata som det mest sannolika värdet tillsammans med det största och minsta värdet som är sannolikt.

Ekvationerna som presenteras i rapporten beskriver ett urval av de processer som sker i marken vid ett kemikalieutsläpp. Urvalet har gjorts med utgångspunkt att uppnå tillfredställande resultat inom modellens domän utan att komplicera för användaren och därmed har förenklande antaganden gjorts för att beskriva vissa förlopp medan andra försumrats helt. Förenklingarna har grundats på vedertagna referenser eller på teoretiskt resonemang. Validering av modellresultat samt vissa typvärdens intervall krävs före inkludering i RIB. Jämfört med det befintliga *Kemspill Mark 3.4* har dock stora förändringar föreslagits; fler processer inkluderas, typvärden utvecklas och modellens osäkerhet görs tydlig för användaren. Förändringar tros medföra en signifikant förbättring av modellen.

Nyckelord: RIB, Kemspill Mark, NAPL, Spridningsmodell, Beslutsstöd, Räddningsinsats, Petroleumprodukt, Utsläpp

ABSTRACT

Model of chemical transport in the subsurface designed for use in emergency response Chemical Spill 4.0

Elin Alsterhag

After emergencies involving chemical spills it is of great importance that correct measures are taken with short notice, both for the security of people and in order to minimize future environmental consequences. The *RIB*-unit at the *Swedish Rescue Services Agency* initiated this study, the aim of which is to propose changes to the existing chemical transport calculation tool: *Chemical Spill 3.4*, included in *RIB - Integrated Decision Support for Civil Protection*, so that it can be used for decision support as well as in preventive work. A rough estimation of chemical transport in the subsurface is considered being of great importance when making decisions during emergency response operations.

The proposition presented in this report is a non site specific chemical transport model which is designed to give a rough estimation of NAPL flow in homogenous isotropic soil shortly after an instantaneous release. The model can be used at two levels; both in situations without access to information on subsurface properties, and with more accuracy in situations with knowledge of the included parameters. For that reason the user can choose among predefined alternatives or assign the parameters a numeric value to increase the quality of the model output. The predefined alternatives are represented by default values for different parameters in the model.

Suggested model output are vertical and horizontal transport of NAPL phase, horizontal transport of dissolved chemical in the aqueous phase, as well as the amounts of spill that are evaporated and entrapped in the soil, all at the time specified by the user. Moreover the maximum transport of the chemical phase and time to groundwater pollution are given. To make the uncertainty of the model clear for the user the results are given as the most likely value together with the smallest and largest values that can be expected.

Equations presented in this report describe a selection of subsurface processes which occur after a release of chemicals. The selection is made with the aim to reach satisfying result when the model is used within its domain without making the model complicated for the user. Therefore simplifying assumptions have been made in the descriptions of some processes while some other processes are neglected. Simplifications have been based on recognized references or on theoretical arguments, but the overall performance of the model as well as some of the default input parameters need to be further tested and validated before the new version of the model can be included in *RIB*. However, compared with the existing version *Chemical Spill 3.4* several changes have been suggested; including additional processes, development of default values and making model uncertainty clear to the user. These changes are thought to significantly improve the existing model.

Key words: RIB, Chemical Spill, NAPL, Transport model, Decision support, Emergency response, Petroleum product

Department of Earth Sciences, Uppsala Universitet, Villavägen 16, SE-752 36 Uppsala, Sweden
ISSN 1401-5765

FÖRORD

Den här uppsatsen är ett examensarbete (20 p) för Civilingenjörsprogrammet Miljö- och Vattenteknik vid Uppsala Universitet och har genomförts på uppdrag av Räddningsverkets *RIB*-enhet.

Jag vill passa på att tacka Tore Eriksson på Räddningsverkets *RIB*-enhet som initierade denna studie och som gav mig förtroende att genomföra den. Tack också till min handledare på Räddningsverket Anders Lundberg, min ämnesgranskare på Institutionen för geovetenskaper vid Uppsala universitet Auli Niemi samt alla andra som har svarat på frågor eller gett synpunkter på rapporten. Finn Midbøe, diskussionspartner och bollplank under projektet, förtjänar också ett stort tack och framförallt vill jag lyfta fram Fritjof Fagerlund, min handledare från Institutionen för geovetenskaper vid Uppsala universitet, som under hela arbetet har kommit med snabba och genomtänkta svar på mina frågor och varit till mycket uppskattad hjälp.

Elin Alsterhag
Karlstad i mars 2005

INNEHÅLL

1	INLEDNING.....	1
2	BAKGRUND.....	3
2.1	RIB	3
2.1.1	Kemikaliedatabasen	4
2.1.2	Befintliga Kemspill Mark 3.4	5
2.2	OLYCKOR MED KEMIKALIEUTSLÄPP	7
2.3	SPRIDNINGSPROCESSER VID KEMIKALIEUTSLÄPP	8
2.3.1	Transport.....	9
2.3.2	Retention.....	10
2.3.3	Heterogenitet.....	12
3	METOD.....	13
3.1	INPARAMETRAR.....	14
3.2	UTPARAMETRAR	14
3.3	BERÄKNINGAR	15
4	RESULTAT	17
4.1	INPARAMETRAR.....	17
4.1.1	Spillparametrar	19
4.1.2	Miljöparametrar	20
4.1.3	Klimatparametrar	26
4.2	UTPARAMETRAR	26
4.2.1	Aktuell spridning	27
4.2.2	Tid till grundvattenkontaminering.....	27
4.2.3	Andel kvarhållen respektive evaporerad kemikalie	27
4.2.4	Maximal spridning	27
4.3	BERÄKNINGAR	28
4.3.1	Evaporation från spillyta	28
4.3.2	Potentiell transport av kemikaliefas	32
4.3.3	Maximal spridning av kemikaliefas	38
4.3.4	Retention och aktuell spridning.....	42
4.3.5	Tid till grundvattenkontaminering.....	44
4.3.6	Transport av vattenlöst kemikalie	46
5	DISKUSSION	51
5.1	JÄMFÖRELSE MED BEFINTLIG VERSION AV KEMSPILL MARK.....	51
5.2	FÖRENKLINGAR I KEMSPILL MARK 4.0	52
5.3	YTTERLIGARE ASPEKTER	53
6	REKOMMENDATIONER.....	55
7	FÖRKORTNINGAR.....	57
8	REFERENSER	59

BILAGOR

BILAGA 1: KEMIKALIETABELL I KEMSPILL MARK 3.4

BILAGA 2: JORDARTSTABELL I KEMSPILL MARK 3.4

BILAGA 3: ENHETSKONVERTERING

BILAGA 4: HÄRLEDNING AV EKVATION 1

BILAGA 5: FLÖDESKONTINUITET

1 INLEDNING

Sammanlagt rycker räddningstjänsterna i Sverige ut i genomsnitt fyra gånger per dygn till följd av olyckor med utsläpp av flytande kemikalier, oftast petroleumprodukter (Räddningsverkets Insatsstatistik, 2000-2003). Vid dessa tillfällen är snabba och välgrundade beslut inte bara avgörande för människors säkerhet utan även för framtida miljökonsekvenser av olyckan. Räddningstjänsten är idag inne i ett skede där datoriserat beslutsstöd blir alltmer vanligt och ett beräkningsprogram för kemikaliespridning i mark anpassad för deras behov efterfrågas. Även andra berörda myndigheter vid kemikalieolyckor, så som kommunala miljöförvaltningar, har visat intresse för ett liknande program. De spridningsmodeller som finns på marknaden är dock ofta mycket komplexa och uppfyller inte behoven av enkelhet och snabbhet i användningen som krävs vid olyckssituationer utan är anpassade för mer långsiktig undersökning av specifik plats med god tillgång på data.

Beräkningsprogrammet *Kemspill Mark 3.4* ingår i Räddningsverkets programpaket *RIB - Integrerat beslutsstöd för skydd mot olyckor*, och är i första hand ett pedagogiskt hjälpmedel vid utbildning. Programmet beräknar horisontell och vertikal spridning av både fri kemikaliefas och vattenlöst förorening för vald jordart och kemikalie, samt uppskattar om hela utsläppets fria kemikaliefas kan hållas kvar i marken. Det mycket förenklade programmet syftar inte till att beskriva verkliga situationer utan illustrerar skillnader mellan olika jordarter för att öka användarens förståelse samt ger information om saneringsmetoder.

På uppdrag av Räddningsverkets *RIB*-enhet genomfördes den här studien för att ge förslag på modellteknisk utveckling av det befintliga beräkningsprogrammet *Kemspill Mark 3.4*, så att det i framtiden kan användas som beslutsstöd vid räddningsinsats samt som planeringsverktyg i förebyggande arbete. Målet är att beskriva en modell som ger en grov uppskattning av kemikaliespridning i homogen mark med fokus på förorenande vätskor som är vanligt förekommande vid olyckor med kemikalieutsläpp som t ex bensin och diesel. Val av in- och utparametrar och sättet att presentera dem på ska motsvara användarens behov, och den viktigaste uppgiften är att uppnå rätt balans mellan modellresultatets noggrannhet och enkelhet i användning av programmet.

2 BAKGRUND

2.1 RIB

Räddningsverket producerar programpaketet *RIB* som informationskälla och stöd för alla som jobbar med skydd mot olyckor. Tanken är att samla informationen på ett ställe och att försöka nå ut till så många användare som möjligt, vilket är ovanligt internationellt sett. Användare återfinns inom framförallt räddningstjänst och kommunal förvaltning men även inom polisväsendet samt privata företag. Idag finns cirka 1 150 abonnemang där vart och ett har obegränsat antal användare inom den egna organisationen. *RIB* är windowsbaserat och används vid utbildning, övning, insatsplanering, räddningsinsatser samt tillsyn av transport av farligt gods. Under *Verktyg* i *RIB*s huvudmeny finns beräkningsprogrammet *Kemspill Mark 3.4* som denna uppsats handlar om. Figur 1 visar huvudmenyn och nedan följer en kort presentation av de olika delarna.

Farliga ämnen	Databas över farliga ämnens fysikaliska data tillsammans med information för räddningstjänst och akutvård, kopplingar finns till <i>Bibliotek</i> och <i>Resurs</i>
Bibliotek	Böcker, artiklar och dokument samt lagar, förordningar och författningssamlingar
Resurs	Databas över både materiella och mänskliga resurser hos räddningstjänst, företag och organisationer i Sverige, i form av materiel och experter för olika typer av olyckor, databasen finns bara i den version av <i>RIB</i> som ges ut till myndigheter
Verktyg	Innehåller <i>Kemspill Mark 3.4</i> och andra beräkningsprogram för bl a spridning av gasutsläpp, samt GIS-verktyg för kommunal riskhantering, konsekvensanalyser vid akuta giftutsläpp mm
Transport/Tillsyn	Regelverk för väg- och järnvägstransport av farligt gods
Statistik	Insatsstatistik från kommunal räddningstjänst
Utbildning Litteratur	Utbildningsmaterial om bl a bränder, miljö, kemi och sjukvård
Utbildning Program	Om bl a oljeutsläpp, bränder och radioaktiva ämnen
OP-RIB	Ett urval av delarna i <i>RIB</i> , utvecklade för mobil användning i t ex utryckningsfordon.



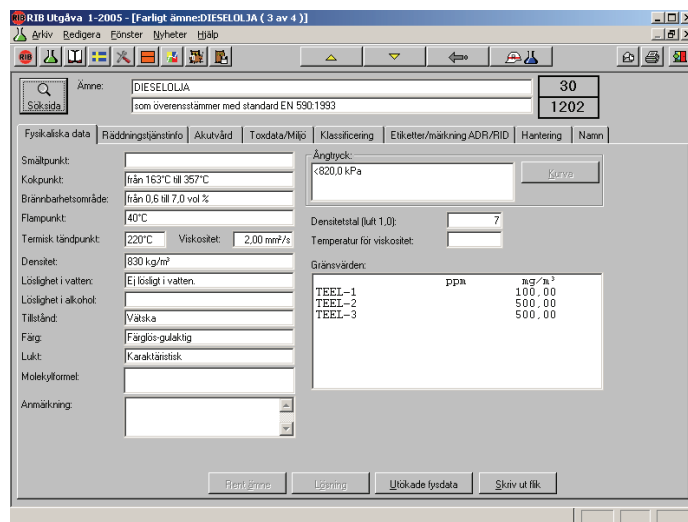
Figur 1. RIBs huvudmeny.

2.1.1 Kemikaliedatabasen

Som tidigare nämnts finns en kemikaliedatabas i RIB som kallas *Farliga Ämnen*. Drygt 5 000 kemikalier finns representerade med uppgifter om fysikaliska data, klassificering, rekommenderad akutvård, toxicitetsdata med avseende på miljö samt information för räddningstjänsten om rekommenderad skyddsutrustning och förstahandsåtgärder vid utsläpp. Det finns idag ingen koppling mellan *Kemspill Mark 3.4* och kemikaliedatabasen men i framtiden finns möjlighet att länka samman dem så att informationen kan användas direkt i spridningsmodellen. I Tabell 1 presenteras ett urval av de fysikaliska data som finns samlade i databasen. Specifik värme och ångbildningsvärme finns endast för cirka en tredjedel av kemikalierna och viskositet finns bara för hälften, men målet är att kontinuerligt komplettera databasen tills fullständiga uppgifter finns för samtliga kemikalier. För att underlätta för användaren kan kemikalier inte bara sökas efter namn och CAS-nummer¹ utan också UN-nummer eller farlighetsnummer som båda finns på transportfordons orange skyltar, eller efter internationella klassningssystemen för transport av farligt gods på väg (ADR), järnväg (RID), vatten (IMDG) och med flyg (ICAO).

Tabell 1. Urval av fysikaliska data i RIBs kemikaliedatabas.

Parameter	Enhet
Densitet	[kg m ⁻³]
Viskositet	[mm ² s ⁻¹]
Kokpunkt	[°C]
Smältpunkt	[°C]
Ångtryck	[kPa]
Löslighet i vatten	[Mass-%]
Molekylvikt	[g mol ⁻¹]
Specifik värme (gasfas)	[J kg ⁻¹ K ⁻¹]
Specifik värme (vätskefas)	[J kg ⁻¹ K ⁻¹]
Ångbildningsvärme	[J kg ⁻¹]



Figur 2. Kemikaliedatabasen *Farliga Ämnen* i RIB.

¹ Internationellt identifieringsnummer för kemikalier enligt Chemical Abstract Service.

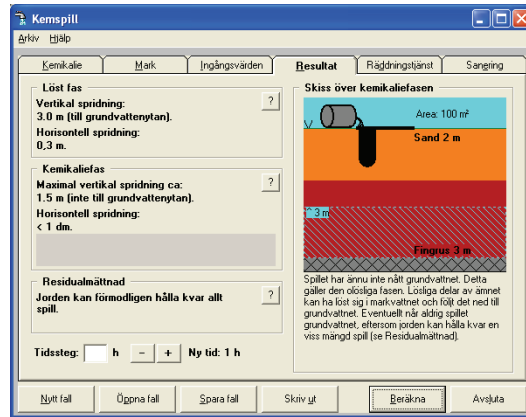
2.1.2 Befintliga Kemspill Mark 3.4²

Kemspill Mark 3.4 är ett verktyg i *RIB* som beräknar spridning i mark vid ett kemikalieutsläpp. Enligt en enkätundersökning bland *RIB*-användarna är beräkningsprogrammet den funktion under *Verktyg* som används mest och användare återfinns inom såväl räddningstjänst som kommun och transportindustri (Eriksson och Sachs, 2004). Samma undersökning visar även att programmet, som utvecklats i syfte att ge en pedagogisk illustration vid utbildning, numera även används vid räddningsinsatser.

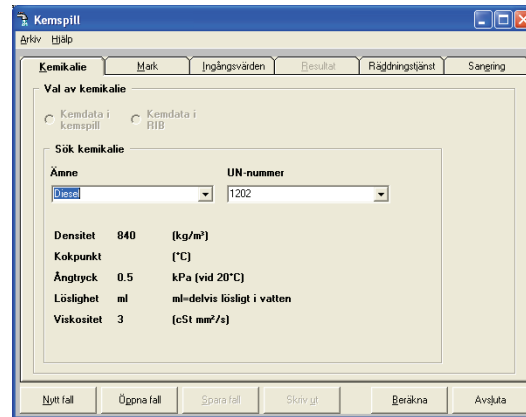
Spridningsmodellen beräknar vertikal och horisontell spridning för fri kemikaliefas och löst kemikalie i vattenfas, samt retention vid ett utsläpp. Resultatet ges tillsammans med en kort förklarande text samt en skiss över kemikalies spridning och möjlighet finns att stega fram med vald tidsperiod för att undersöka framtida utbredning, se Figur 3. Utöver beräkningsmodellen finns även information för räddningstjänsten om olika saneringsmetoder vilka är fristående och inte kopplade till vald kemikalie och jordart.

För att använda beräkningsmodellen krävs indata avseende utsläpp, mark och grundvattenyta under flikarna *Kemikalie*, *Mark* och *Ingångsvärden* i figurerna till höger. Från en lista med ett nittioatal kemikalier (se Bilaga 1) väljer användaren, antingen efter namn eller efter UN-nummer, en kemikalie och anger sedan utsläppets volym, spillarea samt hur lång tid som förlöpt sedan spillet. Användaren anger sedan jordart genom att välja bland sju fördefinierade alternativ och kan ange ett eller två lager. Om två lager väljs ska deras mäktighet anges medan ett lager antas vara oändligt djupt. Jordens egenskaper representeras med typvärden för hydraulisk konduktivitet och porositet om dessa inte är kända (se Bilaga 2).

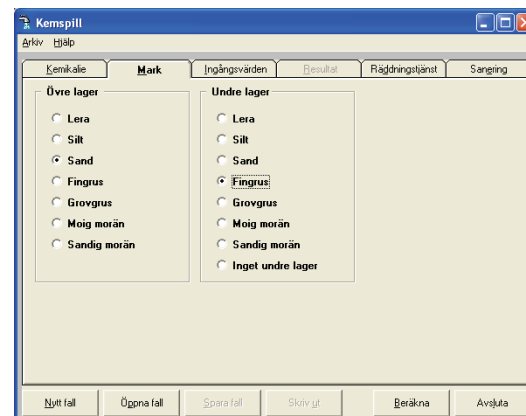
² Den första versionen av *Kemspill Mark* utformades av Fredrik Delblanc vid Uppsala Universitet 1991 och ett år senare av Jonas Gierup på SGU.



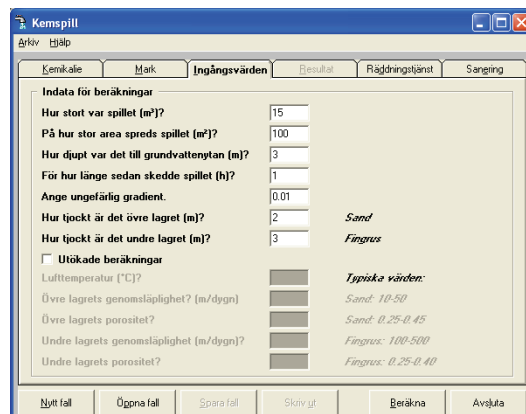
Figur 3. Resultat från befintliga *Kemspill Mark*.



Figur 4. Val av kemikalie under *Kemikalie*.



Figur 5. Val av jordart under *Mark*.



Figur 6. Indata om utsläpp mm under *Ingångsvärden*.

Andra obligatoriska indata är grundvattenytans djup och lutning. Om jordens egenskaper är kända kan även lufttemperatur anges, vilket resulterar i ett meddelande som förklarar att hela spillet kommer avdunsta om temperaturen är högre än kok-punkten för det aktuella utsläppet.

Beräkningarna som ligger till grund för resultatet baseras på Darcys lag med antaganden om att vertikal totalpotentialgradient är lika med ett och att horisontell gradient är lika med noll ovan grundvattenytan. Då utsläppet når grundvattnet sätts horisontell totalpotentialgradient till grundvattenytans lutning och horisontell spridning beräknas. Om kemikalien densitet är större än den för vatten förklarar en text att vertikal transport³ sker ned till berggrunden där kemikalien följer dess lutning, men horisontell spridning beräknas ändå från det att grundvattenytan nås för samtliga kemikalier.

Vertikal och horisontell transport beräknas parallellt både för fri kemikaliefas och för vattenlöst förorening. Enda skillnaden i beräkningarna är att kemikalien viskositet utnyttjas för att kunna använda vattens hydrauliska konduktivitet även vid beräkning av kemikaliefasens transport. Mättad hydraulisk konduktivitet används utan korrigering i den omättade zonen.

Retentionen, d v s den volym kemikalie som hålls kvar i marken, sätts i modellen till tio procent av markvolymen mellan spillarea och grundvattenytan, oavsett kemikalietyp, jordart och hur långt föroreningen har transporterats. Maximal transport av kemikaliefas i vertikalled beräknas med utgångspunkt från retentionen men motsvarande begränsning saknas för horisontell transport som fortsätter i oändlighet.

I programkoden till *Kemspill Mark 3.4* har även en del fel upptäckts. Bland annat saknas jordens porositet i beräkningen av horisontell spridning och viskositeten är kvadrerad i uttrycket för kemikaliefasens horisontella transport.

³ Transport avser i denna rapport en sträcka som föroreningen har förflyttats.

2.2 OLYCKOR MED KEMIKALIEUTSLÄPP

Mellan åren 2000 och 2003 ryckte som tidigare nämnts räddningstjänsterna i Sverige sammanlagt ut i snitt fyra gånger per dag på grund av olyckor med utsläpp av flytande kemikalier. Den största delen av incidenterna inträffade från vägfordon i samband med transport eller parkering. Utsläpp av diesel, bensin och övriga petroleumprodukter utgjorde 75 % av kemikalieutsläppen⁴, varav de flesta var diesel. Spill av diesel och bensin var dock små, i genomsnitt 2 respektive 0,3 m³ per tillfälle, medan utsläpp av övriga petroleumprodukter var större, i medeltal 12 m³. Utsläpp av övriga brännbara vätskor, som t ex färg och metanol, var sällsynta och utgjorde bara 4 % av kemikalieutsläppen⁵ men jämfört med utsläpp av petroleumprodukter var de stora, ca 30 m³ per tillfälle. (Räddningsverkets insatsstatistik, 2000-2003)

Över 6 000 m³ kemikalier i flytande form läckte ut per år mellan 2000 och 2003 av vilket räddningstjänsten samlade upp ca 70 %. Den vanligaste metoden för uppsamling var sorption, vilket innebär att kemikaliespill ovan mark sugts upp av ett sorptionsmedel, t ex sågspån, torv eller ett syntetiskt framställt material, för att sedan lättare kunna samlas in. Vid var femte insats vid kemikalieutsläpp dokumenterades spridning till vatten (ytvatten, dricksvattentäkt eller VA-system) samtidigt som det bedömdes att riskerna för motsvarande spridning var överhängande vid en tredjedel av insatserna. (Räddningsverkets insatsstatistik, 2000-2003)

Vid en olycka får räddningstjänsten larm från SOS eller kommunal larmcentral och ansvarar därefter för insatsen som avslutas då den akuta faran för människors liv och hälsa, miljö samt egendom är över. Statistik från år 2000 till 2003 visar att det i genomsnitt tog knappt en halvtimme från larm tills dess att räddningsinsats påbörjats och ytterligare 1,5 timmar tills insatsen var över (Räddningsverkets insatsstatistik, 2000-2003). Vid olyckor med omfattande skador kopplas en restvärdesledare in som representerar försäkringsbolaget och fattar beslut om nödvändiga åtgärder. Restvärdesledaren är vanligtvis befäl från räddningstjänsten som utöver sin vanliga tjänst är anställd av Larmtjänst AB, vilket är en sammanslutning av de stora försäkringsbolagen. I de fall efterarbeten krävs, t ex i form av provtagning och sanering, är det restvärdesledaren som fattar beslut och anlitar entreprenör eller konsult för att utföra arbetet. Kommunens miljökontor har tillsynsansvar och ser till att efterarbetet utförs på ett tillfredställande sätt.



Figur 7. Förardel vid tankbilsolycka utanför Strängnäs (Foto av Eskilsson, 2004).



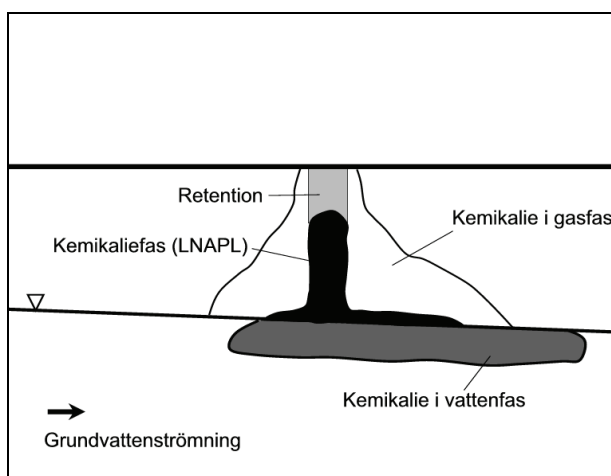
Figur 8. Släp vid samma tankbilsolycka då 29 m³ bensin läckte ut (Foto av Eskilsson, 2004).

⁴ Beräknat för antal insatser vid kemikalieutsläpp, gasutsläpp borträknade.

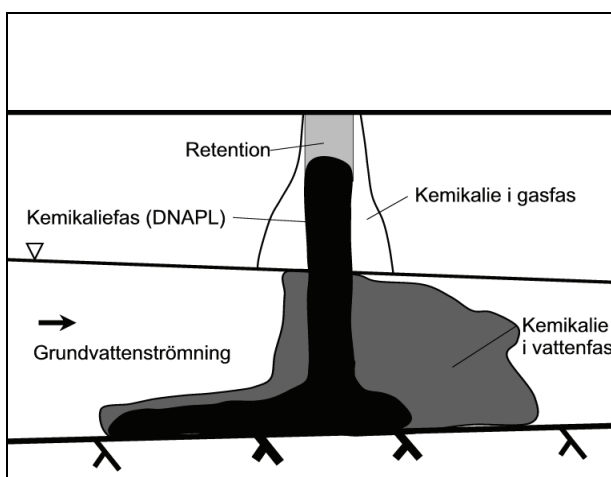
⁵ Beräknat för antal insatser vid kemikalieutsläpp, gasutsläpp borträknade.

2.3 SPRIDNINGSPROCESSER VID KEMIKALIEUTSLÄPP

De flesta utsläpp av flytande kemikalier består av petroleumprodukter (se Avsnitt 2.2) och en gemensam egenskap för dem är begränsad löslighet i vatten⁶. En kemikalie med låg löslighet i vatten förekommer i marken som ren kemikaliefas (NAPL – Non-Aqueous Phase Liquid), i gasfas, löst i vattenfas, som immobil residual eller bunden till markpartiklar genom sorption. Fördelningen mellan de olika tillstånden beror på kemikalien och jordens egenskaper samt meteorologiska förutsättningar. Transport av ett utsläpp sker separat i var och en av faserna, samtidigt som dessa ständigt strävar efter jämvikt med varandra, vilket resulterar i ett kontinuerligt utbyte dem emellan. Att petroleumprodukter kan bestå av ett hundratal komponenter med olika egenskaper vad gäller löslighet, flyktighet, sorption etc, komplicerar spridningsmönstret och betyder att komponenternas transport kommer att ske olika fort (Fagerlund och Niemi, 2004). De följande avsnitten beskriver närmare transport och kvarhållning av kemikalie i de olika faserna och i Figur 9 och Figur 10 ges schematiska bilder över spridning av kemikalier som är lättare (LNAPL - Light Non-Aqueous Phase Liquid) respektive tyngre än vatten (DNAPL - Dense Non-Aqueous Phase Liquid).



Figur 9. Transport efter utsläpp med kemikalie som är lättare än vatten (LNAPL) (Efter Domenico och Schwartz, 1997).



Figur 10. Transport efter utsläpp med kemikalie som är tyngre än vatten (DNAPL) (Efter Domenico och Schwartz, 1997).

⁶ Vätskor med löslighet mindre än 1 % räknas som svårslösliga (RIB, 2004).

2.3.1 Transport

Gemensamt för fri kemikaliefas och kemikalie i vatten- och gasfas är att transporten domineras av advektion i de flesta jordtyper. Advektion beskrivs vanligen med ekvationer baserade på Darcys lag och innebär att spridning sker mot lägre totalpotential med fluidens medelhastighet, vars storlek bestäms av hydraulisk konduktivitet och totalpotentialgradientens storlek (Domenico och Schwartz, 1997). I en jord med heterogen konduktivitet kommer dock spridningsriktningen även att påverkas av den hydrauliska konduktiviteten och transport sker till största del genom jord med hög konduktivitet (Grip och Rodhe, 1994). Totalpotentialen är summan av tryck- och lägespotential i en punkt, vilket ovan grundvattnet gör den beroende av vattenhalten. Den hydrauliska konduktiviteten beror i sin tur både på jordens porstorleksfördelning och vattenhalt samt vätskans viskositet och densitet (Grip och Rodhe, 1994).

Vid ett kemikalieutsläpp kan vatten, luft och kemikalie existera samtidigt i den omättade zonen och i den mättade zonen kan både vatten och kemikalie vara närvarande. De olika faserna konkurrerar om utrymmet i marken och transporten påverkas av fördelningen mellan dem, deras relativa mätnadsgrad⁷. Nettoresultatet blir minskad rörlighet för samtliga faser (Mercer och Cohen, 1990). Transport av fasen med störst mätnadsgrad i en punkt hindras minst och en fas som nått residualmätnad⁸ kommer inte transporteras alls. Nedan följer en kort beskrivning av kemikalietransport i de olika faserna.

Kemikaliefas

Spridningen av kemikaliefasen beror till stor del på jordegenskaper och kemikalies densitet. Tyngdkraften driver den vertikala transporten, som dominerar i en homogen omättad zon, och luft trängs undan på grund av densitetsskillnaden. Kapillärkrafter ger dock upphov till spridning i alla riktningar, vilket leder till en viss breddning av plymen och i en heterogen mark kan skikt med låg permeabilitet bidra till att horisontell spridning dominerar. Om, och i så fall när, grundvattenytan nås spelar kemikalies densitet en avgörande roll för den fortsatta spridningen. Kemikalier med lägre densitet än vatten flyter på grundvattenytan och bildar en lins, medan de med högre densitet än vatten fortsätter ända ned till berggrunden. Vid berggrunden följer kemikalien dess lutning och spricksystem. Förutsättning för att spridning av kemikaliefasen ska ske är att residualmätnaden överskrids (läs mer i Avsnitt 2.3.2) samt i vattenmättad jord att kapillärtrycket överstiger porinträngningstrycket⁹ (Domenico och Schwartz, 1997).

Löst förorening i vattenfas

I enlighet med kemikalies löslighet som beror av temperaturen kommer en del av utsläppet att lösa sig i markvattnet. Som nämnts ovan domineras transporten av advektion och går mot områden med högre hydraulisk konduktivitet och lägre totalpotential, vilken styrs av vattenhalten i den omättade zonen. Efter, eller under, nederbörd väntas transporten vara riktad nedåt i den omättade zonen mot grundvattnet medan den vid torra förhållanden med vattenförluster vid markytan, i form av evaporation och växters transpiration, kan vara uppåtriktad (Grip och Rodhe, 1994).

⁷ Mätnadsgrad avser i denna rapport den andel av porvolymen som en fas upptar.

⁸ Residualmätnad är den lägsta mätnadsgrad en vätska kan nå vid dränering, dvs den mätnadsgrad då en ickevätande kemikalie blir diskontinuerlig och därmed immobil, respektive den mätnadsgrad då en vätande kemikalie (eller vatten) hålls av starka kapillärkrafter i de minsta porerna och därmed blir immobil. Uttrycks som andel av porvolym.

⁹ Kapillärtrycket är tryckskillnad mellan kemikalie- och vattenfas och porinträngningstrycket är det tryck som krävs för att vatten ska dräneras ur en vattenmättad jord.

Spridningshastigheten tilltar snabbt med ökad vattenhalt då hastigheten är proportionell mot den hydrauliska konduktiviteten som följer vattenhalten (Grip och Rodhe, 1994) och således ökar risken för snabb kontaminering av grundvattnet vid nederbörd. Då grundvattnet nåtts sprids föroreningen med dess strömning, vilken vid homogena och isotropa förhållanden¹⁰ avseende hydraulisk konduktivitet är riktad mot sänkor i topografin (Freeze och Cherry, 1979). Spridningsfronten för en förorening är snarare diffus än skarp vilket beror på dispersion och diffusion. Dispersion innebär att vissa partiklar transporteras snabbare än andra till följd av olika vägar genom jorden medan diffusion är den spridning som strävar efter att utjämna koncentrationsskillnader. I jord med låg hydraulisk konduktivitet kommer advektionstransporten att hämmas och diffusion kan dominera den mycket långsamma spridningen (Halmemies m fl, 2003).

Förorening i gasfas

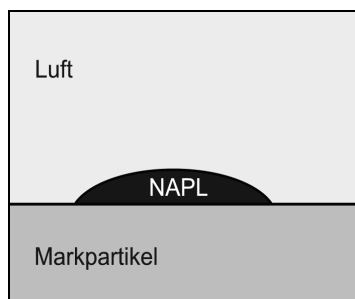
Vid spill ovan mark kommer avdunstning att ske från spillytan, hur stor del som övergår till gasfas bestäms av kemikalins flyktighet samt temperatur- och vindförhållanden. Avdunstning sker även från den omättade zonen, både från fri kemikaliefas och från löst kemikalie i vattenfas, med hastigheter som beskrivs av Raoult's respektive Henrys lagar (Halmemies m fl, 2003). Förorening i gasfas kan transporteras bort från den ursprungliga källan och kommer slutligen att gå upp i atmosfären, kondenseras eller genom sorption fästa till markpartiklar (Mercer och Cohen, 1990).

2.3.2 Retention

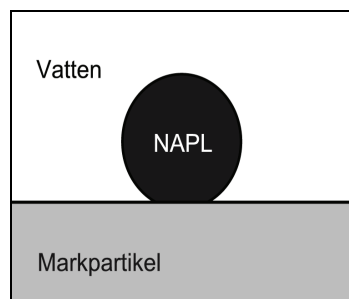
På väg ned genom marken kommer en liten mängd av kemikaliefasen, motsvarande residualmättnad och sorption, hållas kvar i marken vilket leder till att volymen som transporteras nedåt blir mindre och mindre. Förutsättningen för att kemikaliepelaren ska nå grundvattnet är att utsläppet är tillräckligt stort. Orsak till residualmättnad är att ickevätande vätskor isoleras i små droppar utan kontakt med varandra och att vätande vätskor hålls med kapillärkrafter i de små porerna, vilket gör att transport uteblir. Residualmättnaden varierar för olika kemikalier, jordarter och vatteninnehåll och uttrycks vanligtvis som volym NAPL genom porvolymen. Enligt Mercer och Cohen (1990) är typiska värden för NAPLs i den omättade zonen 10 till 20 % av markens porvolym, medan motsvarande värden för den mättade zonen är högre, mellan 15 och 50 %. Spridningen mellan olika källors uppgifter om residualmättnad är dock mycket stor på grund av osäkerhet i mätmetoderna.

Anledningen till den mättade zonens större retention är bland annat att densitetsskillnaden mellan NAPL och luft (omättad zon) är större än mellan NAPL och vatten (mättad zon) vilket bidrar till större dränering ovanför grundvattenytan (Mercer och Cohen, 1990). En annan orsak till skillnaden är vätning, d v s en fluids attraktion till en yta relativt en annan fluid. NAPLs är vätande i förhållande till luft, se Figur 11, och tenderar därför att spridas till närliggande små porer medan de större porerna dräneras vilket inte är fallet i den mättade zonen där NAPLs är ickevätande, se Figur 12, och därmed fastnar i de större porerna där en mer betydande volym kan hållas kvar (Mercer och Cohen, 1990). I Figur 13 och 14 åskådliggörs skillnaden mellan residualmättnad för vätande och ickevätande vätskor. På motsvarande sätt som beskrivits kommer även vattenfasen lämna efter sig en vattenresidual i den omättade zonen enligt Figur 13, men eftersom marken redan innehåller en vattenresidual när utsläppet sker kommer praktiskt taget alltid en vattenlös kemikalie att nå grundvattnet.

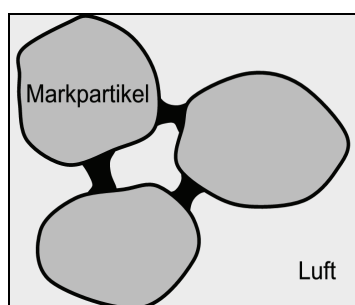
¹⁰ Vid homogen och isotrop mark är den hydrauliska konduktiviteten lika stor på alla platser samt lika i alla riktningar.



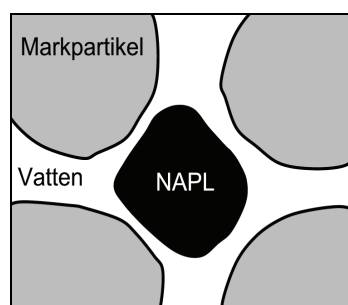
Figur 11. Vätande fasens beteende (Efter Domenico och Schwartz, 1997).



Figur 12. Icke vätande fasens beteende (Efter Domenico och Schwartz, 1997).

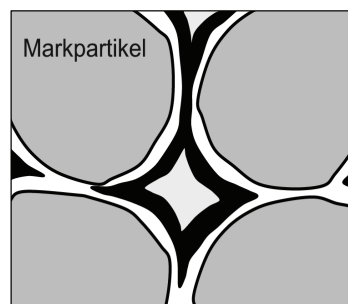


Figur 13. Residualmättnad för NAPL (svart) i luft. Motsvarande gäller för vatten i luft. (Efter Domenico och Schwartz, 1997)



Figur 14. Residualmättnad för NAPL i vatten, d v s mättad zon (Efter Domenico och Schwartz, 1997).

Utöver residualmättnaden för vatten- och kemikaliefas kommer ytterligare retention ske på grund av sorption som inkluderar både adsorption¹¹, absorption¹² och kemisorption¹³. Sorption av den fria kemikaliefasen är av liten betydelse jämfört med vattenfasen på grund av att vatten vanligtvis är vätande i naturliga system, vilket betyder att markpartiklarna täcks av en tunn ytfilm av vatten som separerar den fria fasen från de aktiva ytorna på jordkolloiderna (Falta, 2002). Detta illustreras i Figur 15 där NAPL i omättad zon avbildats.



Figur 15. NAPL (svart) i omättad zon. Vatten (vitt) närmast markpartiklarna, därefter NAPL (svart) och luft (ljusgrått) längst från markpartiklarna (Efter Jensen 2002a).

¹¹ Kemikalien fästs på markpartikelns yta.

¹² Kemikalien diffunderar in i markpartikeln.

¹³ Kemisk reaktion binder kemikalien till markpartikelns yta.

Kvarhållning i mark beror även på intensiteten med vilken utsläppet skett. Ett långsamt utsläpp medför att kemikalien följer den mest permeabla vägen vilket kan vara en enda kanal, eller ett nätverk av kanaler. Den markvolym kemikalien passerar begränsas härmed, vilket leder till att mängd kvarhållen kemikalie blir relativt liten och att en stor andel av det ursprungliga spillet når grundvattnet. Stor volym utsläppt under kort tid ger däremot snabb transport med maximal utbredning i horisontellt led vilket resulterar i att en större mängd NAPL hålls kvar i marken. (Domenico och Schwartz, 1997)

2.3.3 Heterogenitet

Ovan har teoretisk spridning vid ett kemikalieutsläpp i homogen mark beskrivits men den verkliga transporten kompliceras ytterligare på grund av heterogeniteter så som sprickor i mark och berggrund, nedgrävda rör och ledningar etc. Dessa strukturer ökar spridningshastigheterna vid ett utsläpp avsevärt och kan även påverka spridningsriktningen. Som nämndes i Avsnitt 2.2 inträffar de flesta olyckor med utsläpp av kemikalier i samband med transport eller parkering av vägfordon, vilket sannolikt innebär att de sker på eller vid vägar. Vägyta, fyllnadsmaterial, dränering mm leder till transport som skiljer sig stort från det förenklade homogena fallet.

Som nämnts tidigare följer spridning den hydrauliska konduktiviteten och heterogenitet kan leda till att kemikalien ansamlas på horisontella linser med lägre permeabilitet. Dessa ansamlingar tillsammans med den fastlagda residualmättnaden kommer under lång tid verka som en sekundär källa då kemikalien förångas eller löser sig i infiltrerande vatten som transporterar den vidare.

3 METOD

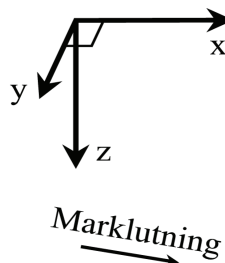
Nya *Kemspill Mark 4.0* anpassas enligt uppdrag från Räddningsverket för räddningsinsatser vid olyckor med kemikalieutsläpp och ska kunna användas för alla platser i Sverige, vilket begränsar antalet obligatoriska inparametrar och kräver kraftiga förenklingar av verkligheten. Syftet är dock inte att skapa en modell som beskriver kemikalietransport i mark fullständigt utan att ge en snabb och grov uppskattning av spridningen, användbar som beslutsstöd i en räddningsinsats första fas. Modellen ska också anpassas för användare utan naturvetenskaplig utbildning. Litteraturstudier och samtal med räddningstjänstpersonal ligger till grund för studien.

Med bakgrund av insatsstatistiken i Avsnitt 2.2 anpassas modellen för NAPLs och spridningsförloppet inom några timmar efter ett utsläpp som antas vara momentant. Modellen beskriver spridningen i en homogen isotrop jord och som komplement till utparametrarna bör i framtiden information finnas om faktorer som gör att den faktiska spridningen skiljer sig från det homogena fallet. Punkterna till höger presenterar modellens domän d v s de förutsättningar som modellen utvecklats för och innan användning ska valideras för.

I rapporten används ett kartesiskt koordinatsystem där x - och y -axeln är vinkelräta mot varandra i horisontalplanet med z -axeln vertikalt nedåtriktad, vinkelrät mot planet. Positiv x -axel är riktad åt det håll marken lutar, d v s mot sänkor i topografin. En skiss av koordinatsystemet visas i Figur 16. Eftersom en vätska enligt denna definition kommer att flyta åt positiva x och z vid ett utsläpp används absolutbeloppet av Darcys lag där denna ekvation förekommer.

Domän för *Kemspill Mark 4.0*

- Momentant utsläpp av flytande kemikalie med begränsad löslighet
- Spridning några timmar efter utsläpp
- Homogen och isotrop mark
- Svenska förhållanden



Figur 16. Ett kartesiskt koordinatsystem används.

3.1 INPARAMETRAR

Nya *Kemspill Mark 4.0* ska kunna användas både med mycket lite information om den plats där utsläppet skett och i situationer med mer tillgång på data. För att göra användning i det första fallet möjligt skapas fördefinierade alternativ där användaren kan välja det mest rimliga. Alternativen representeras av typvärden vilka består av det mest sannolika värdet för olika parametrar samt ett intervall med minsta respektive största värde som antas sannolikt, i de fall då sådana hittats. Typvärden för kemikalieegenskaper hämtas från databasen *Farlige Ämnen i RIB* där varje förorenande kemikalie ses som en enhet vars egenskaper beskrivs med medelvärden för ingående komponenter, typvärden för jordegenskaper och klimatparametrar erhålls från litteraturstudier. Generaliseringarna som görs i samband med de fördefinierade alternativen ger större osäkerhet i resultatet varför samtliga inparametrar även kan ges numeriskt om användaren har tillgång till data. För att hjälpa användaren beskrivs de fördefinierade alternativen med ord eller illustreras med skisser och så ges information om hur numeriska indata enklast mäts eller uppskattas.

Innan den nya modellen inkluderas i *RIB* bör mer tid läggas på val av typvärden och åtgärder för att minska deras intervall rekommenderas.

3.2 UTPARAMETRAR

Utparametrarna för modellen väljs så att i första hand räddningstjänstens behov vid räddningsinsats tillgodoses och för detta används Bengt Wingstedt och Ulf Cervinus vid Uddevalla Räddningstjänst, Claes-Otto Åkesson vid Södra Älvsborgs Räddningstjänstförbund samt Christer Andersson vid Karlstadregionens Räddningstjänstförbund som referenser i studien.

Bland annat på grund av osäkerhet i de typvärden som antagits kommer *Kemspill Mark 4.0* inte att ge ett exakt resultat och för att göra detta tydligt för användaren anges utparametrarna som det mest sannolika värdet tillsammans med ett intervall. Alla beräkningar utförs därför tre gånger; en gång med det mest sannolika värdet för varje inparameter och en gång vardera med intervallgränserna för varje inparameter. Det är värt att poängtera att de typvärden som ger den nedre intervallgränsen för utparametrarna inte nödvändigtvis är det minsta värdet för varje inparameter eftersom vissa är negativt korrelerade. De intervall som skapas på detta sätt förutsätter att de indata som användaren angivit numeriskt och de typvärden där intervall inte hittats är korrekta, vidare förutsätts att marken är homogen samt att de antaganden och förenklingar som gjorts i ekvationerna är riktiga, det är således inte intervall för den verkliga kemikalietransporten.

Innan *Kemspill Mark 4.0* inkluderas i *RIB* krävs att modellresultatet valideras mot uppmätta data från verkliga utsläpp, laborieförsök alternativt mot data från mer avancerade modeller så som t ex T2VOC (Falta m fl, 1995)¹⁴. Det vore också önskvärt att med vägledning av valideringsresultatet anpassa utparametrarnas intervall så att de ger en bild av modellens totala osäkerhet. Detta har det dock inte funnits utrymme för i denna studie.

¹⁴ T2VOC är en numerisk spridningsmodell för trefasflöden som utvecklats vid Lawrence Berkeley Laboratory och används bland annat vid Institutionen för geovetenskaper, Luft- och Vattenlära, Uppsala universitet. Modellen inkluderar alla relevanta processer men är alltför komplicerad för att användas vid räddningsinsats.

3.3 BERÄKNINGAR

Det här förslaget innefattar ett urval av de processer som sker i marken vid ett utsläpp, samt ger förslag på ekvationer och förenklingar som kan användas då dessa inkluderas i *Kemspill Mark 4.0*. Urvalet av spridningsprocesser görs med avsikt att ta med dem som ökar transporten i stor utsträckning inom modellens domän samtidigt som kraven på in- och utparametrar som beskrivits ovan också till stor del styr valet.

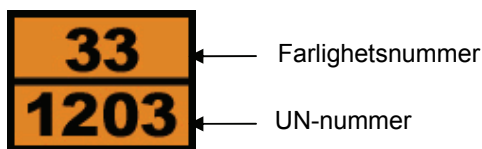
Ekvationerna presenteras på sådant sätt att programmeringen underlättas och de är avsedda att lösas analytiskt. I det befintliga programmet *Kemspill Mark 3.4* finns möjlighet att ange ett tidssteg och stega sig fram för att undersöka utveckling över tid, vilket också ska vara möjligt i version 4.0. I praktiken betyder detta att alla beräkningar upprepas för en ny tid.

Som komplement till denna rapport skapas ett program i Excel *Nya Kemspill Mark.xls* med samtliga beräkningar för att underlätta den validering som bör genomföras innan den nya versionen av modellen inkluderas i *RIB*.

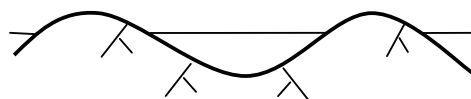
4 RESULTAT

4.1 INPARAMETRAR

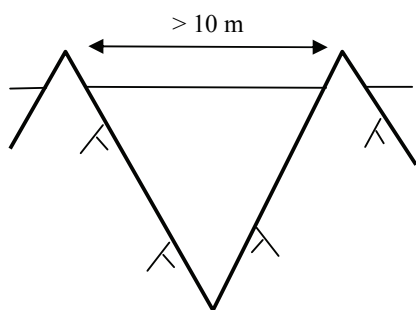
Det här kapitlet tar upp de inparametrar som förslaget på *Kemspill Mark 4.0* kräver. De inparametrar som är obligatoriska för användaren att ange presenteras i Tabell 2 där också de fördefinierade alternativ användaren har att välja mellan samt den hjälp användaren föreslås erbjudas för att snabbare och enklare välja rätt alternativ framgår. I Tabell 3 sammanfattas de valbara inparametrar som användaren kan ange för att öka modellresultatets tillförlitlighet. Användaren ska kunna välja att ange en, flera eller ingen av dessa. Efter tabellerna följer en redogörelse för de inparametrar där typvärden används och nedan finns figurer som hänvisas till senare i texten.



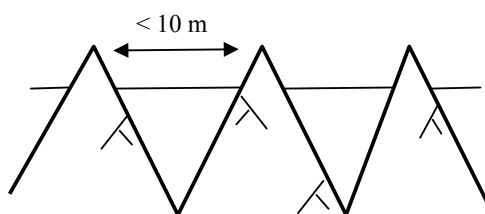
Figur 17. Fordonsskylt för transport av farligt gods, i detta fall bensin.



Figur 18. Flata hållar i dagen (genomskärning).



Figur 19. Spetsiga berg i dagen - glest (genomskärning).



Figur 20. Spetsiga berg i dagen - tätt (genomskärning).

Tabell 2. Inparametrar som anges av användaren.

Obligatoriska inparametrar	Anges som	Hjälp till användaren
Spillparametrar		
Kemikalie	Namn CAS-nr UN-nr Farlighets-nr	Sök på namn eller del av namn Enligt Chemical Abstract Service Se Figur 17 Se Figur 17
Spillarea (A) [m^2]	Numeriskt	
Spillvolym (V) [m^3]	Numeriskt	
Tid sedan utsläpp (t) [h]	Numeriskt	
Miljöparametrar		
Jordart ¹⁵	Morän Grus Sand Silt Lera	Blandning av storlekar, kantiga korn Storlek mellan hagel och körsbär Storlek mellan saltkorn och hagel Kan lätt sköljas bort från händerna Svårt att skölja bort från händerna Eller enligt jordartskartan
Om utsläpp på ås: utsläppsplatsens läge ovan omgivande mark	Numeriskt Inte på ås	Utsläppsplatsens höjd över omgivande mark
Markytans lutning ¹⁶	Liten Medelstor Stor	0 - 5 % 5 - 10 % > 10 % Skillnad i höjd på två platser genom horisontellt avstånd mellan punkterna, i ett område med ca 25 m radie
Berg i dagen ¹⁷	Spetsiga berg glest (> 10 m mellanrum) Spetsiga berg tätt (< 10 m mellanrum) Flata hållar Inga berg i dagen	se Figur 19 se Figur 20 se Figur 18
Närhet till vattendrag eller sjö	Numeriskt avstånd Nej	Avstånd till vattendrag eller sjö nedströms utsläppet
Klimatparametrar		
Nederbörd	Ja Nej	
Vindhastighet (u) ¹⁸	Lugnt till svag vind Måttlig vind Frisk vind Hård vind	Vimpel hänger rakt ned Blad och små kvistar rör sig Mindre träd svajar Man går ej obehindrat mot vinden
Lufttemperatur (T) [$^{\circ}C$]	Numeriskt	

¹⁵ Kännetecken för att skilja jordarterna åt är hämtade från Viberg (1997).

¹⁶ Klassindelning för markytans lutning har gjorts utan referens, noggrannare undersökning av lämplig indelning rekommenderas innan *Kemspill Mark 4.0* inkluderas i *RIB*.

¹⁷ Berg i dagen är endast inparameter vid spridningsberäkning av DNAPLs, noggrannare undersökning av lämplig klassindelning rekommenderas innan *Kemspill Mark 4.0* inkluderas i *RIB*.

¹⁸ Intervallindelning och beskrivning av vindhastigheter från Beaufortskalan (Salomonsson, 1995).

Tabell 3. Valbara inparametrar för ökad noggrannhet.

Valbara inparametrar	Anges som	Förklaring
Miljöparametrar		
Hydraulisk konduktivitet (K)	[m s ⁻¹]	Jordens genomsläpplighet
Porositet (p)	[m ³ _{Porer} m ⁻³ _{Mark}]	Hur porös jorden är
Retentionskapacitet (R)	[m ³ _{Kemikalie} m ⁻³ _{Mark}]	Jordens förmåga att hålla kvar kemikalien
Linstjocklek (h_{Lins}) ¹⁹	[m]	Tjocklek av den kemikalielin som bildas då utsläppet möter en ogenomtränglig yta i den aktuella jorden
Markytans lutning	[-]	Medelvärde för ett område med ca 50 m diameter
Djup till berggrunden (D_{Berg}) ²⁰	[m]	Minsta djup under spillytan. Approximera med borrhjup ("borrdj") för närmsta bergborrade brunn i Brunnarkivet på www.sgu.se eller konsultera geolog
Djup till grundvattnet (D_{Grv})	[m]	Mät vid fri vattenyta eller i närmaste brunn, se Brunnarkivet på www.sgu.se , eller konsultera grävmaskinist som nyligen grävt i området
Grundvattenytans lutning (dD_{Grv}/dx)	[-]	Mät grundvattennivå i tre punkter i utsläppets närhet och interpolera, om fria vattenytor finns kan dessa användas
Klimatparametrar		
Vindhastighet (u)	[m s ⁻¹]	Medelvind
Höjd för vindmätning (z)	[m]	

4.1.1 Spillparametrar

Användaren anger vilken kemikalie utsläppet bestod av och genom en koppling till kemikaliedatabasen *Farliga Ämnen* i RIB får *Kemspill Mark 4.0* tillgång till de fysikaliska data som presenteras i Tabell 1. De data som behövs i beräkningarna är densitet, viskositet, molekylvikt, ångtryck samt kokpunkt. För att underlätta för användaren kan kemikalien sökas efter namn eller del av namn, CAS-, farlighets- eller UN-nummer. Eftersom *Farliga Ämnen* inte innehåller intervall för de olika parametrarna inkluderas inte dess osäkerhet i utparametrarnas intervall.

¹⁹ Linstjocklek är bara inparameter vid beräkning av LNAPLs spridning.

²⁰ Djup till berggrunden är endast en inparameter vid utsläpp av DNAPL.

4.1.2 Miljöparametrar

Jordart anges som någon av klasserna *Morän*, *Grus*, *Sand*, *Silt* eller *Lera* enligt jordartskartan eller med hjälp av den beskrivning som ges tillsammans med de olika alternativen. *Morän* beskrivs som en blandning av olika kornstorlekar där kornen är kantiga, *Grus* kan ha korn som varierar mellan hagel- och körsbärsstorlek medan *Sand*-kornen har en storlek mellan salt och hagel (Viberg, 1997). *Silt* karakteriseras istället av att den är lätt att skölja bort från händerna till skillnad från *Lera* som är svår att skölja bort (Viberg, 1997). I *Kemspill Mark 3.4* kan två jordlager anges men eftersom användaren sällan har kännedom om flera lager används bara ett i detta förslag till en ny version av modellen. Ytterligare en förenkling i den nya versionen är att jordarterna klassas enligt SGUs förenklade indelning så att fin- och grovgrus slagits samman till *Grus* och att moig och sandig morän båda ingår i *Morän* med avsikt att anpassa modellen till användarnas tillgång till information. För varje jordart samt för åsmaterial har typvärden tagits fram för hydraulisk konduktivitet, porositet, retentionskapacitet, djup till kapillärzon samt tjocklek för en kemikalielinns flytande på grundvattenytan. Typvärdena sammanställs i en liten markdatabas som inkluderas i *Kemspill Mark 4.0*, nedan följer en presentation av dem samt de miljöparametrar vars typvärden inte kopplats till jordart eller ås; djup till grundvattnet, grundvattenytans lutning och jord-djup.

Hydraulisk konduktivitet och porositet

Dessa två parametrar finns med i *Kemspill Mark 3.4* (se Bilaga 2) men nya typvärden, anpassade till de förenklade jordartsklasserna används i det här förslaget (Tabell 4 och 6). Intervall för jordarternas hydrauliska konduktivitet har hämtats från Ledskog och Lundgren (1989) och utifrån att parametern enligt Vägverket och Räddningsverket (1989) är lognormal-fördelad har det mest sannolika värdet beräknats. För åsar har siffrorna hämtats från Vägverket och Räddningsverket (1998). Konduktivitetsintervallen är mycket stora, till exempel kan det skilja upp till fyra tiopotenser mellan hydraulisk konduktivitet för två olika jordar som båda klassas som sand och för morän är spridningen ännu större. Innan *Kemspill Mark 4.0* inkluderas i *RIB* rekommenderas en undersökning av hur intervallen kan minimeras, kanske är annan indelning att föredra. Den hydrauliska konduktivitet som används avser vatten och mättade tillstånd, vilken i beräkningskapitlet (4.3) justeras för att gälla andra vätskor och mätnadsförhållanden.

Tabell 4. Hydraulisk konduktivitet för olika jordarter samt åsar (Ledskog och Lundgren, 1989; Vägverket och Räddningsverket, 1998).

	Hydraulisk konduktivitet (K) [$m s^{-1}$]			Referens
	Nedre intervallgräns	Mest sannolikt	Övre intervallgräns	
Lera	10^{-12}	$10^{-10,5}$	10^{-9}	(L & L, 1998; VV & SRV, 1998)
Silt	10^{-9}	10^{-8}	10^{-7}	(L & L, 1998; VV & SRV, 1998)
Sand	10^{-7}	10^{-5}	10^{-3}	(L & L, 1998; VV & SRV, 1998)
Grus	10^{-3}	10^{-2}	10^{-1}	(L & L, 1998; VV & SRV, 1998)
Morän	10^{-10}	$10^{-7,5}$	10^{-5}	(L & L, 1998; VV & SRV, 1998)
Ås	10^{-6}	10^{-4}	10^{-2}	(VV & SRV, 1998)

Porositet är normalfördelad (Vägverket och Räddningsverket, 1998) och det mest sannolika värdet har därmed beräknats utifrån intervallgränser från Freeze och Cherry (1979) för alla jordarter utom morän samt för åsar vars intervall hämtats från Vägverket och Räddningsverket (1998). Den porositet som redovisas i tabellen för morän och ås är effektiv porositet då inga andra uppgifter har hittats.

Tabell 5. Porositet för olika jordarter (Freeze och Cherry, 1979; Vägverket och Räddningsverket, 1998).

	Porositet (p) [$m^3_{\text{Porer}} m^{-3}_{\text{Mark}}$]			Referens
	Nedre intervallgräns	Mest sannolikt	Övre intervallgräns	
Lera	0,40	0,55	0,70	(F & C, 1979; VV & SRV, 1998)
Silt	0,35	0,43	0,50	(F & C, 1979; VV & SRV, 1998)
Sand	0,25	0,38	0,50	(F & C, 1979; VV & SRV, 1998)
Grus	0,25	0,33	0,40	(F & C, 1979; VV & SRV, 1998)
Morän ²¹	0,01	0,08	0,15	(VV & SRV, 1998)
Ås ²²	0,15	0,25	0,35	(VV & SRV, 1998)

Retentionskapacitet

Retentionskapaciteten hos en mark beror bland annat på jordart, typ av vätska samt vätskans hastighet, och osäkerheten är stor vid mätning och uppskattning vilket gör att skillnaden mellan olika källors typvärden är stora (Mercer och Cohen, 1990). Heterogenitet i marken spelar också en viktig roll och laboratorieförsök ger ofta en mindre retention än den verkliga (Jensen, 2002c).

I Tabell 6 presenteras ett förslag på typvärden för retentionskapaciteten (R) hos de olika jordarterna för tre typer av NAPLs, indelade efter den kinematiska viskositeten. Till den första klassen med lågviskösa kemikalier hör bensin, diesel hamnar i mellanklassen och Eldningsolja 2 är ett exempel från gruppen med hög viskositet. Indelningen efter viskositet är hämtad från CONCAWE (1981) som menar att retentionskapaciteten för mellangruppen kan multipliceras med två för att erhålla värden för vätskor med hög viskositet, eller divideras med två för att ge retentionskapaciteten för lågviskösa vätskor. För lera har retentionskapacitet från Eiling och Lilie (1994) använts och för morän samt ås har typvärden hämtats från Vägverket och Räddningsverket (1998). Då dessa källor inte anger vilka vätskor värdena avser antogs de gälla för mittengruppen och enligt nämnd metod skapades sedan värden även för låg- respektive högviskösa kemikalier (CONCAWE, 1981).

Relativt låga retentionskapaciteter har valts för att *Kemspill Mark 4.0* ska ge liten kvarhållning och därmed stor spridning av utsläppet men som tidigare nämnts förekommer mycket skilda värden i litteraturen. Andra möjliga referenser är t ex Parker m fl (1995) samt Mercer och Cohen (1990) där en sammanställning av uppmätta retentionskapaciteter från olika källor finns.

Retentionskapaciteten varierar också beroende på markens vatteninnehåll vid utsläppet och är som tidigare förklarats större i den mättade än den omättade zonen (se Avsnitt 2.3.2) men i den nya versionen, *Kemspill Mark 4.0*, används en konstant retentions-

²¹ För morän redovisas effektiv porositet som är mindre än total porositet.

²² För ås redovisas effektiv porositet som är mindre än total porositet.

kapacitet för omättade förhållanden oberoende av markens vatteninnehåll både i den omättade och i den mättade zonen, enligt Tabell 6.

Då det har varit svårt att finna intervall för de olika typvärdena hålls retentionskapaciteten konstant vid beräkning av såväl intervall som det mest sannolika värden för utparametrarna. Detta trots att det är mycket stor spridning mellan olika källors typvärden. Innan *Kemspill Mark 4.0* inkluderas i *RIB* bör en utvärdering av retentionskapacitet för olika jordarter och vätskor göras, antingen genom försök eller litteraturstudier.

Tabell 6. Retentionskapacitet för olika jordarter (Eiling och Lilie, 1994; CONCAWE, 1981; Vägverket och Räddningsverket, 1998).

	Retentionskapacitet (R) [$m^3_{\text{NAPL}} m^{-3}_{\text{Mark}}$]			Referens
	$U_K \leq 1$	$1 < U_K \leq 10$	$10 < U_K$	
Lera	0,026	0,052	0,104	(Eiling och Lilie, 1994; CONCAWE, 1981)
Silt	0,020	0,04	0,08	(CONCAWE, 1981)
Sand	0,0075	0,025	0,05	(CONCAWE, 1981)
Grus	0,003	0,006	0,012	(CONCAWE, 1981)
Morän	0,0125	0,025	0,05	(VV & SRV, 1998; CONCAWE, 1981)
Ås	0,0075	0,015	0,03	(VV & SRV, 1998; CONCAWE, 1981)

Kapillärzonens höjd över grundvattenytan

I kapillärzonen är vattenhalten betydligt större än i övriga delen av den omättade zonen och eftersom detta påverkar kemikaliefasens relativa permeabilitet och därmed spridningshastighet behövs data över hur mäktig zonen väntas vara i olika miljöer. I Tabell 7 presenteras typvärden för kapillärzonens höjd över grundvattenytan och djup från markyta till kapillärzon ($D_{\text{Kapillär}}$) beräknas således som differensen mellan djup till grundvattenytan (D_{Grv}) och tabellvärdet. I de fall där kapillärzonens höjd är större än djup till grundvattnet sätts $D_{\text{Kapillär}}$ lika med D_{Grv} . Minsta och största värde för silt och sand kommer från Domenico och Schwartz (1997) och motsvarande värden för grus är hämtade från Shan (webbsida). Det mest sannolika värdet har antagits vara medelvärdet av intervallgränserna. Larsson (1993) redovisar en nedre intervallgräns för lera vilken hålls konstant i beräkningarna då inga andra värden hittats. Då ingen information alls hittats angående kapillärzonens mäktighet i varken morän eller ås har antaganden gjorts. Morän antogs ha samma kapillära stigning som silt eftersom en osorterad jord innebär små porer samt en relativt stor kapillär stigning och ås antogs likna sand.

Tabell 7. Kapillärzonens höjd över grundvattenytan (Domenico och Schwartz, 1997; Shan, webbsida) för värden inom parentes finns ingen referens se text ovan för motivering.

	Kapillärzonens höjd över grundvattenytan [m]			Referens
	Nedre intervallgräns	Mest sannolikt	Övre intervallgräns	
Lera	8	(8)	(8)	(Larsson, 1993)
Silt	0,65	(5,33)	10	(Domenico & Schwartz, 1997)
Sand	0,01	(0,33)	0,65	(Domenico & Schwartz, 1997)
Grus	0,01	(0,013)	0,015	(Shan, webbsida)
Morän	(0,65)	(5,33)	(10)	
Ås	(0,01)	(0,33)	(0,65)	

Linstjocklek

Då en LNAPL når grundvattenytan kommer vertikal transport att upphöra eftersom kemikalien inte är tung nog att tränga undan vatten, istället tar horisontell transport vid och en lins flytande på grundvattnet bildas. Linsens form beror i det heterogena fallet till största del på variation i hydraulisk konduktivitet, medan grundvattenytans lutning och utsläppets storlek är dominerande faktorer i det homogena fallet. Avgörande för linsens utbredningsarea är dess tjocklek som därför är en viktig inparameter. Tjockleken beror både på föroreningens viskositet samt jordegenskaper så som porstorleksfördelning och på kapillärzonens utbredning. I Tabell 8 presenteras ett förslag på typvärden för linstjocklek (h_{Lins}) som endast beror på markmaterial. Värdet för lera, morän samt ås har uppskattats på grund av att inga referenser har hittats. Linsens tjocklek i lera sattes godtyckligt till 0,06 m med enda motivering att den borde vara större än i silt. För morän användes siltvärdet med anledning av att en osorterad jord har små porer som borde kunna liknas med silt och linstjockleken i åsmaterial antogs vara samma som i sand. Då inga intervall har hittats för linstjocklek används samma värde för alla beräkningar²³.

Tabell 8. Linstjocklek för NAPL flytande på grundvattenytan i olika jordarter, tjocklek inom parentes saknar referens se text ovan för motivering.

	Linstjocklek (h_{Lins}) [m]	Referens
Lera	(0,060)	
Silt	0,040	(Vanlooche m fl, 1975)
Sand	0,012	(Vanlooche m fl, 1975)
Grus	0,005	(Vanlooche m fl, 1975)
Morän	(0,040)	
Ås	(0,012)	

Djup till grundvattenytan

Eftersom grundvattennivåer inte bara varierar för olika jordarter utan också med läge i terrängen, geografiskt läge och tid på året krävs mätning för att *Kemspill Mark* ska kunna ge ett mer rimligt resultat. Mätning kan lämpligen utföras vid fri vattenyta eller i befintlig brunn i närhet av utsläppsplatsen, för att ta reda på var brunnar finns kan SGUs brunnsarkiv användas, där drygt 210 000 brunnar finns dokumenterade²⁴ (SGU, webbsida).

För att modellen ska kunna användas även innan mätning används normala grundvattendjup för morän i topografiska normallägen för samtliga jordarter om inget djup anges, se Tabell 9. Djup i morän svarar mot en ytlig grundvattenyta för övriga jordarter bortsett från de riktigt finkorniga som kan ha ännu ytligare grundvatten. Ett undantag är dock åsar där djupet oftast är betydligt större. I fall då användaren angett att utsläppet skett på en ås antas grundvattenytan ligga vid omgivande terrängs markyta och djupet sätts till den höjd som användaren angivit. Det bör tydligt framgå i programmet att de fördefinierade alternativen medför stor osäkerhet och att mätning alternativt konsultation med grävmaskinist som nyligen grävt i området rekommenderas.

²³ Beräkning av mest sannolika värde samt intervall för utparametrarna.

²⁴ Enligt lagen om uppgiftsskyldighet (SFS 1975:424, SFS 1985:245).

Tabell 9. Djup till grundvattenytan (Naturvårdsverket, webbsida).

	Djup till grundvattenytan [m]		
	Nedre intervallgräns	Mest sannolikt	Övre intervallgräns
Morän	0,5	2	4

Grundvattenytans lutning

För bästa resultat bör även grundvattenytans lutning mätas in, vilket kan göras genom att grundvattennivån mäts i tre olika punkter och att interpolation mellan nivåerna utförs. Nivåer kan t ex mätas vid fria vattenytor eller i brunnar. Eftersom detta är tidskrävande görs antaganden så att modellen kan användas även utan föregående mätning. Enligt Ledskog och Lundgren (1989) är grundvattenytans lutning vanligen en procent men för säkerhets skull bör tio procents lutning användas vid beräkning av grundvattenhastighet utan kännedom om förhållanden på platsen. En bättre uppskattning borde vara markytans lutning eftersom grundvattenytan i stort följer topografin. Då det normalt är djupast till grundvattenytan på höjder och grundast till den i dalar kan man säga att markytans lutning ger maximal grundvattenlutning. Sambandet är tydligast i finkornig jord och morän, medan material med större konduktivitet har mindre lutande grundvattenyta än vad som förväntas utifrån topografin (Niemi m fl, 1994).

Medellutning för ett område med ca 25 meters radie bör användas och användaren kan ge ett numeriskt värde eller välja ett fördefinierat alternativ som skulle kunna vara; *Liten marklutning (0 – 5 %)*, *Medelstor marklutning (5 – 10 %)*, *Stor marklutning (> 10 %)* eller *Ås*. Klasserna för marklutning motsvarar de godtyckligt uppskattade grundvattenlutningarna i Tabell 10 medan värden för åsmaterial hämtats från Vägverket och Räddningsverket (1998), noggrannare undersökning av lämpliga klasser rekommenderas samt att de illustreras med foton för att definiera alternativen. Om användaren anger att vattendrag finns inom 50 meter från utsläppsplatsen används *Stor marklutning* oavsett vad användaren angett.

Tabell 10. Grundvattenytans lutning vid olika marklutningar samt i åsmaterial. Siffror inom parentes saknar referens, se text ovan för motivering.

	Grundvattenytans lutning [$m_{\text{Vertikalt}} m^{-1}$ Horisontellt]		
	Nedre intervallgräns	Mest sannolikt	Övre intervallgräns
Liten marklutning (0–5 %)	(0,00)	(0,025)	(0,05)
Medelstor marklutning (5–10 %)	(0,05)	(0,075)	(0,10)
Stor marklutning (>10 %)	(0,10)	(0,20)	(0,60)
Ås	0,0005	0,005	0,02

Jorddjup

Djup till berggrund är endast intressant om utsläppet består av en kemikalie som är tyngre än vatten eftersom lättare vätskor kommer att flyta på grundvattnet och därmed inte nå till berggrunden, jämför Figur 9 och Figur 10. Vid utsläpp av en LNAPL är alltså inte jorddjup en nödvändig inparameter.

Jorddjupet varierar mycket i Sverige och det finns inga enkla samband med jordart, geologiska formationer eller läge i topografin, exempelvis kan en lera på västkusten vara 100 m mäktig medan leror på östkusten sällan är mäktigare än 15 m (Persson, 1998). Om det finns någon bergborrad brunn i närheten av utsläppsplatsen är det enklaste sättet att få en uppskattning av jorddjupet att anta samma djup som i brunnen vars uppgifter finns tillgängliga i SGUs brunnsarkiv (SGU, webbsida). Om det inte finns någon brunn i närheten kan en geolog göra en uppskattning utifrån bl a jordart och geologiska formationer.

För att den nya *Kemspill Mark 4.0* ska kunna användas även utan platsspecifikt värde på jorddjup görs en indelning i jorddjupskategorier. Här presenteras ett förslag, men ingen noggrannare utredning har gjort om vilken indelning som är mest lämplig. Andra förslag finns t ex i Nilsson (2003).

I det här förslaget anger användaren om det finns berg i dagen på platsen och i så fall även vilken form de har genom att välja bland tre olika alternativ som illustreras med skisser. Alternativen är *Spetsiga berg glest (> 10 m mellanrum)* i Figur 19 som antas representera en miljö där jorddjupet är 5 m, *Spetsiga berg tätt (< 10 m mellanrum)* i Figur 20 då jorddjupet sätts till 3 m och *Flata hållar* i Figur 18 som antas ha ett jorddjup på 1 m (Risberg, personlig korrespondens). I de fall där användaren angett att det inte finns berg i dagen används medianvärdet 6 m från SGUs brunnsarkiv med ett intervall som avser morän eftersom det är den vanligaste jordarten i Sverige, för lera hade intervallet varit större (Risberg, personlig korrespondens). Medianjorddjupet för brunnarna är troligen mindre än för hela Sverige eftersom borrhning på platser med mycket stort jorddjup är kostsamt. Om användaren angivit att utsläppet skett på en ås används höjd över omgivande terräng som mest sannolika jorddjup.

Indelning är mycket grov och behäftad med stor osäkerhet men eftersom jorddjupet inte har en central roll i modellen anses den ändå försvarlig. Användaren rekommenderas dock att använda ovan nämnda metoder för att approximera jorddjupet med ett numeriskt värde och därigenom öka noggrannheten.

Tabell 11. Uppskattade jorddjup för olika typmiljöer.

Berg i dagen	Jorddjup (D_{Berg}) [m]		
	Nedre intervallgräns	Mest sannolikt	Övre intervallgräns
Spetsiga berg glest (> 10 m mellanrum)	3	5	10
Spetsiga berg tätt (< 10 m mellanrum)	0	3	5
Flata hållar	0	1	5
Inga berg i dagen	2	6	20

4.1.3 Klimatparametrar

Vindhastighet

Användaren kan ange vindhastigheten som ett numeriskt värde eller välja ett av de fördefinierade alternativen; *Lugnt till svag vind* då en vimpel hänger rakt ned på flaggstången, *Måttlig vind* då blad och små kvistar rör sig, *Frisk vind* då även mindre träd svajar eller *Hård vind* då man ej går obehindrat mot vinden. Alternativen motsvarar vindhastigheter enligt Beaufortskalan (Salomonsson, 1995) som presenteras i Tabell 12, med den mest sannolika hastigheten satt till medelvärdet av intervallgränserna. Vindhastigheterna antas gälla på tio meters höjd om inget annat anges, vilket innebär att z sätts till tio (Hultberg, personlig korrespondens).

Tabell 12. Vindhastighetsintervall enligt Beaufortskalan (Salomonsson, 1995) värden inom parentes saknar referens.

	Vindhastighet (u) [$m\ s^{-1}$]		
	Nedre intervallgräns	Mest sannolikt	Övre intervallgräns
Lugnt till svag vind	0,1	(1,7)	3,3
Måttlig vind	3,4	(5,65)	7,9
Frisk vind	8,0	(10,9)	13,8
Hård vind	13,9	(19,5)	24,4

4.2 UTPARAMETRAR

Resultatet från *Kemspill Mark 4.0* kommer att ge information om utsläppets spridning i en homogen mark med givna egenskaper. För att användaren inte ska förväxla modellresultatet med utsläppets verkliga spridning ska det tydligt framgå att modellresultatet motsvarar hur spridning kan se ut i en homogen mark och att naturen nästan aldrig är homogen. Som komplement ges även exempel på faktorer som gör att den verkliga spridningen skiljer sig från det homogena fallet, nedan är ett förslag men en noggrann utredning bör genomföras av vilka faktorer som ska tas med i programmet samt hur de bäst presenteras.

Ta reda på om det finns nedgrävda rör (dränering, VA etc) på platsen. Spridning sker troligen längs rören och hastigheten kan vara betydligt större än den beräknade.

För att understryka osäkerheten i de utdata som modellen ger presenteras resultaten som tidigare nämnts med det mest sannolika värdet tillsammans med ett intervall, vilket skapas genom att samtliga beräkningar utförs tre gånger; en gång för det mest sannolika värdet av samtliga indata samt enligt Tabell 13. De numeriska resultaten bör även illustreras med en skiss liknande den i det befintliga *Kemspill Mark 3.4*, se Figur 3. I följande avsnitt redogörs för de olika utparametrarna.

Tabell 13. Översikt över vilken intervallgräns för respektive typvärde som används vid beräkning av intervall för utparametrarna.

	Minsta spridning	Största spridning
Konduktivitet (K) [$m\ s^{-1}$]	Nedre	Övre
Porositet (p) [$m^3_{\text{Porer}}\ m^{-3}_{\text{Mark}}$]	Övre	Nedre
Retentionskapacitet (R) [$m^3_{\text{NAPL}}\ m^{-3}_{\text{Mark}}$]	Övre	Nedre
Djup till grundvatten (D_{Grv}) [m]	Övre	Nedre
Djup till kapillärzon ($D_{Kapillär}$) [m]	Nedre	Övre
Grundvattenytans lutning (dD_{Grv}/dx) [-]	Nedre	Övre
Vindhastighet (u) [$m\ s^{-1}$]	Övre	Nedre

4.2.1 Aktuell spridning

Den aktuella spridningen anger hur långt utsläppet beräknas ha transporterats vid den tid som användaren anger. Vertikal spridning av kemikaliefas ($S_{K,Z}$), dvs hur djupt kemikalien förväntas ha nått, ges tillsammans med horisontell spridning ($S_{K,X}$) som är det största avstånd från utsläppsplatsen där ren kemikalie kan förväntas påträffas, användaren meddelas att spridningen kommer vara störst åt det håll som marken lutar men att spridning kommer ske åt alla håll. Information ges även om hur långt från utsläppsplatsen i marklutningens riktning som vattenlöst kemikalie kan ha transporterats ($S_{V,X}$). Resultaten ges som den mest sannolika spridningen tillsammans med ett intervall, en värdesiffra rekommenderas om spridningen är mindre än 100 m och två värdesiffror om spridningen är större än så.

4.2.2 Tid till grundvattenkontaminering

Vid en olyckssituation är det värdefullt att veta hur lång tid som är kvar innan grundvattnet förorenas av utsläppet eftersom spridningsriskerna då ökar markant. I *Kemspill Mark 4.0* bör därför denna tid ($t_{Grv} - t$) finnas med som en utparameter och ges som det mest sannolika värdet tillsammans med ett intervall. En timmas noggrannhet rekommenderas upp till 24 timmar varefter endast meddelande ges om att det tar mer än ett dygn för föroreningen att nå grundvattnet. Om grundvattnet redan har nåtts av utsläppet ges information om detta i ett textmeddelande.

4.2.3 Andel kvarhållen respektive evaporerad kemikalie

Tillsammans med aktuell spridning ges hur stor andel av det totala utsläppet som vid tidpunkten har avdunstat (V_E/V) samt den andel som hålls kvar i marken (V_R/V). Resultaten ges som det mest sannolika värdet tillsammans med ett intervall med 5 % noggrannhet.

4.2.4 Maximal spridning

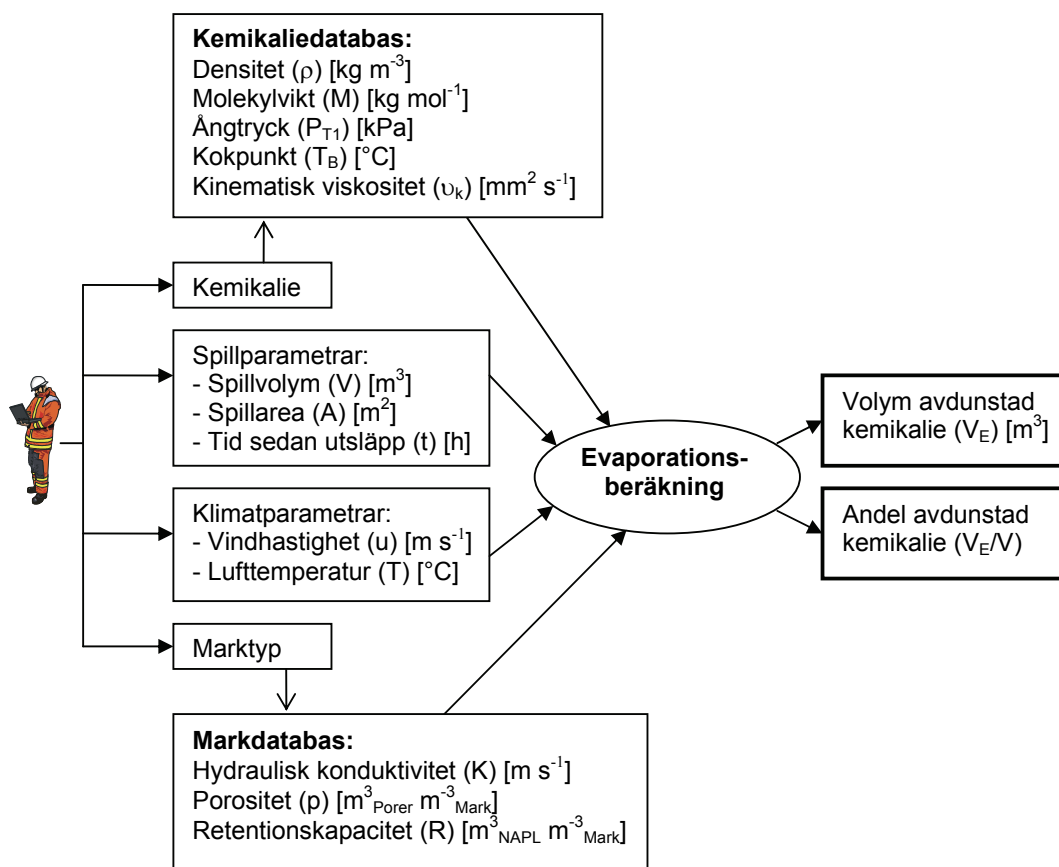
Ett begränsat utsläpp kommer att ge en begränsad spridning av kemikaliefasen på grund av att en viss mängd, motsvarande residualmättnad och sorption, hålls kvar i marken och att den rörliga volymen därmed kontinuerligt minskar för att till sist ta slut (se Avsnitt 2.3.2). För att underlätta vid insatsplanering bör *Kemspill Mark 4.0* ge maximal spridning av kemikaliefasen i horisontal- respektive vertikalled ($S_{K,X,Max}$ och $S_{K,Z,Max}$) där den horisontella spridningen anger ett avstånd från mitten av utsläppsplatsen åt det håll som marken lutar. Resultaten ges som det mest sannolika värdet tillsammans med ett intervall med samma system för värdesiffror som för den aktuella spridningen ovan. Ett textmeddelande bör också upplysa om att den fastlagda residualen emellertid kan lösas i markvattnet och verka som föroreningskälla under lång tid.

4.3 BERÄKNINGAR

Det här kapitlet redogör för de beräkningar som föreslås inkluderas i *Kemspill Mark 4.0*. Ekvationerna presenteras på ett sådant sätt att det underlättar för framtida programmering och i slutet av varje avsnitt motiveras de antaganden som ligger till grund för beräkningarna. Ekvationerna finns även sammanställda i excelprogrammet *Nya Kemspill Mark.xls* som levereras till Räddningsverket tillsammans med rapporten. Validering mot uppmätta data från verkliga utsläpp, laboratorieresultat eller simuleringsresultat från T2VOC rekommenderas innan användning av modellen.

4.3.1 Evaporation från spillyta

För flyktiga kemikalier kan evaporation från spillytan vara mycket stor, så att endast en liten del av det ursprungliga utsläppet infiltrerar ned i marken (Halmemies m fl, 2003). Eftersom detta i stor grad kan påverka spridningen bör processen inkluderas i *Kemspill Mark 4.0*. I Figur 21 presenteras de indata som krävs för beräkningarna. Kemikalie, spill- och klimatparametrar samt marktyp anges av användaren medan kemikalies och jordens egenskaper hämtas från kemikalie- respektive markdatabasen.



Figur 21. In- och utparametrar för evaporationsberäkningen.

Beräkning av evaporation från en spillyta kan utföras enligt de sju steg som beskrivs nedan.

1. Omvandla enheter till SI-standard enligt Bilaga 3.

2. Kontrollera kemikalins kokpunkt, om denna är lägre än lufttemperaturen antas hela utsläppet avdunsta. För övriga situationer följs beräkningen som följer.

3. Ångtrycket (P) för kemikalien vid aktuell lufttemperatur bestäms utifrån tabellerat ångtryck (P_{T1}) med Clausius-Clapeyrons ekvation, enligt Ekvation 1. Härledning av ekvationen återfinns i Bilaga 4.

$$P = P_{T1} e^{\left[\frac{T_B T_1}{T_B - T_1} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_1} \right) \cdot \ln \left(\frac{P_{T1}}{P_0} \right) \right]} \quad (1)$$

P	Ångtryck vid aktuell temperatur (T) [Pa]
P_{T1}	Tabellerat ångtryck vid temperatur T_1 [Pa]
P_0	Atmosfärstryck [Pa]
T	Lufttemperatur [K]
T_1	Temperatur vid tabellerat ångtryck [K]
T_B	Kokpunkt vid atmosfäriskt tryck [K]

Tabell 14. Konstanter som används i Ekvation 1.

Konstanter	
P_0	$101,3 \cdot 10^3$ Pa
T_1	293,15 K (RIB, 2004)

4. Nästa steg är att beräkna masstransferkoefficienten (k) vilket enligt Verhagen och Opschoor (1992) kan göras med Ekvation 2. Uppmätt vindhastighet (u) och spillarea (A) är indata. Om vindhastigheten noll angivits sätts u till $0,1 \text{ m s}^{-1}$ i de fortsatta beräkningarna.

$$k = C u^{\frac{2-s}{2+s}} \left(\sqrt{\frac{A}{\pi}} z \right)^{-\frac{s}{2+s}} \quad (2)$$

k	Masstransferkoefficient [m s^{-1}]
u	Vindhastighet [m s^{-1}]
z	Höjd vid vilken vindhastigheten mätts [m]
s	Konstant som beror på vindhastighetsprofilen i vertikalled [-]
C	Experimentellt framtagen variabel beroende av s [$\text{m}^{0,44} \text{s}^{-0,22}$]

Tabell 15. Konstanter som används i Ekvation 2.

Konstanter	
s	0,25 (Verhagen och Opschoor, 1992)
C	$2,6 \cdot 10^{-3} \text{ m}^{0,44} \text{ s}^{-0,22}$ (Verhagen och Opschoor, 1992)

5. För att bestämma under hur lång tid evaporationen kommer att ske (t_E), beräknas kvoten mellan utsläppets teoretiska tjocklek (d) och infiltrationshastigheten (v) enligt Ekvation 3 (Halmemies m fl, 2003).

$$t_E = \frac{d}{v} = \frac{\frac{V}{A}}{\frac{K v_V}{p v_k} \frac{dh}{dz}} \quad (3)$$

t_E	Tidsintervall då evaporation sker [s]
d	Utsläppets teoretiska tjocklek [m]
v	Infiltrationshastighet d v s vertikal hastighet [m s^{-1}]
V	Spillvolym [m^3]
A	Spillarea [m^2]
K	Hydraulisk konduktivitet [m s^{-1}]
p	Porositet [$\text{m}^3_{\text{pore}} \text{m}^{-3}_{\text{Mark}}$]
v_V	Kinematisk viskositet för vatten [$\text{mm}^2 \text{s}^{-1}$]
v_K	Kinematisk viskositet för kemikalien [$\text{mm}^2 \text{s}^{-1}$]
dh/dz	Totalpotentialgradient i vertikalled [-]

Tabell 16. Konstanter som används i Ekvation 3.

Konstanter	
v_V	$1 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$
dh/dz	1

6. Med ångtrycket (P), masstransferkoefficienten (k) samt evaporationstiden (t_E) från punkterna ovan och uppgifter om molekylvikt (M), spillarea (A) och lufttemperatur (T) kan volym avdunstad kemikalie (V_E) beräknas med hjälp av Ekvation 4 (Verhagen och Opschoor, 1992). Först kontrolleras dock om tiden sedan utsläppet skett (t) är mindre än evaporationstiden (t_E). Om så är fallet används t i beräkningarna, om tvärtom evaporationstiden är mindre än tiden sedan utsläppet, används t_E .

$$V_E = \frac{kMAP_0}{RT} \cdot \ln \left[1 + \frac{P - P_\infty}{P_0 - P} \right] \frac{t}{\rho} \quad (4)$$

V_E	Volym avdunstad kemikalie [m^3]
k	Experimentellt framtagen masstransferkoefficient [m s^{-1}]
M	Molekylvikt [kg mol^{-1}]
A	Spillarea [m^2]
P	Ångtryck vid aktuell temperatur [Pa]
P_0	Atmosfärstryck [Pa]
P_∞	Partialtryck för kemikalien i luft [Pa]
R	Allmänna gaskonstanten [$\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$]
T	Lufttemperatur [K]
ρ	Kemikalien densitet [kg m^{-3}]
t	$\left\{ \begin{array}{ll} \text{Tid sedan spill [s]} & t \leq t_E \\ \text{Evaporationstid } t_E \text{ [s]} & t > t_E \end{array} \right.$

Tabell 17. Konstanter som används i Ekvation 4.

Konstanter

P_0	$101,3 \cdot 10^3$ Pa	
P_∞	0 Pa	(Halmemies m fl, 2003)
R	$8,3$ J mol ⁻¹ K ⁻¹	

7. Den avdunstade volymen kan dock aldrig bli större än utsläppets totala volym.

$$\text{Om } V_E > V \quad (5)$$

$$V_E = V \quad (6)$$

8. För att erhålla den sökta andelen avdunstad kemikalie divideras slutligen V_E med spillvolymen V .

Antaganden. Vid beräkningarna har utsläppet antagits ha konstant temperatur lika med luftens temperatur under tiden evaporationen pågår. Enligt Verhagen och Opschoor (1992) ger detta en maximal evaporation eftersom temperaturen sjunker med tiden till följd av energiförluster under avdunstningen. Då *Kemspill Mark 4.0* eftersträvar att illustrera ett troligt spridningsscenario söks ett medelvärde för avdunstningen snarare än den maximala, men beräkningarna för att ta hänsyn till temperaturavtagandet anses vara alltför komplicerade för att vara motiverade.

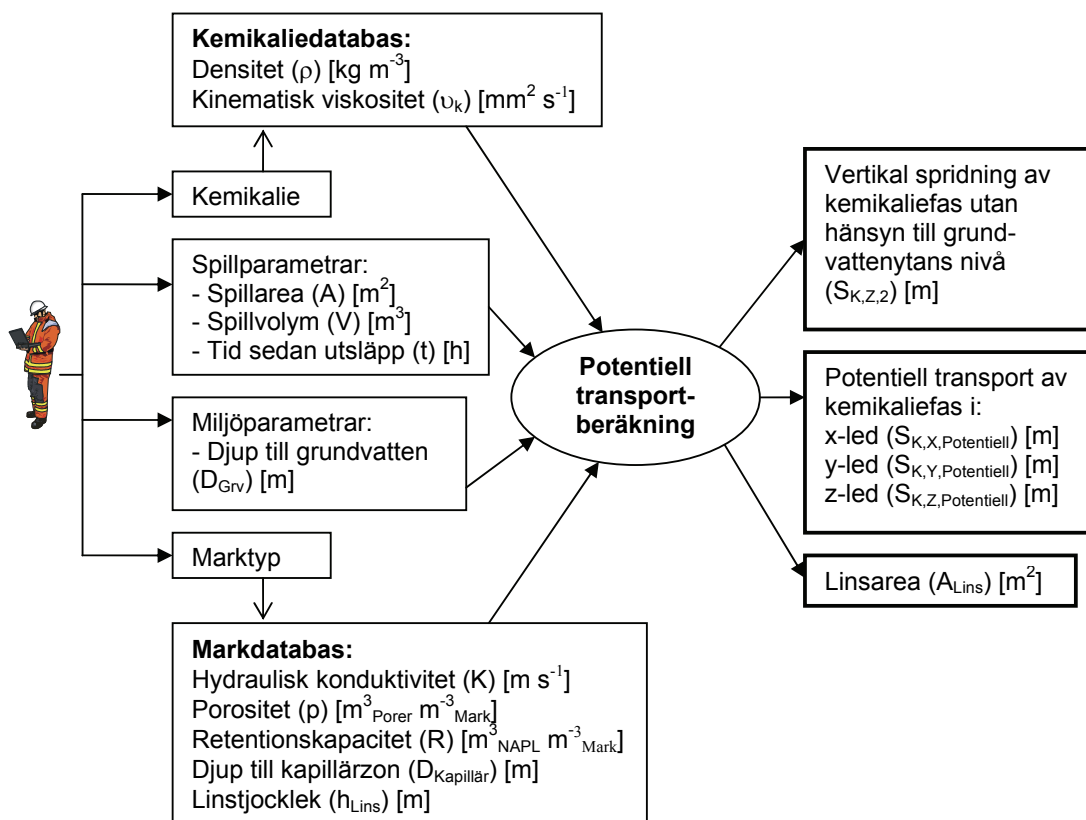
Kemikalier vars kokpunkt är lägre än lufttemperaturen antas inte spridas i marken över huvud taget vilket troligtvis inte stämmer vid ett stort utsläpp på genomsläpplig mark men anses ändå rimligt eftersom kemikalien borde evaporera efter en relativt liten spridning.

Vidare har ingen hänsyn tagits till markens råhet vilken i verkligheten har stor inverkan på evaporationshastigheten (Verhagen och Opschoor, 1992). I detta förslag används en masstransferkoefficient som beräknas med konstanter framtagna i experiment med akrylonitril på en plan yta (Verhagen och Opschoor, 1992), men en tänkbar vidareutveckling vore att ta fram typvärden för olika markanvändning, t ex skog, gräs och asfalt. Antagande har även gjorts om neutral atmosfärisk stabilitet för att kunna använda ekvationerna, vilket är typiskt för Sverige även om stabiliteten varierar både mellan platser och mellan tidpunkter (Vedin, 1995). Då evaporationstiden beräknades sattes den vertikala hydrauliska gradienten samt den relativa permeabiliteten till ett vilket är rimligt i omättad mark ovan kapillärzonen.

4.3.2 Potentiell²⁵ transport av kemikaliefas

I *Kemspill Mark 4.0* antas transport av föroreningar som är lättare än vatten vara enbart vertikal i den omätta zonen och horisontell spridning antas inträffa först då grundvattenytan nås. Beräkningen av kemikaliefastransporten sker i steg då hänsyn tas till fler och fler faktorer. Detta avsnitt innehåller de beräkningssteg som leder fram till en potentiell transport av kemikaliefasen som inte tar hänsyn till utsläppets volym, vilket istället görs i det sista steget som kontrollerar om transporten har avstannat till följd av fullständig retention och beräknar aktuell²⁶ spridning, se Avsnitt 4.3.4.

Föroreningar som är tyngre än vatten antas transporteras vertikalt tills dess att berggrunden nås då den i verkligheten följer dess lutning och sprickor. Eftersom det inte går att göra enkla generella antaganden om berggrundens lutning och sprickighet beräknas endast vertikal transport och ett textmeddelande ger information om huruvida föroreningen nått eller väntas nå berggrunden.



Figur 22. Inparametrar som behövs för beräkning av potentiell kemikaliefastransport, resultatet används i fortsatta beräkningar.

²⁵ Potentiell transport avser i denna rapport den sträcka kemikaliefasens front från ett utsläpp med obegränsad volym skulle ha förflyttats vid angiven tid.

²⁶ Aktuell spridning avser i denna rapport den sträcka som kemikaliefasens front från modellerat utsläpp förflyttats vid angiven tid.

1. Konvertera enheter till SI-standard enligt Bilaga 3.

2. En vertikal transport som motsvarar ett obegränsat utsläpp i en jord med residual vattenmättnad och ett oändligt stort djup till grundvattenyta samt berggrund beräknas med Ekvation 7 som baseras på Darcys lag. Totalpotentialgradienten sätts till ett eftersom trycket i kemikaliepelaren antas vara konstant.

$$S_{K,Z,1} = \frac{Kk_{r,K}}{p} \frac{\nu_V}{\nu_K} \frac{dh}{dz} t \quad (7)$$

$S_{K,Z,1}$	Vertikal spridning av kemikaliefasen vid residual vattenmättnad [m]
K	Mättad hydraulisk konduktivitet för vatten [m s^{-1}]
$k_{r,K}$	Kemikaliefasens relativa permeabilitet vid residual vattenmättnad [-]
p	Porositet [$\text{m}^3_{\text{Porer}} \text{m}^{-3}_{\text{Mark}}$]
ν_V	Kinematisk viskositet för vatten [$\text{mm}^2 \text{s}^{-1}$]
ν_K	Kinematisk viskositet för kemikalien [$\text{mm}^2 \text{s}^{-1}$]
dh/dz	Vertikal hydraulisk gradient [-]
t	Tid sedan spill [s]

Tabell 18. Konstanter som används i Ekvation 7.

Konstanter	
ν_V	$1 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$
$k_{r,K}$	1
dh/dz	1

3. Relativ permeabilitet beror av både vatten- och kemikalie-mättnad vilka inte är kända, vad som dock kan konstateras är att vattenmättnaden är större i kapillärzonen närmare grundvattenytan. Den vertikala transport som beräknas i stycke två antar att relativ permeabilitet är ett och förutsätter därmed residual vattenmättnad i hela marken. För att ta hänsyn till kapillärzonen större vattenmättnad utan närmare information om exakta mättnadsförhållanden sätts den relativa permeabiliteten till 0,5 i kapillärzonen, se Ekvation 9. Ovan kapillärzonen antas den relativa permeabiliteten fortfarande vara ett.

$$\text{Om } S_{K,Z,1} > D_{\text{Kapillär}} \quad (8)$$

$$S_{K,Z,2} = D_{\text{Kapillär}} + k_{r,K,\text{Kapillär}} (S_{K,Z,1} - D_{\text{Kapillär}}) \quad (9)$$

$$\text{Om } S_{K,Z,1} \leq D_{\text{Kapillär}} \quad (10)$$

$$S_{K,Z,2} = S_{K,Z,1} \quad (11)$$

$S_{K,Z,1}$	Vertikal transport av kemikaliefasen vid residual vattenmättnad [m]
$S_{K,Z,2}$	Vertikal transport av kemikaliefasen med hänsyn till kapillärzonen högre vattenmättnad [m]
$D_{\text{Kapillär}}$	Djup till kapillärzonen [m]
$k_{r,K,\text{Kapillär}}$	Kemikaliefasens relativa permeabilitet i kapillärzonen [-]

Tabell 19. Konstant som används i Ekvation 9.

Konstant	
$k_{r,K,\text{Kapillär}}$	0,5

4. Vidare beräkningar skiljer sig åt för tunga och lätta vätskor varför föroreningen klassas som LNAPL enligt Villkor 12 eller som DNAPL enligt Villkor 13. Beräkning för LNAPLs beskrivs i stycke fem till sju medan stycke åtta behandlar DNAPLs.

$$\text{Om } \rho < \rho_w \text{ (LNAPL)} \quad (12)$$

$$\text{Om } \rho > \rho_w \text{ (DNAPL)} \quad (13)$$

ρ Kemikalies densitet [kg m⁻³]
 ρ_w Vattens densitet [kg m⁻³]

Tabell 20. Konstant som används i Villkor 12 och 13.

Konstant	
ρ_w	10 ³ kg m ⁻³

5. Med kännedom om djup till grundvattnet avgörs hur mycket kemikalie som kommer att breda ut sig i en lins flytande på grundvattenytan. I det första fallet som beskrivs med Villkor 14 har inte kemikalien nått grundvattnet vilket den har i det andra fallet (Villkor 17), linsens area beräknas då med Ekvation 19 där flödeskontinuitet samt konstant linstjocklek (h_{Lins}) antas.

$$\text{Om } S_{K,Z,2} \leq D_{Grv} \quad (14)$$

$$S_{K,Z,Potentiell} = S_{K,Z,2} \quad (15)$$

$$S_{K,X,Potentiell} = S_{K,Y,Potentiell} = \sqrt{\frac{A}{\pi}} \quad (16)$$

$$\text{Om } S_{K,Z,2} > D_{Grv} \quad (17)$$

$$S_{K,Z,Potentiell} = D_{Grv} \quad (18)$$

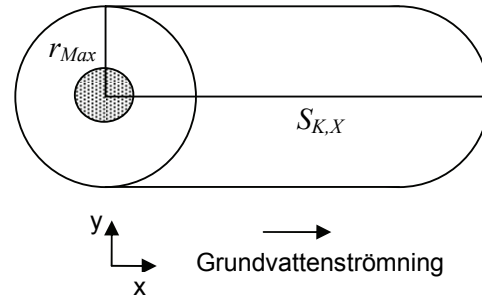
$$A_{Lins,Potentiell} = \frac{A(S_{K,Z,2} - D_{Grv})}{h_{Lins}} \quad (19)$$

$S_{K,Z,2}$ Spridning utan hänsyn till grundvattenytans läge [m]
 $S_{K,Z,Potentiell}$ Vertikal spridning för obegränsat utsläpp vid tiden t [m]
 $S_{K,X,Potentiell}$ Spridning i x-led för obegränsat utsläpp vid tiden t [m]
 $S_{K,Y,Potentiell}$ Spridning i y-led för obegränsat utsläpp vid tiden t [m]
 D_{Grv} Djup till grundvattenytan [m]
 $A_{Lins,Potentiell}$ Kemikalielinsens area vid obegränsat utsläpp [m²]
 A Spillarea [m²]
 h_{Lins} Linstjocklek [m]

6. Det modellerade utsläppet kommer till en början att tryckas ut lika mycket åt alla håll på grund av tyngden från kemikaliepelaren ovanför linsen. När hela utsläppet, förutom den del som fastnat i marken på grund av residualmättnad och sorption, flyter på grundvattenytan finns alltså ingen kemikaliepelare som trycker på och den modellerade transporten sker inte längre symmetrisk utan åt det håll grundvattenytan lutar. Figur 23 visar en skiss över hur spridningen antas ske i *Kemspill Mark 4.0* och Bilaga 5 för vidare resonemang kring kontinuitetsvillkoret. Ekvation 20 beräknar hur länge spridningen på grundvattenytan kan förväntas vara symmetrisk, eller egentligen hur stor radien (r_{Max}) är i den horisontella cirkel som spridningen till en början approximeras med. Ekvationen bygger på att den kemikalievolyms som fortfarande är i rörelse²⁷ då grundvattnet nås antas spridas ut i en cirkulär lins med konstant höjd (h_{Lins}). I det här förslaget byggs linsen först upp under den vertikala pelaren för att efterlikna verkligheten då linsen tränger undan en del grundvatten vid spridning.

$$r_{Max} = \sqrt{\frac{V - V_E - RAD_{Grv}}{h_{Lins} \pi p}} \quad (20)$$

r_{Max}	Cirkulär spridningslins maximala radie [m]
V	Utsläppets volym [m^3]
V_E	Avdunstad volym från Avsnitt 4.3.1 [m^3]
R	Retentionskapacitet [$m^3_{NAPL} m^{-3}_{Mark}$]
A	Spillarea [m^2]
D_{Grv}	Djup till grundvattnet [m]
h_{Lins}	Spridningslinsens höjd [m]
p	Jordens porositet [$m^3_{Porer} m^{-3}_{Mark}$]



Figur 23. Spridningslinsens form och förskjutning relativt spillarean (skuggad), sett ovanifrån.

7. Tidigare stycken har beräknat den horisontella spridningslinsens area och med kännedom om r_{Max} från Ekvation 20 kan den horisontella transporten av kemikaliefasen ($S_{K,X,Potentiell}$ och $S_{K,Y,Potentiell}$) från utsläppets centrum beräknas. Om spridningen vid tiden t fortfarande är symmetrisk används Ekvation 22 medan Ekvation 24 och 25 används i övriga fall.

$$\text{Om } A_{Lins,Potentiell} \leq \pi r_{Max}^2 \quad (21)$$

$$S_{K,X,Potentiell} = S_{K,Y,Potentiell} = \sqrt{\frac{A_{Lins,Potentiell}}{\pi}} \quad (22)$$

$$\text{Om } A_{Lins,Potentiell} > \pi r_{Max}^2 \quad (23)$$

$$S_{K,X,Potentiell} = \frac{A_{Lins,Potentiell} - \pi r_{Max}^2}{2r_{Max}} + r_{Max} \quad (24)$$

$$S_{K,Y,Potentiell} = r_{Max} \quad (25)$$

$S_{K,X,Potentiell}$	Spridning i x-led för obegränsat utsläpp vid tiden t [m]
$S_{K,Y,Potentiell}$	Spridning i y-led för obegränsat utsläpp vid tiden t [m]
$A_{Lins,Potentiell}$	Spridningslinsens area för obegränsat utsläpp vid tiden t [m^2]
r_{Max}	Den cirkulära spridningslinsens maximala radie [m]

²⁷ Den NAPL-volyms som fortfarande är i rörelse är alltså den volym som inte hålls kvar i marken till följd av sorption eller residualmättnad.

8. Kemikalier som är tyngre än vatten kommer inte att flyta på grundvattenytan utan vertikal transport fortsätter till dess att berggrunden nås och därför gäller inte de beräkningar som utfördes i stycke fem till sju. För fortsatta beräkningar används istället Ekvation 26 och 27 nedan, vilket innebär att vertikal totalpotentialgradient samt relativ permeabilitet antas vara lika i grundvatten- och kapillärzon. Detta motiveras med att den stora osäkerheten i djup till berggrund inte kräver större noggrannhet.

$$S_{K,Z,Potentiell} = S_{K,Z,2} \quad (26)$$

$$S_{K,X,Potentiell} = S_{K,Y,Potentiell} = \sqrt{\frac{A}{\pi}} \quad (27)$$

$S_{K,Z,2}$	Spridning utan hänsyn till grundvattenytans läge [m]
$S_{K,Z,Potentiell}$	Vertikal spridning för obegränsat utsläpp vid tiden t [m]
$S_{K,X,Potentiell}$	Spridning i x-led för obegränsat utsläpp och tiden t [m]
$S_{K,Y,Potentiell}$	Spridning i y-led för obegränsat utsläpp och tiden t [m]
A	Spridningslinsens area [m ²]

Antaganden. Grundförutsättningen för beräkningen är att marken är homogen och isotrop. Transporten antas som tidigare nämnts vara uteslutande vertikal tills dess att grundvattenytan nåts för LNAPLs respektive berggrunden nåts för DNAPLs, vilket innebär att dispersion samt diffusion försummas. Enligt Jensen (2002a) är detta antagande rimligt då lateral transport i de flesta fall är försumbar i förhållande till spillareans storlek. Grundvattenströmningen borde ha viss inverkan på en DNAPLs transport genom den mättade zonen vilket dock har försummats här.

Mättad hydraulisk konduktivitet för vatten justeras med kemikalien viskositet och relativa permeabilitet för att kunna användas i beräkningarna. Den relativa permeabiliteten sätts till 1 i den omättade zonen ovanför kapillärzonen, vilket motsvarar residual vattenmättnad och att kemikaliefasen därmed endast tränger undan luft som inte utgör något motstånd vid perkolation. Antagandet är rimligt enligt Jensen (2002a). I kapillärzonen antas en relativ permeabilitet på 0,5 i brist på information om exakta mättnadsförhållanden och samma värde används i den mättade zonen. För noggrannare resultat kan metoderna *van Genuchten - Maulem* eller *Brooks och Corey - Burdine* användas vid beräkning av relativ permeabilitet men för det finns inte tid i detta projekt (van Genuchten, 1980; Maulem, 1976; Brooks och Corey, 1964; Burdine, 1953).

Lägre permeabilitet i kapillärzonen leder i modellen till att hela kemikaliepelarens hastighet minskar när zonen nås, även i den del som fortfarande befinner sig ovan zonen. Detta för att flödeskontinuitet antas och att pelarens tvärsnittsarea är konstant lika med spillarean i hela den omättade zonen.

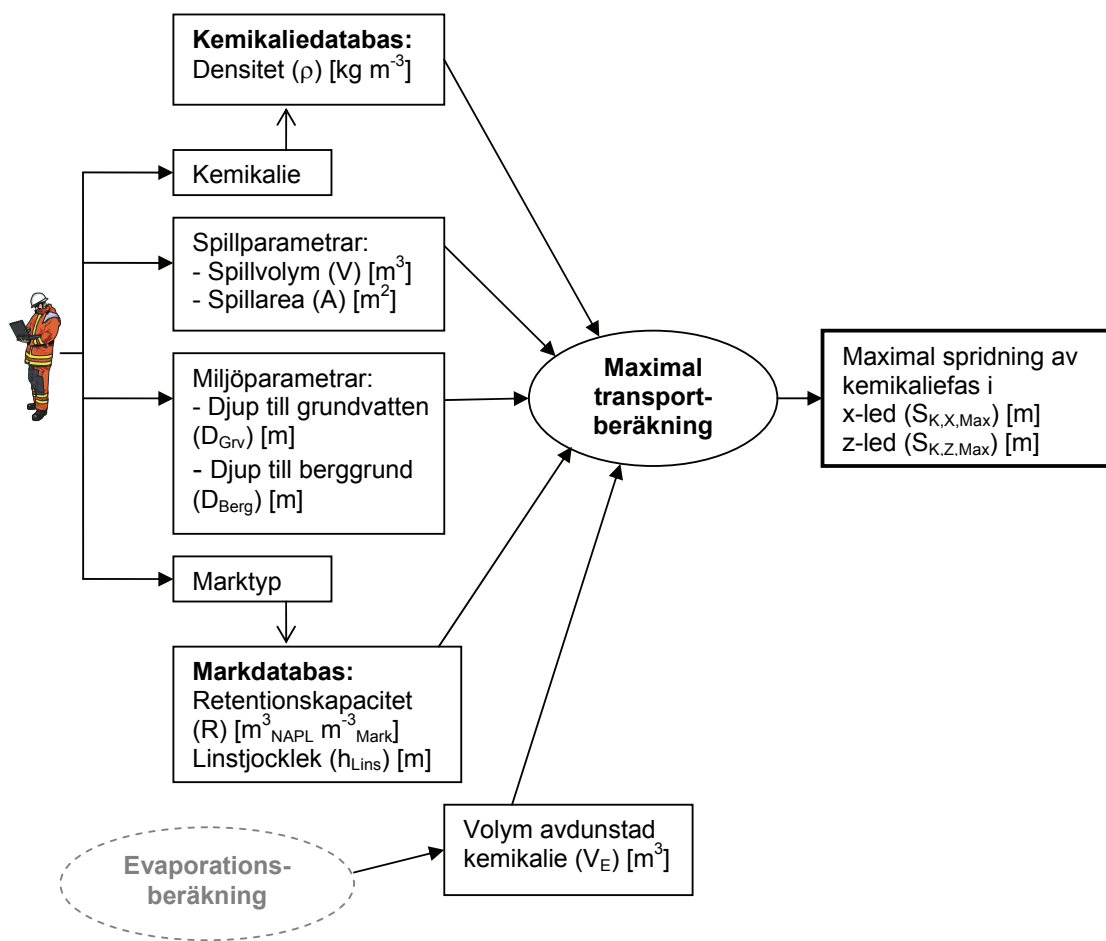
Den horisontella lins som bildas då en LNAPL når grundvattenytan antas ha en konstant tjocklek specifik för jordarten men oberoende av kemikalietyper och grundvattenytans lutning, se Avsnitt 4.1.2. Kontinuitet hos flödet antas även här vilket innebär att det radiella flödet i linsen på grundvattenytan är lika stort som det vertikala flödet i kapillärzonen, hastigheten kommer dock inte vara konstant på grund av att tvärsnittsarean som flödet sker genom förändras. Då jordegenskaper som hydraulisk konduktivitet antas vara konstanta måste den hydrauliska gradienten i horisontalplanet variera, Bilaga 5 resonerar vidare om detta.

Angående spridningslinsens form har den antagits vara cirkulär så länge det finns en kemikaliepelare som trycker på transporten, varefter cirkeln förflyttas längs grundvattenytans lutning (se Figur 23). Egentligen förväntas spridningen inte vara symmetrisk ända till r_{Max} utan transporten i x-led borde dominera över den i y-led, eftersom grundvattenytan lutar åt detta håll. Att det försummas i detta förslag ger en underskattning av transport i x-led. Inga referenser som behandlar spridningslinsens form har hittats varför endast ett teoretiskt resonemang ligger till grund för antagandet. Eftersom formen troligen beror på flera olika faktorer så som spillhastighet och jordegenskaper som genomsläpplighet och retention samt grundvattenytans lutning, rekommenderas simulering med t ex T2VOC (Falta m fl, 1995) för att kunna göra säkrare antaganden.

Spridning av DNAPLs under grundvattenytan antas i förslaget ske med samma tvärsnittsarea som i den omättade zonen. På grund av att kemikalien är ickevätande i den mättade zonen kommer inga kapillärkrafter verka och spridning sker i verkligheten oftast inte uniformt utan i mindre kanaler, vilket leder till att en mindre markvolym passeras och att retentionen därmed minskar. Modellen är alltså tvivelaktig i detta avseende och kan ge för liten spridning, osäkerheten i jorddjup anses dock vara så stor att inte noggrannare uppskattning av DNAPL-transport är motiverad.

4.3.3 Maximal²⁸ spridning av kemikaliefas

Då hela den infiltrerande delen av utsläppet nått residualmättnad avstannar kemikaliefasens transport och detta avsnitt ger ett förslag på hur det kan inkluderas i den nya modellen. I Figur 24 presenteras de indata som krävs i beräkningen; kemikalie, spillparametrar, miljöparametrar samt marktyp ges av användaren medan avdunstad kemikalie tas från beräkningarna i Avsnitt 4.3.1.



Figur 24. In- och utparametrar för beräkning av maximal kemikaliefastransport.

²⁸ Maximal spridning avser i denna rapport den sträcka kemikaliefasen hinner förflyttas innan hela volymen hålls kvar i marken på grund av residualmättnad och sorption.

Nedan följer beräkningsstegen:

1. För att beräkna den volym kemikalie som hålls kvar i marken (V_R) på grund av residualmättnad och sorption används retentionskapaciteten (R), se Ekvation 28. Maximal spridning av kemikaliefasen uppnås då all fri kemikalie är fastlagd i marken, d v s då vänsterledet i Ekvation 28 är lika med skillnad mellan total spillvolym och volym avdunstad kemikalie.

$$V_R = R(AS_{K,Z} + A_{Lins}h_{Lins}) \quad (28)$$

V_R	Volym kvarhållen kemikalie [m^3]
R	Retentionskapacitet [$m^3_{NAPL} m^{-3}_{Mark}$]
A	Spillarea [m^2]
A_{Lins}	Spridningslinsens area [m^2]
$S_{K,Z}$	Vertikal transport av kemikaliefas [m]
h_{Lins}	Linstjocklek [m]

2. Maximal spridning är olika beroende på kemikalien tyngd varför uppdelning enligt villkoren 29 och 30 görs.

$$\text{Om } \rho < \rho_w \text{ (LNAPL)} \quad (29)$$

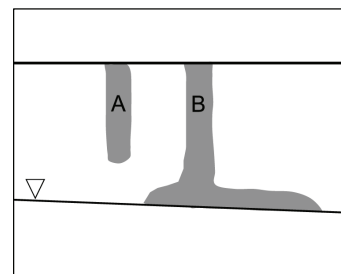
$$\text{Om } \rho > \rho_w \text{ (DNAPL)} \quad (30)$$

ρ	Kemikalien densitet [$kg m^{-3}$]
ρ_w	Vattens densitet [$kg m^{-3}$]

Tabell 21. Konstant som används i Villkor 29 och 30.

Konstant	
ρ_w	$10^3 kg m^{-3}$

3. Om kemikalien är en LNAPL är den maximala spridningen enligt ett av de två fallen A och B i Figur 25. I fall A då kemikalien inte nått grundvattenytan är Villkor 31 sant och maximal spridning beräknas enligt Ekvation 32 och 33. I fall då utsläppet varit tillräckligt stort för att nå grundvattenytan (B) är Villkor 34 sant och Ekvation 35 används för att beräkna maximal vertikal spridning. Maximal area för den horisontella linsen erhålls genom Ekvation 36 som kommer från Ekvation 28. Maximal spridning i x-led beräknas sedan enligt stycke sju i Avsnitt 4.3.2.



Figur 25. Möjliga situationer för LNAPL vid total kvarhållning.

A

$$\text{Om } D_{Grv} \geq \frac{V - V_E}{RA} \quad (31)$$

$$S_{K,Z,Max} = \frac{V - V_E}{RA} \quad (32)$$

$$S_{K,X,Max} = S_{K,Y,Max} = \sqrt{\frac{A}{\pi}} \quad (33)$$

B

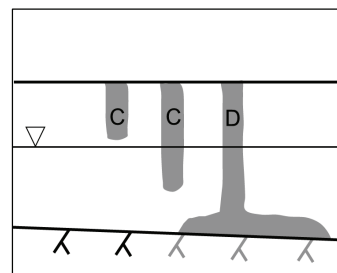
$$\text{Om } D_{Grv} < \frac{V - V_E}{RA} \quad (34)$$

$$S_{K,Z,Max} = D_{Grv} \quad (35)$$

$$A_{Lins,Max} = \frac{\frac{V - V_E}{R} - AD_{Grv}}{h_{Lins}} \quad (36)$$

D_{Grv}	Djup till grundvatten [m]
V	Spillvolym [m^3]
V_E	Volym avdunstad kemikalie enligt Avsnitt 4.3.1 [m^3]
R	Retentionskapacitet [$m^3_{NAPL} m^{-3}_{Mark}$]
A	Spillarea [m^2]
$S_{K,Z,Max}$	Maximal vertikal spridning av kemikaliefas [m]
$S_{K,X,Max}$	Maximal horisontell spridning av kemikaliefas [m]
h_{Lins}	Linstjocklek [m]
$A_{Lins,Max}$	Maximal linsarea [m^2]

4. För DNAPLs, dvs då Villkor 30 är uppfyllt, är maximal spridning enligt C eller D i Figur 26. För C då utsläppet inte nått berggrunden utförs beräkningar av maximal spridning med Ekvation 38 och 39 nedan. Om utsläppet varit tillräckligt stort för att nå berggrunden (D) är Villkor 40 uppfyllt och kemikalien kommer att följa berggrunden och dess sprickor. Att göra en bra uppskattning av berggrundens utseende är mycket svårt utan geologisk undersökning och därför görs inga beräkningar av horisontell spridning i *Kemspill Mark 4.0*. Ett textmeddelande informerar istället användaren om att utsläppet är tillräckligt stort för att berggrunden ska nås.



Figur 26. Möjliga situationer för DNAPL vid total kvarhållning.

C

$$\text{Om } D_{Berg} \geq \frac{V - V_E}{RA} \quad (37)$$

$$S_{K,Z,Max} = \frac{V - V_E}{RA} \quad (38)$$

$$S_{K,X,Max} = S_{K,Y,Max} = \sqrt{\frac{A}{\pi}} \quad (39)$$

D

$$\text{Om } D_{Berg} < \frac{V - V_E}{RA} \quad (40)$$

Utsläppet är tillräckligt stort för att nå berggrunden och när det sker kommer kemikalien att följa berggrundens lutning och sprickor

D_{Berg}	Djup till berggrund [m]
V	Spillvolym [m^3]
V_E	Volym avdunstad kemikalie enligt Avsnitt 4.3.1 [m^3]
R	Retentionskapacitet [$m^3_{NAPL} m^{-3}_{Mark}$]
A	Spillarea [m^2]
$S_{K,Z,Max}$	Maximal vertikal spridning av kemikaliefas [m]
$S_{K,X,Max}$	Maximal horisontell spridning av kemikaliefas [m]

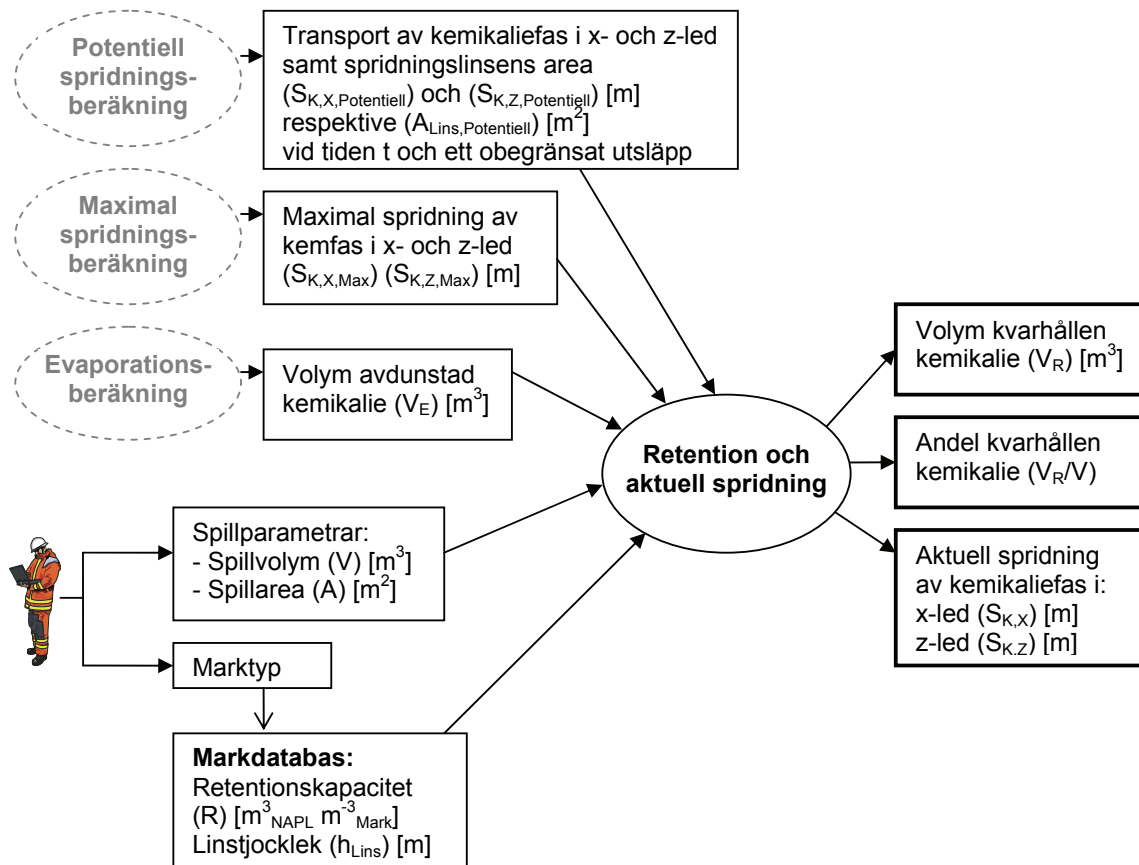
Antagande. Även i detta avsnitt görs antagande om att horisontell transport påbörjas först då grundvattenytan nås för lätta kemikalier och först då berggrunden nås för tunga kemikalier. Typvärden för retentionskapaciteten tar hänsyn till vald jordart och kemikaliers viskositet men är oberoende av vatteninnehåll i marken och värden för omätnad zon används för alla situationer vilket ger liten kvarhållning och stor spridning se Avsnitt 4.1.2.

Förslaget till *Kemspill Mark 4.0* är enligt domänen i Kapitel 3 anpassat för vätskor med låg löslighet och klarar inte av att beräkna transport av mer vattenlösliga ämnen. Bland annat på grund av att andel av total spillvolym som löser sig i vatten försummas då maximal spridning beräknas.

4.3.4 Retention och aktuell spridning

I *Kemspill Mark 3.4* antas en mängd NAPL motsvarande 10 % av markvolymen mellan spillarea och grundvattenyta hållas kvar på grund av residualmättnad och sorption. Procentsatsen är konstant och oberoende så väl av kemikalietyper som jordart och markvolymen mellan spillyta och grundvattnet används oavsett hur stor spridningen är. Andel kvarhållen kemikalie av det totala utsläppet ges i ett textmeddelande men spridningen påverkas inte.

I den nya versionen, *Kemspill Mark 4.0*, tas hänsyn till skillnad mellan jordarters förmåga att hålla kvar kemikalier med olika egenskaper, retentionen beräknas som sig bör på hela den passerade markvolymen och då all kemikalie nått residualmättnad avstannar transporten. Det här kapitlet ger förslag på tillvägagångssätt för att åstadkomma att den modellerade transporten avstannar vid maximal spridning och spridning av kemikaliefas i vertikal- och horisontalled vid aktuell tidpunkt, $S_{K,Z}$ respektive $S_{K,X}$, beräknas tillsammans med den volym kemikalie som vid tillfället hålls kvar i marken, V_R . I Figur 27 presenteras erforderliga indata.



Figur 27. In- och utparametrar för beräkning av kvarhållen volym kemikalie samt aktuell transport av kemikaliefasen.

1. Då den potentiella spridningen i Avsnitt 4.3.2 inte tagit hänsyn till retention och utsläppets storlek kan den vara större än den verkliga. För att beräkna verklig vertikal och horisontell spridning för kemikaliefasen, $S_{K,Z}$ och $S_{K,X}$, samt avgöra om transport pågår eller om maximal spridning har nåtts på grund av total retention, jämförs total perkolationsvolym med den kvarhållna volym som erhålls då potentiell transport sätts in i Ekvation 28. De olika fallen presenteras i stycke två och tre nedan.

$$V_{R,Potentiell} = R(AS_{K,Z,Potentiell} + h_{Lins} A_{Lins,Potentiell}) \quad (41)$$

$V_{R,Potentiell}$	Volym kvarhållen kemikalie beräknad på ett obegränsat utsläpps spridning [m ³]
V_R	Volym kvarhållen kemikalie [m ³]
V_E	Volym avdunstad kemikalie enligt Avsnitt 4.3.1 [m ³]
V	Spillvolym [m ³]
R	Retentionskapacitet [m ³ _{NAPL} m ⁻³ _{Mark}]
A	Spillarea [m ²]
$A_{Lins,Potentiell}$	Den horisontella linsens area för ett obegränsat utsläpp vid tiden t från Avsnitt 4.3.2 [m ²]
h_{Lins}	Linstjocklek [m]
$S_{K,Z}$	Vertikal spridning av kemikaliefas [m]
$S_{K,X}$	Horisontell spridning av kemikaliefas [m]
$S_{K,Z,Potentiell}$	Vertikal spridning för obegränsat utsläpp vid tiden t från Avsnitt 4.3.2 [m]
$S_{K,X,Potentiell}$	Spridning i x-led för obegränsat utsläpp vid tiden t från Avsnitt 4.3.2 [m]
$S_{K,Z,Max}$	Maximal vertikal transport av kemikaliefas från Avsnitt 4.3.3 [m]
$S_{K,X,Max}$	Maximal horisontell transport av kemikaliefas från Avsnitt 4.3.3 [m]

2. Om Villkor 42 är uppfyllt är föroreningen fortfarande i rörelse och den potentiella spridningen är verklig enligt Ekvation 44 och 45. Beräknad retention stämmer också.

$$\text{Om } V_{R,Potentiell} < V - V_E \quad (42)$$

$$V_R = V_{R,Potentiell} \quad (43)$$

$$S_{K,Z} = S_{K,Z,Potentiell} \quad (44)$$

$$S_{K,X} = S_{K,X,Potentiell} \quad (45)$$

3. Om istället Villkor 46 är sant har transport upphört och kemikaliefasen har nått maximal spridning (Ekvation 48 och 49). Kvarhållen kemikalie beräknas således med Ekvation 47.

$$\text{Om } V_{R,Potentiell} \geq V - V_E \quad (46)$$

$$V_R = V - V_E \quad (47)$$

$$S_{K,Z} = S_{K,Z,Max} \quad (48)$$

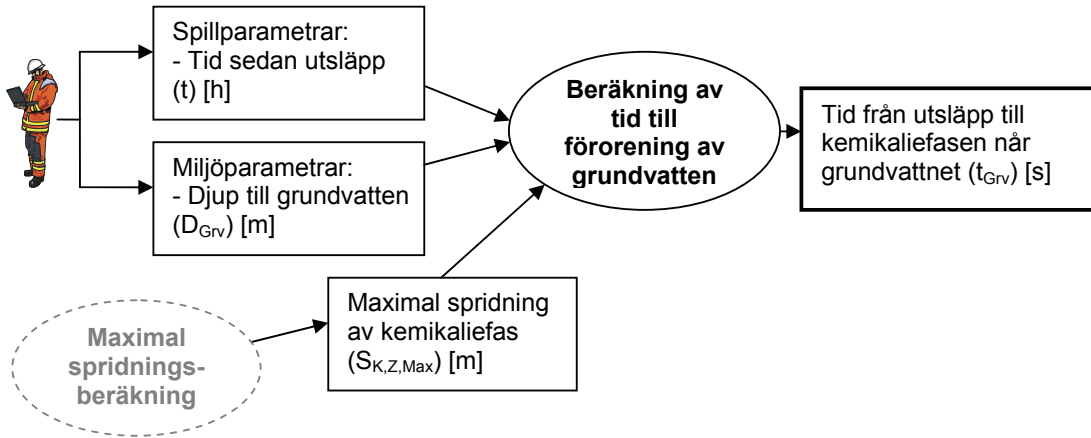
$$S_{K,X} = S_{K,X,Max} \quad (49)$$

4. Andelen kvarhållen kemikalie erhålls genom division mellan volym kvarhållen kemikalie (V_R) och total spillvolym (V).

Antaganden. Vid beräkning av den andel av utsläppet som hålls kvar i marken och hur långt kemikaliefasen har spridits vid den aktuella tiden ligger samma antaganden till grund som i det föregående kapitlet (4.3.3).

4.3.5 Tid till grundvattenkontaminering

För att beräkna hur lång tid det tar innan utsläppet når grundvattnet, vilket är en av den nya modellens utparametrar, kan beräkningarna i detta avsnitt följas. Figur 28 presenterar de indata som krävs.



Figur 28. In- och utparametrar för beräkning av hur lång tid det tar från utsläppet till grundvattnet förorenas.

1. Gör om enheter till SI-standard enligt Bilaga 3.

2. För utsläpp vars maximala spridning i vertikalled är mindre än grundvattendjupet ges textmeddelandet nedan.

$$\text{Om } S_{K,Z,Max} < D_{Grv} \quad (50)$$

Kemikaliefasen når inte grundvattnet tack vare kvarhållning i marken

$S_{K,Z,Max}$ Maximal vertikal transport av kemikaliefas från Avsnitt 4.3.3 [m]
 D_{Grv} Djup till grundvatten [m]

3. I de fall då utsläppet varit så stort att den maximala transporten i vertikalled är lika med eller större än grundvattendjupet beräknas när grundvattnet nås av föroreningen. Ovan kapillärzonen transporteras kemikaliefaserna med hastigheten $v \cdot k_{r,K}$ och i kapillärzonen är dess hastighet lägre, $v \cdot k_{r,K,Kapillär}$, där v beskrivs i Ekvation 52 (Se Avsnitt 4.3.2). Tiden tills grundvattnet förorenas, t_{Grv} , kan därför beräknas med Ekvation 53.

$$\text{Om } S_{K,Z,Max} \geq D_{Grv} \quad (51)$$

$$v = \frac{K \nu_V}{p \nu_K} \frac{dh}{dz} \quad (52)$$

$$t_{Grv} = \frac{D_{Kapillär}}{\nu k_{r,K}} + \frac{D_{Grv} - D_{Kapillär}}{\nu k_{r,K,Kapillär}} \quad (53)$$

$S_{K,Z,Max}$	Maximal vertikal transport av kemikaliefas från Avsnitt 4.3.3 [m]
D_{Grv}	Djup till grundvatten [m]
$D_{Kapillär}$	Djup till Kapillärzonen [m]
t_{Grv}	Tid från utsläpp till kemikaliefasen når grundvattnet [s]
ν	Kemikaliefasens hastighet utan hänsyn till vattenmättnad [m s ⁻¹]
K	Mättad hydraulisk konduktivitet för vatten [m s ⁻¹]
$k_{r,K}$	Kemikaliefasens relativa permeabilitet vid residual vattenmättnad [-]
$k_{r,K,Kapillär}$	Kemikaliefasens relativa permeabilitet i kapillärzonen [-]
p	Porositet [m ³ _{Porer} m ⁻³ _{Mark}]
ν_V	Kinematisk viskositet för vatten [mm ² s ⁻¹]
ν_K	Kinematisk viskositet för kemikalien [mm ² s ⁻¹]
dh/dz	Vertikal hydraulisk gradient [-]

Tabell 22. Konstanter som används i Ekvation 52 och 53.

Konstanter	
ν_V	1 mm ² s ⁻¹
$k_{r,K}$	1
$k_{r,K,Kapillär}$	0,5
dh/dz	1

4. Textmeddelanden informerar användaren om huruvida kemikaliefasen har nått grundvattnet alternativt om hur många timmar det väntas nå grundvattnet.

$$\text{Om } t_{Grv} \leq t \quad (54)$$

Kemikaliefasen har nått grundvattnet

$$\text{Om } t_{Grv} > t \quad (55)$$

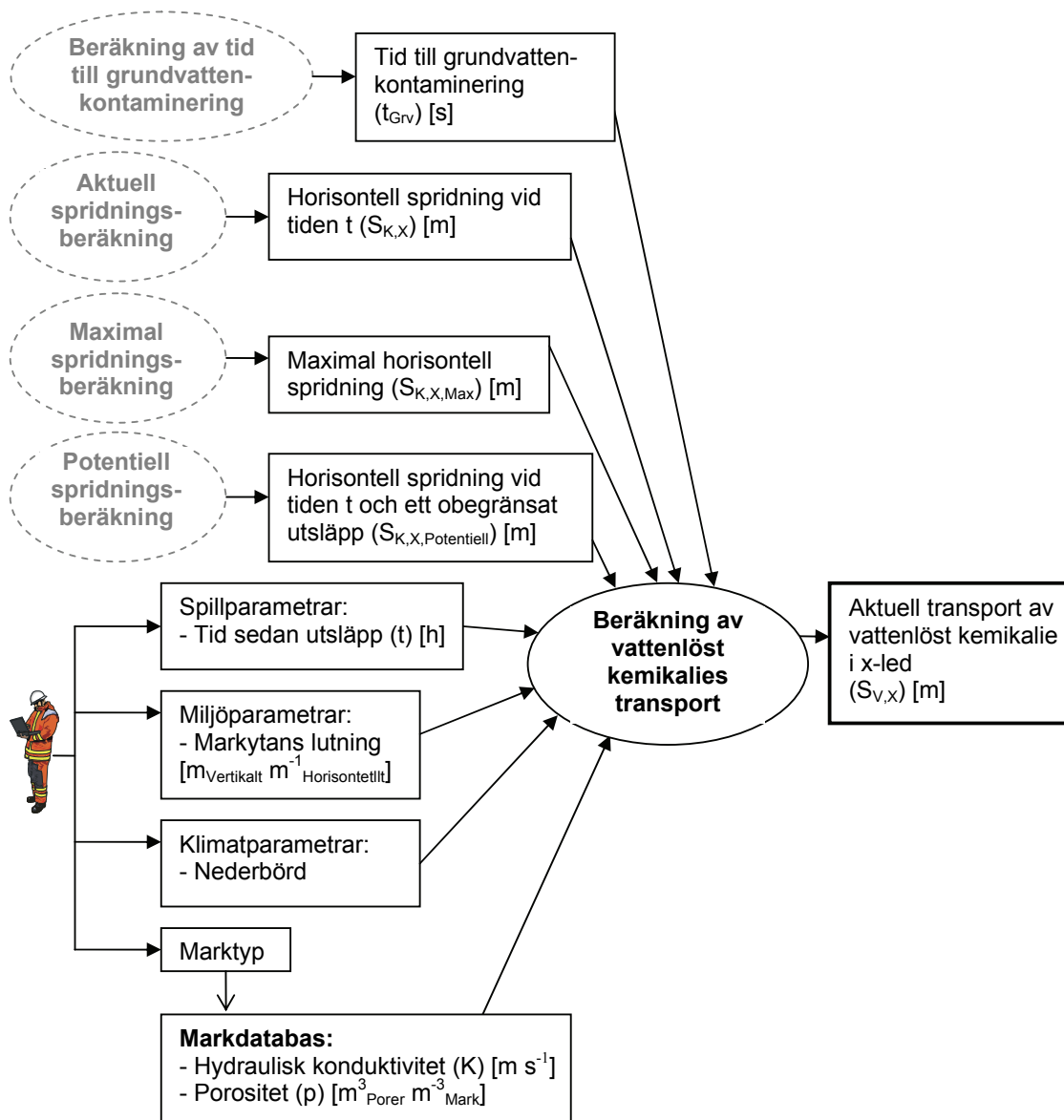
Kemikaliefasen når grundvattnet om ca "[$(t_{Grv} - t)/3600$]" timmar

Antaganden. Grundvattnet antas förorenas samtidigt som kemikaliefasen når dess yta förövrigt ligger samma antaganden till grund som vid beräkning av potentiell transport av kemikaliefas i Avsnitt 4.3.2.

4.3.6 Transport av vattenlöst kemikalie

Det nuvarande *Kemspill Mark 3.4* beräknar transport av fri kemikaliefas respektive vattenlöst kemikalie parallellt för alla kemikalier, både i den omättade zonen samt då föroeningen nått grundvattnet. Ingen hänsyn tas till löslighet eller utspädning vilket inte heller kommer att göras i den nya versionen av modellen men några enkla förbättringar föreslås.

Vertikal spridning i den omättade zonen antas i det nya förslaget ske enbart som fri kemikaliefas och således förekommer föroeningen i vattenfas först när grundvattnet nåtts, varefter den transporteras med grundvattnets hastighet. Vid nederbörd kommer dock markvattnet transporteras nedåt och infiltrerande vatten kan föra med sig vattenlöst kemikalie till grundvattnet som föroenas utan att kemikaliefasen nått dit. I Figur 29 presenteras de inparametrar som behövs vid beräkning av vattenlöst kemikalietransport vid angiven tid.



Figur 29. In- och utparametrar som krävs för beräkning av vattenlöst kemikalietransport.

Följande steg kan användas vid beräkningen.

1. Konvertera enheter till SI-standard enligt Bilaga 3. Nedanstående beteckningar används i avsnittet.

t	Tid sedan utsläpp [s]
t_{Grv}	Tid från utsläpp till kemikaliefasen når grundvattenytan enligt Avsnitt 4.3.5 [s]
$t_{Cirkulär}$	Tid under vilken kemikaliefasen sprids cirkulärt på grundvattenytan [s]
ρ	Kemikalies densitet [kg m^{-3}]
ρ_w	Vattens densitet [kg m^{-3}]
$S_{K,X}$	Kemikaliefasens horisontella spridning vid tiden t enligt Avsnitt 4.3.4 [m]
$S_{V,X}$	Vattenfasens aktuella horisontella spridning [m]
r_{Max}	Cirkulär kemikalielins maximala radie [m]
K	Mättad hydraulisk konduktivitet för vatten [m s^{-1}]
$k_{r,K,Kapillar}$	Kemikaliefasens relativa permeabilitet i kapillärzonen [-]
p	Porositet [$\text{m}^3_{\text{Porer}} \text{m}^{-3}_{\text{Mark}}$]
R	Retentionskapacitet [$\text{m}^3_{\text{NAPL}} \text{m}^{-3}_{\text{Mark}}$]
ν_V	Kinematisk viskositet för vatten [$\text{mm}^2 \text{s}^{-1}$]
ν_K	Kinematisk viskositet för kemikalien [$\text{mm}^2 \text{s}^{-1}$]
dh/dz	Vertikal hydraulisk gradient [-]
dh/dx	Hydraulisk gradient i x-led [-]
dD_{Grv}/dx	Grundvattenytans lutning i x-led [-]
v	Kemikaliefasens hastighet utan hänsyn till vattenmättnad [m s^{-1}]
h_{Pelare}	Kemikaliepelarens höjd då den når grundvattnet [m]
V	Utsläppets volym [m^3]
V_E	Avdunstad volym från Avsnitt 4.3.1 [m^3]
A	Spillarea [m^2]

2. Vid ett utsläpp då det regnar ges varning om att grundvattnet kan förorenas redan innan kemikaliefasen enligt beräkning nått grundvattnet.

Om nederbörd och $t_{Grv} \geq t$ (56)

Regnet påskyndar transporten av vattenlöst kemikalie och det är risk för förorening av grundvattnet

3. Om det inte regnar och om utsläppet ännu inte har nått grundvattnet enligt beräkningarna i Avsnitt 4.3.5 antas transport i vattenfas vara försumbar.

Om ingen nederbörd och $t_{Grv} \geq t$ (57)

Transport av vattenlöst kemikalie är liten

4. Beräkningarna skiljer sig åt för lätta kemikalier (Villkor 58) och tunga kemikalier (Villkor 59). För de förstnämnda följs beräkningarna i stycke fem till sju nedan medan stycke åtta används för DNAPLs.

Om $\rho < \rho_w$ (LNAPL) (58)

Om $\rho > \rho_w$ (DNAPL) (59)

Tabell 23. Konstant som används i Villkor 58 och 59.

Konstant	
ρ_w	10^3 kg m^{-3}

5. När kemikaliepelaren når grundvattnet löser sig en del av föroreningen och transporteras med grundvattnets hastighet. Så länge kemikaliefasen sprids i en cirkulär lins på grundvattenytan (Villkor 61), dvs så länge det finns en kemikaliepelare som trycker ut den horisontella linsen, kommer den transporten att vara snabbare än grundvattnets hastighet. Eftersom löslighetsjämvikt eftersträvas antas fri och löst kemikalie ha samma horisontella utbredning (Ekvation 62) under denna tid, senare kommer den lösta föroreningens transport att vara större.

$$\text{Om } t_{Grv} < t \quad (60)$$

$$\text{Om } S_{K,X} \leq r_{Max} \quad (61)$$

$$S_{V,X} = S_{K,X} \quad (62)$$

6. Då kemikaliefasens symmetriska transport upphört (Villkor 63) fortsätter linsen enligt Avsnitt 4.3.2 åt det håll grundvattenytan lutar. Linsens hastighet påverkas av kapillärzonens relativa permeabilitet som är mindre än ett och kommer därför att vara långsammare än grundvattnet. För att uppskatta transport av löst förorening ($S_{V,X}$) adderas den sträcka som en löst partikel förflyttats sedan NAPL-fasens cirkulära spridning upphört, till den cirkulära spridningens maximala utbredning (r_{Max}) enligt Ekvation 64. Partikelhastigheten grundas på Darcys lag och den hydrauliska gradienten är lika med grundvattenytans lutning.

$$\text{Om } S_{K,X} > r_{Max} \quad (63)$$

$$S_{V,X} = \frac{K}{p} \frac{dh}{dx} (t - t_{Grv} - t_{Cirkulär}) + r_{Max} = \frac{K}{p} \frac{dD_{Grv}}{dx} (t - t_{Grv} - t_{Cirkulär}) + r_{Max} \quad (64)$$

7. För att kunna använda Ekvation 68 krävs beräkning av hur lång tid kemikalielinsens cirkulära spridning pågår ($t_{Cirkulär}$). Som tidigare nämnts antas cirkulär spridning ske så länge kemikaliepelaren trycker på transporten och således beräknas $t_{Cirkulär}$ som kemikaliepelarens höjd (h_{Pelare}) då den når grundvattnet dividerad med dess hastighet, $v \cdot k_{r,K,Kapillär}$, enligt Ekvation 67. Hastigheten v beräknas med Ekvation 65 och pelarens höjd då den når grundvattnet beskrivs i Ekvation 66 som totalt utsläppt volym minus det som evaporerat från spillytan eller fastnat i marken, genom spillarea och porositet.

$$v = \frac{K}{p} \frac{v_V}{v_K} \frac{dh}{dz} \quad (65)$$

$$h_{Pelare} = \frac{V - V_E - RAD_{Grv}}{Ap} \quad (66)$$

$$t_{Cirkulär} = \frac{h_{Pelare}}{v k_{r,K,Kapillär}} \quad (67)$$

Tabell 24. Konstanter som används i ekvationerna 65-67.

Konstanter	
ν_V	1 mm ² s ⁻¹
$k_{r,K,Kapillär}$	0,5
dh/dz	1

8. Löst kemikalie som är tyngre än vatten transporteras med grundvattnets hastighet enligt Ekvation 68.

$$S_{V,X} = \frac{K}{p} \frac{dh}{dx} (t - t_{Grv}) + \sqrt{\frac{A}{\pi}} = \frac{K}{p} \frac{dD_{Grv}}{dx} (t - t_{Grv}) + \sqrt{\frac{A}{\pi}} \quad (68)$$

Antaganden. Antagandet om att ingen transport av vattenfasen sker i den omrättade zonen vid uppehållsväder förutsätter hydrostatisk jämvikt före utsläppet, vilket är rimligt enligt Jensen (2002b). Vid nederbörd råder dock inte jämvikt utan vatten transporteras nedåt och risken för förorening av grundvattnet ökar, ett varningsmeddelande ges, men beräkning av tid till grundvattenkontaminering (t_{Grv}) och transport av löst kemikalie i vattenfasen ($S_{V,X}$) påverkas inte. En tänkbar lösning är att beräkna infiltration med Green-Ampt-metoden och använda parametervärden från t ex Chow m fl (1988).

Då den sträcka som vattenlöst kemikalie transporterats beräknas tas ingen hänsyn till utspädning, d v s spridningen har ingen begränsning utan kommer att fortsätta i oändlighet, vilket kan diskuteras. För alla ämnen, hur giftiga de än är, finns en koncentrationsgräns där de varken påverkar levande organismer eller miljön negativt och rimligen borde modellens transport avstanna då denna koncentration underskrids. Det finns metoder att beräkna koncentration av ett ämne vid en viss tid på ett bestämt avstånd från utsläppsplatsen, t ex med advektion-dispersion-ekvationen i Domenico och Schwartz (1997) till vilken det finns analytiska lösningar, men med hänvisning till modellens domän (se Kapitel 3) som klargör att modellen ska användas inom några timmar efter ett utsläpp motiveras förenklingen som gjorts. Ett problem är också att det bara finns riktvärden med människan som referens i kemikaliedatabasen *Farliga ämnen* och eftersom människor i flera fall är mindre känsliga än andra organismer är dessa riktvärden inte användbara.

Markytan och grundvattenytan antas vara parallella och markytans lutning används således som hydraulisk gradient, förutom om sjö eller vattendrag finns nära utsläppsplatsen då grundvattenytans lutning antas vara större, motsvarande den vid stor marklutning, se Avsnitt 4.1.2.

5 DISKUSSION

5.1 JÄMFÖRELSE MED BEFINTLIG VERSION AV KEMSPILL MARK

Det finns några principiellt viktiga förändringar i det här förslaget jämfört med den befintliga versionen, *Kemspill Mark 3.4*:

- Användning av modellen underlättas genom fördefinierade alternativ för minde lättillgängliga inparametrar
- Samtliga inparametrar kan anges numeriskt och användaren kan välja att göra detta för en eller flera inparametrar för ökad noggrannhet i modellresultatet
- Brister i beräkningarna rättas till
- Fler processer inkluderas i modellen för att förbättra resultatet
- Enligt användares önskemål ges fler utparametrar
- Modellens osäkerhet tydliggörs för användaren

Angående utparametrarna ges i det här förslaget utöver spridning vid angiven tidpunkt även maximal transport, tid till förorening av grundvattnet samt hur stor andel av utsläppet som har avdunstat respektive fastlagts i marken på grund av retention. För att tydliggöra modellresultatets osäkerhet ges utparametrarna som det mest sannolika värdet tillsammans med ett intervall med så många värdesiffror som kan motiveras, se Avsnitt 4.2. I *Kemspill Mark 3.4* ges spridning med en decimeters noggrannhet vilket ger en klart felaktig bild av modellens precision.

Som beskrivits tidigare i rapporten tar *Kemspill Mark 3.4* hänsyn till retention vid beräkning av vertikal kemikaliefastransport och anger om maximal spridning har nåtts, medan horisontell transport saknar begränsning. Baserat på jämförelse mellan utsläppt volym och tio procent av markvolymen mellan spillarea och grundvattenyta anges i ett textmeddelande hur stor andel av utsläppet som kan hållas kvar i marken, vilket är missvisande eftersom hela utsläppet alltid kan hållas kvar i marken tack vare residualmättnad och sorption, det är bara en fråga om hur lång tid det tar och hur långt föroreningen hinner transporteras innan detta sker. I det här förslaget beräknas retention på hela den markvolym som kemikaliefasen har passerat och både vertikal och horisontell kemikaliefastransport har en maximal utsträckning.

Efter kontroll av programkoden kan konstateras att det *Kemspill Mark 3.4* egentligen beräknar är om transport förväntas upphöra innan grundvattnet nås genom antagande om en retentionskapacitet på 0,1 för samtliga jordarter. I de litteratursökningar som gjorts i samband med denna rapport har få så höga retentionskapaciteter påträffats. I det här förslaget varierar retentionskapaciteten beroende av både jordart samt av kemikalien viskositet och bara lera i kombination med riktigt högviskösa kemikalier som t ex Eldningsolja 2 ger retentionskapaciteter motsvarande den befintliga modellens generella värde, övriga typvärden är betydligt lägre, se Tabell 6. *Kemspill Mark 3.4* överskattar troligen retention i marken och underskattar därmed transporten, dessutom finns ingen begränsning av spridningen utan den fortsätter i oändlighet, även i de fall då det meddelas att hela utsläppet hålls kvar. I det här förslaget har den fria kemikaliefasen begränsad spridning.

Vid beräkning av vertikal transport i *Kemspill Mark 3.4* används som tidigare nämnts darcyhastigheten dividerad med porositeten medan uttrycket för horisontell baseras endast på darcyhastigheten. Detta är motsägelsefullt och kan inte motiveras, även horisontell transport borde divideras med porositeten. Detta och andra felaktigheter i beräkningarna har korrigerats i det här förslaget.

5.2 FÖRENKLINGAR I KEMSPILL MARK 4.0

Trots förbättringar jämfört med den befintliga versionen, *Kemspill Mark 3.4*, innebär beräkningarna i Avsnitt 4.3 en grov förenkling av verkligheten och utöver de antaganden som krävs för att använda presenterade ekvationer²⁹ har flera processer som sker i marken helt försumrats. Förhoppningen är dock att försumrade processer bidrar till transport i så liten utsträckning att resultatet även utan dem blir tillfredställande inom modelldomänen. Detta avsnitt tar upp några av de processer som försumrats.

Ingen hänsyn har tagits till diffusion och dispersion i beräkningarna. Diffusion av vätskefaser påverkar framförallt transport i jord med låg konduktivitet samt småskalig transport (Falta, 2002), varför beräknad spridning i t ex lera är mer osäker än för övriga jordarter. Dispersion används ofta då transport av lösta kemikalier modelleras men väldigt sällan i flerfasmodeller (Falta, 2002). I beräkningarna tas heller inte hänsyn till kemiska reaktioner eftersom det anses vara alltför komplext och svårapplicerat med tanke på att de vanligaste kemikalierna vid utsläpp består av ett flertal komponenter med olika egenskaper. Jämvikt mellan kemikalie i vatten- och kemikaliefas vid grundvattenytan behandlas endast indirekt då transport av löst förorening och kemikaliefas antas vara lika så länge spridningslinsen är cirkulär (Ekvation 60). I den omrättade zonen bortses helt från jämvikten fränsett ett textmeddelande som varnar för att föroreningen kan nå grundvattnet snabbare vid nederbörd. Som tidigare nämnts grundas detta antagande på hydrostatisk jämvikt i marken före utsläppet vid uppehållsväder vilket är rimligt enligt Jensen (2002b).

Evaporation antas ske från spillytan men i övrigt försummas avdunstning från både kemikaliefas och vattenlöst kemikalie i marken. Richards approximation används vilket innebär att gasstrycket är konstant lika med atmosfärstryck i tid och rum och att transport av gasfas i marken uteblir (Parker, 1989). Kemikalie i gasfas kan dock transporteras genom diffusion men då evaporation i marken försummas tas heller ingen hänsyn till detta. Anledningen till att gasfasen försummas helt i marken är att dess inverkan på transport inom modellens domän anses vara liten, i längre tidsperspektiv kan den dock vara av betydelse. Biologisk nedbrytning av petroleumprodukter är också betydande vid längre tidsförlopp men påverkan torde vara underordnad i de sammanhang då *Kemspill Mark 4.0* avses användas och försummas således.

Ett förhållande som har betydelse då transport i mark studeras vid svenska breddgrader är temperaturen. Tjälad mark blir mer heterogen på grund av islinser och spridningen blir därför svårare att förutspå. Transport av vattenfas uteblir och spridning av övriga faser är hänvisad till det luftfyllda utrymmet och är därför starkt beroende av vattenhalten vid tjälningen. En mättad jord är i stort sett ogenomsläpplig redan vid temperaturer strax under fryspunkten (Grip och Rodhe, 1994). En förbättring för framtiden vore att anpassa modellen även för användning vid tjäle.

Modellresultatet kan dock aldrig bli noggrannare än de indata som används och vissa typvärden har mycket stora sannolikhetsintervall. Exempelvis kan den hydrauliska konduktiviteten variera med flera tiopotenser inom en och samma jordart vilket för morän betyder att den största sannolika spridningen blir 100 000 gånger större än den minsta. Därför är det av stor vikt att se över de typvärden som ska användas i modellen och att sträva efter minimering av sannolikhetsintervallen.

²⁹ Se slutet av varje beräkningskapitel under *Antaganden* där de antaganden som gjorts i samband med beräkningarna finns sammanställda och motiverade.

5.3 YTTRELIGARE ASPEKTER

Komplexiteten hos kemikaliespridning i mark motiverar frågan om det över huvud taget är relevant att göra en generell modell. Då modellen dessutom ska kunna användas med ytterst lite information om jordegenskaper och av användare utan naturvetenskaplig utbildning ökar tvivlet angående hur bra resultatet från en sådan modell kan väntas bli.

Om resonemanget vänds kan dock hävdas att det finns ett stort behov av beslutsstöd i det första skedet efter olyckor med kemikalieutsläpp och att det som behövs är en mycket grov och snabb uppskattning av spridningen för att ge användaren vägledning om hur allvarlig situationen är; om akuta insatser krävs eller om det finns tid att tillkalla t ex hydrogeolog för bedömning av vilka åtgärder som är bäst i ett längre tidsperspektiv. Är användaren medveten om begränsningarna, anses en grovt förenklad modell vara till nytta. Förslaget i den här rapporten inkluderar de processer som tros ha störst påverkan på spridningen och förenklingar som gjorts har styrkts av vedertagna referenser eller grundats på teoretiskt resonemang, validering får visa om resultatet blir tillfredställande.

Metoden som använts för att bygga upp den nya versionen *Kemspill Mark 4.0* innebär att enkla ekvationer som grundas på en rad antaganden och förenklingar löses analytiskt, ett alternativ skulle kunna ha varit att använda differentialekvationer som beskriver flerfasflöden mer korrekt och lösa dem numeriskt. I praktiken hade det inneburit att förenkla en existerande mer komplex modell, som t ex T2VOC, vilken är mycket komplicerad och så omfattande förenklingar skulle ha krävts att resultatet inte anses bli mer tillförlitligt än med vald metod. Projektet hade dessutom troligtvis blivit mer tidskrävande.

Vad som däremot skulle kunna ha varit mer relevant än det förslag som presenteras här är en modell för kemikaliespridning i samband med olycka vid väg eftersom de flesta olyckor med kemikalieutsläpp som tidigare nämnts sker under transport eller parkering och således sannolikt sker på eller vid vägar (Räddningsverkets insatsstatistik, 2000-2003). Vägar kan delas in i klasser efter uppbyggnad samt dimensioner och genom att användaren anger typ av väg samt om utsläpp skett på eller bredvid vägbanan skulle spridning kunna beräknas. Möjligen kan det bli ett tänkbart framtida tillägg till *Kemspill Mark* i *RIB*. Det förslag som presenteras i denna rapport gäller för homogen mark och därmed inte för miljön kring vägar.

Kemspill Mark 4.0 använder precis som den äldre versionen jordarter som indelning för jordegenskaper, men med tillägget åsmaterial. Eftersom intervallen för vissa typvärden, främst hydraulisk konduktivitet, är mycket stora kan annan indelning vara att föredra. Kanske kan typmiljöer identifieras och representeras med snävare intervall för parametrarna. Utredning av vilken indelning som ger snävast intervall eller som är lättast för användaren att använda har inte gjorts men kan vara motiverad vid ett fortsatt arbete.

Under arbetets gång har förslag på att koppla *Kemspill Mark* till GIS framförts. Tanken har varit att användaren bara ska behöva ange spillparametrar samt koordinater för platsen och att databaser ger övrig information om marklutning, jordart, djup till grundvatten och berggrund osv. Noggrannheten i dagens kartmaterial är dock inte tillfredsställande för så lokala företeelser som spridning av utsläpp utgör och därför är GIS-koppling inte aktuell.

6 REKOMMENDATIONER

Innan den nya versionen *Kemspill Mark 4.0* inkluderas i *RIB* bör typvärden med stora sannolikhetsintervall granskas och på vilket sätt intervallen kan minimeras bör utredas. Ytterligare studier rekommenderas också för vissa andra inparametrars typvärden vilka indikerats i texten. Före användning bör modellresultatet också valideras mot uppmätta data från verkliga utsläpp, labbdata eller från mer komplexa flerfasmodeller så som T2VOC och utparametrarnas intervall bör med vägledning av valideringen anpassas för att visa total osäkerhet. En noggrann utformning av programmet för att göra modellens begränsningar tydliga för användaren rekommenderas samt testkörningar av potentiella användare för att utreda om något i det nya programmet kräver förtydligande.

Denna studie har inte berört flikarna *Sanering* och *Räddningstjänst* i *Kemspill Mark 3.4*, men indikationer har framkommit om att informationen i dessa är föråldrad och bör ses över. Information skulle lämpligen motsvara angiven kemikalie och möjligen även beräknad spridning. Om teknisk möjlighet finns vore det passande med en koppling direkt till *Farliga ämnens* flik *Räddningsinfo* som beskriver rekommenderad skyddsutrustning, förstahandsåtgärder och de främsta riskerna med kemikalien.

7 FÖRKORTNINGAR

CAS	Chemical Abstract Service
DNAPL	Dense Non-Aqueous Phase Liquid - vätska som inte är blandbar med vatten samt har större densitet än vatten, t ex PCB, klorerade kolväten och vissa pesticider
GIS	Geografiska Informationssystem
LNAPL	Light Non-Aqueous Phase Liquid - vätska som inte är blandbar med vatten samt har lägre densitet än vatten, t ex bensin och diesel
NAPL	Non-Aqueous Phase Liquid - vätskefas som inte är blandbar med vatten
RIB	Integrerat beslutsstöd för skydd mot olyckor
SGU	Sveriges Geologiska Undersökningar
SMHI	Sveriges Meteorologiska och Hydrologiska Institut
SRV	Räddningsverket
VV	Vägverket

8 REFERENSER

PUBLICERADE KÄLLOR

Atkins P. W. (1994). *Physical Chemistry*, femte upplagan, Oxford University Press, Storbritannien, ISBN 0-19-855731-0

Brooks R. H. och Corey A. T. (1964). "Hydraulic properties of porous media", Hydrology paper 3, Colorado State University, Fort Collins, Colorado

Burdine N. T. (1953). "Relative permeability calculation from pore size distribution data", Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers, nr 198, sid 71-78

Chow V. T., Maidment D. R. och Mays L. W. (1988). *Applied Hydrology*, McGraw-Hill Book Company

CONCAWE (1981). *Revised inland oil spill clean-up manual*, Rapport 7/81, Haag

Domenico P.A. och Schwartz F.W. (1997). *Physical and Chemical Hydrogeology*, andra upplagan, John Wiley & Sons, Inc., Westford, ISBN 0-471-59762-7

Eiling R. och Lilie R. (1994). *Chemiewehrhandbuch*, Storck Verlag, Hamburg, volym 1, ISBN 3-923190-41-7

Eriksson C. och Sachs C. (2004). *Kartläggning och behovsanalys av RIB – utifrån ett användarperspektiv*, Räddningsverket, Karlstad

Falta R. W., Pruess K., Finsterle S. och Battistelli A. (1995). *T2VOC User's Guide*, Lawrence Berkeley Laboratory, University of California, Earth Sciences Division

Falta R. W. (2002). Avsnitt 1.3, NAPL Mass Transfer and Transport i *The NAPL book*. Editerad av Mayer S. och Hassanizadeh S. M., Sammanfattning av kursen Contamination of soil and groundwater by NAPLs, 1-3 juli 2002, Delft, Nederländerna

Freeze R. A. och Cherry J. A. (1979). *Groundwater*, Prentice Hall Inc., USA, ISBN 0-13-365312-9

Grip H. och Rodhe A. (1994). *Vattnets väg från regn till bäck*, Hallgren och Fallgren Studieförlag AB, Karlshamn, ISBN 91-7382-762-2

Halmemies S., Gröndal S., Nenonen K. och Tuhkanen T. (2003). "Estimation of the Time Periods and Processes for Penetration of Selected Spilled Oils and Fuels in Different Soils in the Laboratory", *Spill Science & Technology Bulletin*, volym 8, nr. 5-6, sid 451-465

Jensen K. H. (2002a). Avsnitt 1.2, NAPL Fluid Flow i *The NAPL book*. Editerad av Mayer S. och Hassanizadeh S. M., Sammanfattning av kursen Contamination of soil and groundwater by NAPLs, 1-3 juli 2002, Delft, Nederländerna

Jensen K. H. (2002b). Avsnitt 2.2.1, LNAPL pooling on water table i *The NAPL book*. Editerad av Mayer S. och Hassanizadeh S. M., Sammanfattning av kursen Contamination of soil and groundwater by NAPLs, 1-3 juli 2002, Delft, Nederländerna

Jensen K. H. (2002c). Avsnitt 2.1, Residual and trapped saturations i *The NAPL book*. Editerad av Mayer S. och Hassanizadeh S. M., Sammanfattning av kursen Contamination of soil and groundwater by NAPLs, 1-3 juli 2002, Delft, Nederländerna

- Larsson, R. (1993). *Jords egenskaper*, SGI Information 1, fjärde utgåvan, Statens Geotekniska institut, Linköping
- Ledskog L. och Lundgren T. (1989). *Olje- och kemikalieutsläpp i jord*, Statens Räddningsverk och Statens Geotekniska Institut, Linköping
- Maulem Y. (1976). "A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media", *Water Resources Research*, nr 12, sid 513-522
- Mercer J. W. och Cohen R. M. (1990). "A Review of Immiscible Fluids in the Subsurface: Properties, Models, Characterization and Remediation", *Journal of Contaminant Hydrology*, nr 6 (1990), sid 107-163
- Niemi, A., Kling. T., Vaittinen, T., Vahanne, P., Kivimäki, A-L och Hatva, T. (1994). "Modeling the spreading of salt from highway de-icing in typical groundwater formations", *FinnRa Report 66/1994*, Helsingfors, ISBN 951-726-013-X, ISSN 0788-3722, (På finska med engelsk sammanfattning)
- Nilsson G. (2003). *Handledning i jordartsklassificering för mindre markvärmesystem*, SGI, Varia 527, Linköping, ISSN 1100-6692
- Parker J. C. (1995). *UST corrective action technologies: engineering design of free product recovery systems*, U.S. EPA
- Parker J. C. (1989). "Multiphase flow and transport in porous media", *Reviews of Geophysics*, nr 27/3, sid 311-328
- Rodhe A. (1997). Minell H. och Pettersson B. (redaktörer) Kapitel 4, Vattnet i skogen i *Marken i skogslandskapet*, Skogsstyrelsen, Höganäs, ISBN 91-88462-31-5
- Salomonsson G. (1995). Raab B. och Vedin H. (redaktörer), Kapitel Lufttryck och vind i *Sveriges Nationalatlas: Klimat, sjöar och vattendrag*, Sveriges Nationalatlas Förlag, Italien, ISBN 91-87760-31-2
- van Genuchten M. T. (1980). "A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils", *Soil Science Society of America Journal*, nr 44, sid 892-898
- Vanlooche R., De Borger R., Voets J. P., och Verstraete W. (1975). "Soil and Groundwater Contamination by Oil Spills; Problems and Remedies", *International Journal of Environmental Studies*, volym 8, sid 99-111
- Vedin H. (1995). Raab B. och Vedin H. (redaktörer), Kapitel Lufttemperatur i *Sveriges Nationalatlas: Klimat, sjöar och vattendrag*, Sveriges Nationalatlas Förlag, Italien, ISBN 91-87760-31-2
- Verhagen Th. L. A. och Opschoor G. (1992). Kapitel 5 Evaporation i *Methods for the calculation of physical effects – Resulting from releases of hazardous materials (liquids and gases)*, andra upplagan, Committee for the Prevention of Disasters, Voorburg
- Viberg L. (1997). Kapitel 3, Jordarternas tekniska egenskaper i *Marken i skogslandskapet*, Skogsstyrelsen, Höganäs, ISBN 91-88462-31-5
- Vägverket och Räddningsverket (1998). *Förorening av vattentäkt vid vägtrafikolycka – Hantering av risker vid petroleumutsläpp*, VV Publikation 1998:064

OPUBLICERADE KÄLLOR

Fagerlund F. och Niemi A. (2004). ”A decoupled, fraction by fraction modelling approach to the sub-surface migration of gasoline spills”, inskickad till Journal of Contaminant Hydrology

RIB (2004). *Farliga ämnen i RIB – Integrerat beslutsstöd för skydd mot olyckor* utgåva 1-2004, Räddningsverket

Räddningsverkets insatsstatistik (2000-2003). Jörgen Granefelt, Statistiker, Räddningsverket i Karlstad

PERSONLIG KORRESPONDENS

Hultberg Håkan, Meteorolog, SMHI, Norrköping, 2004-11-22

Risberg Göran, Statsgeolog, SGU, Uppsala, 2004-12-21

INTERNETKÄLLOR

Naturvårdsverkets webbsida, *Grundvattennivå*, 2005-01-14

www.naturvardsverket.se/index.php3?main=/dokument/lagar/bedgrund/grv/grvdok/grvniv.html

SGUs webbsida, *Brunnsarkivet*, 2005-01-14

www.sgu.se/sgu/sv/service/kart-tjanst_start.htm#brunn

Shan Hsin-yu, *Soil Moisture and Groundwater Recharge*, Power-point-presentation, Department of Civil Engineering, National Chiao Tung University, 2005-01-10

www.cv.nctu.edu.tw/english/faculty/Ppt-pdf/03Soil%20Moisture%20and%20Groundwater%20Recharge.pdf

ILLUSTRATIONER OCH FOTON

Eskilsson Mårten, Ställföreträdande Räddningschef, Räddningstjänsten Strängnäs

Räddningspersonal i figurerna 21, 22, 24, 27, 28 och 29 av Jönsson Stefan, Björnås Rit och Reklam, Fordonsskylt i Figur 17 av samma illustratör

BILAGA 1: KEMIKALIETABELL I KEMSPILL MARK 3.4

Nedan presenteras kemikalierna i *Kemspill Mark 3.4* med UN-nummer, densitet och viskositet samt i förekommande fall kokpunkt.

Tabell 1.1. Kemikalier i *Kemspill Mark 3.4* från A-F

Kemikalie	UN-nr	Densitet (ρ)	Kokpunkt (T_B)	Viskositet (ν_k)
		[kg/m ³]	[°C]	[mm ² /s]
Acetaldehyd	1089	0,78	21	0,40
Aceton	1090	0,79		0,43
Allyalkohol	1098	0,85		1,60
Allylklorid	1100	0,94		1,00
Ammoniak, kaustik	2672	0,90		1,00
Amylacetat	1104	0,88		1,00
Anilin	1547	1,03		4,30
Bensaldehyd	1993	1,05		2,00
Bensen	1114	0,88		1,00
Bensin	1203	0,75		1,00
Bensoylklorid	1736	1,21		1,00
Bensylklorid	1738	1,10		1,20
Brom	1744	3,10		0,32
Butadien	1010	0,62		0,30
n-Butanol	1120	0,81		4,00
iso-Butylacetat	1213	0,87		1,00
n-Butylacetat	1123	0,88		1,00
sec-Butylacetat	1123	0,87		1,00
n-Butylakrylat	2348	0,90		1,00
Cyklohexan	1145	0,78		1,30
Cyklohexanon	1915	0,95		5,00
Cyklopentan	1146	0,74		0,60
Diacetonalkohol	1148	0,94		3,00
Diesel	1202	0,84		3,00
Dietylamin	1154	0,71		0,50
Dietyltriamin	2079	0,96		7,00
Dietyleter	1155	0,71		1,00
Dimetylsulfat	1595	1,33		2,00
Dioxan	1165	1,03		2,00
Eldningsolja 1	1202	0,86		3,00
Eldningsolja 2	1202	0,86		125
Eldningsolja 3	1202	0,86		400
Epiklorhydrin	2023	1,18		1,00
Etanol	1170	0,79		5,00
Etylacetat	1173	0,90		0,50
Etylakrylat	1917	0,92		0,60
Etylamin	2270	0,87		1,00
Etylendiamin	1604	0,90		1,50
Etylklorid	1037	0,92	-12	0,90
Fosforsyra	1805	1,70		3,00
Fosgen	1076	1,42		0,90
Furfural	1199	1,16		1,40

Tabell 1.2. Kemikalier i *Kemspill Mark 3.4* från G-Ö

Kemikalie	UN-nr	Densitet (ρ) [kg/m ³]	Kokpunkt (T _B) [°C]	Viskositet (ν_k) [mm ² /s]
Hydrazin	2029	1,01		0,97
Hydrazinhydrat	2030	1,03		1,00
Hypokloritlösningar	1791	1,20		1,00
Isopropanol	1219	0,78		3,00
Isopropylamin	1221	0,69		0,50
Isopropylbensen	1918	0,86		1,00
Kaliumhydroxid	1814	1,47		4,30
Kiseltetraklorid	1818	1,49		0,30
Klorerade kolväten	9999	1,40		0,50
Kloroform	1888	1,48		0,40
Klorsvavelsyra	1754	1,77		4,00
Koldisulfid	1131	1,26		0,30
Koltetraklorid	1846	1,59		0,60
Kresol	2076	1,05		4,30
Krontonaldehyd	1143	0,85		1,00
Lacknafta	1300	0,80		0,90
Metanol	1230	0,79		0,80
Metylenklorid	1593	1,33		0,30
Metylmerkaptan	1064	0,87	6	0,20
Monoklorbensen	1134	1,11		1,00
Monoklorättiksyra	1750	1,34		1,00
Myrsyra	1779	1,22		1,50
Natriumhydroxid	1824	1,53		25
Natriumklorit	1908	1,25		1,00
Natriumvätesulfit	2693	1,48		1,00
Nitrobensen	1662	1,20		2,00
Paraldehyd	1264	0,99		1,00
Perklorosyra	1873	1,70		0,90
1-Propanol	1274	0,80		3,00
Propionsyra	1848	0,99		1,00
Pyridin	1282	0,98		1,00
Salpetersyra	2031	1,30		5,00
Saltsyra	1789	1,10		1,00
Styren	2055	0,91		0,90
Sulfonylklorid	1834	1,67		1,00
Svavelsyra	1830	1,70		50
Teraetylsilikat	1292	0,93		0,90
Tetrakloretylen	1897	1,62		1,00
Toluen	1294	0,87		1,00
2,4-Toluendiisocyanat	2078	1,22		5,00
Trietylentetramin	2259	0,98		7,00
Triklöretylen	1710	1,46		0,9
Triklorättiksyra	2564	1,50		1,00
Vinyltoluen	2618	0,90		1,00
Vätecyanid	1613	1,00		1,00
Xylen	1307	0,75		1,00
Ättiksyra	2789	1,05		1,20
Ättiksyraanhydrid	1715	1,08		0,85

BILAGA 2: JORDARTSTABELL I KEMSPILL MARK 3.4

Nedan presenteras jordartstabellen i det befintliga *Kemspill Mark 3.4*, med de typvärden för hydraulisk konduktivitet och porositet som används för de sju ingående jordarterna.

Tabell 2.1. Typvärden för hydraulisk konduktivitet och porositet som används i *Kemspill Mark 3.4*.

Jordart	Hydraulisk konduktivitet	Porositet
	[m/s]	[m ³ _{Porer} m ⁻³ _{Mark}]
Lera	10 ⁻⁹	0,50
Silt	10 ⁻⁷	0,40
Sand	10 ⁻³	0,35
Fingrus	10 ⁻²	0,30
Grovgrus	10 ⁻¹	0,31
Moig morän	10 ⁻⁸	0,15
Sandig morän	10 ⁻⁵	0,20

BILAGA 3: ENHETSKONVERTERING

För att omvandla de enheter som användaren av *Kemspill Mark 4.0* anger till SI-enheter kan följande ekvationer användas.

Temperatur	$T[^\circ C] = (T + 273.15)[K]$
-------------------	---------------------------------

Tid	$t[h] = 3600t[s]$
------------	-------------------

Ångtryck	$P[kPa] = 10^3 P[Pa]$
-----------------	-----------------------

BILAGA 4: HÄRLEDNING AV EKVATION 1

Följande ekvation ska härledas:

$$P = P_{T_1} e^{\left[\frac{T_B T_1}{T_B - T_1} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_1} \right) \right] \ln \left(\frac{P_{T_1}}{P_0} \right)} \quad (4.1)$$

P	Ångtryck vid aktuell temperatur (T) [Pa]
P_{T_1}	Tabellerat ångtryck vid temperatur T_1 [Pa]
P_0	Atmosfärstryck [Pa]
T	Lufttemperatur [K]
T_1	Temperatur vid tabellerat ångtryck [K]
T_B	Kokpunkt vid atmosfäriskt tryck [K]

Clausius-Clapeyrons ekvation kan uttryckas enligt Ekvation 4.2 (Atkins, 1994).

$$P_\alpha = P_\beta e^{-\frac{\Delta H_{\text{vap}}}{R} \left(\frac{1}{T_\alpha} - \frac{1}{T_\beta} \right)} \quad (4.2)$$

Där P_α är ångtrycket vid temperaturen T_α medan P_β är ångtrycket vid temperaturen T_β . Ekvation 4.2 används för temperaturerna T och T_1 (se Ekvation 4.3) dvs den aktuella temperaturen för vilken ångtrycket eftersöks samt den temperatur det tabellerade ångtrycket är framtaget för.

$$P = P_{T_1} e^{-\frac{\Delta H_{\text{vap}}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_1} \right)} \quad (4.3)$$

Konstant ångbildningsvärme i intervallet mellan den aktuella temperaturen (T) och kemikaliens kokpunkt (T_B) antas och Ekvation 4.2 används en gång till, denna gång för temperaturen T_1 tillsammans med T_B (se Ekvation 4.4). Kokpunktens ångtryck är per definition är lika med atmosfärstryck (Atkins, 1994).

$$P_{T_1} = P_0 e^{-\frac{\Delta H_{\text{vap}}}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_B} \right)} = P_0 e^{-\frac{\Delta H_{\text{vap}}}{R} \left(\frac{T_B - T_1}{T_B T_1} \right)} \quad (4.4)$$

Ur Ekvation 4.4 bryts $-\Delta H_{\text{vap}}/R$ ut (se Ekvation 4.5).

$$-\frac{\Delta H_{\text{vap}}}{R} = \ln \left(\frac{P_{T_1}}{P_0} \right) \left(\frac{T_B T_1}{T_B - T_1} \right) \quad (4.5)$$

Ekvation 4.5 sätts in i Ekvation 4.3 (se Ekvation 4.6).

$$P = P_{T_1} e^{\left[\frac{T_B T_1}{T_B - T_1} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_1} \right) \right] \ln \left(\frac{P_{T_1}}{P_0} \right)} \quad (4.6)$$

Vilket är lika med Ekvation 4.1 och härledningen är därmed klar.

BILAGA 5: FLÖDESKONTINUITET

Kontinuitetsvillkoret ger att kemikaliefasens vertikala flöde i kapillärzonen (Ekvation 5.1) och dess radiella flöde på grundvattenytan (Ekvation 5.2) är lika (Ekvation 5.3). Om spridningen på grundvattenytan är symmetrisk, dvs om det fortfarande finns en kemikaliepelare kvar som trycker på den radiella transporten, kan radiell hydraulisk gradient fås som en funktion av spridningslinsens radie (r). I Ekvation 5.5 presenteras förhållandet som är omvänt proportionellt. Beteckningen dh/dr används eftersom gradienten är lika i horisontalplanet alla riktningar vid symmetrisk spridning, då spridningen inte längre är symmetrisk är gradienten konstant lika med grundvattenytans lutning i x-led (Ekvation 5.7) och noll i övriga riktningar. Detta resonemang motiverar antaganden i Avsnitt 4.3.2 men används inte i beräkningarna.

$$Q_{K,Z} = AKk_{r,K,Kapillär} \frac{\nu_V}{\nu_K} \frac{dh}{dz} \quad (5.1)$$

$$Q_{K,Radiell} = 2\pi rhKk_{r,K,Kapillär} \frac{\nu_V}{\nu_K} \frac{dh}{dr} \quad (5.2)$$

$Q_{K,Z}$	Vertikalt flöde [$\text{m}^3 \text{s}^{-1}$]
$Q_{K,X,Radiell}$	Radiellt flöde [$\text{m}^3 \text{s}^{-1}$]
A	Spillarea [m^2]
K	Mättad hydraulisk konduktivitet för vatten [m s^{-1}]
$k_{r,K}$	Kemikaliefasens relativa permeabilitet [-]
$k_{r,K,Kapillär}$	Relativ permeabilitet i kapillärzonen [-]
ν_V	Kinematisk viskositet för vatten [$\text{mm}^2 \text{s}^{-1}$]
ν_K	Kinematisk viskositet för kemikalien [$\text{mm}^2 \text{s}^{-1}$]
dh/dz	Hydraulisk gradient i z-led [-]
dh/dr	Radiell hydraulisk gradient [-]
dD_{Grv}/dx	Grundvattenytans lutning i x-led [-]
$S_{K,X,Potentiell}$	Spridning i x-led för obegränsat utsläpp vid tiden t [m]
r_{Max}	Den cirkulära spridningslinsens maximala radie [m]
r	Den cirkulära spridningslinsens radie vid tiden t [m]
h	Spridningslinsens tjocklek [m]

Tabell 4.1. Konstanter som används i Ekvation 5.1 och Ekvation 5.2.

Konstanter	
ν_V	$1 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$
$k_{r,K,Kapillär}$	0,5
dh/dz	1

$$Q_{K,Z} = Q_{K,Radiell} \quad (5.3)$$

$$\text{Om } S_{K,X,Potentiell} \leq r_{Max} \quad (5.4)$$

$$\frac{dh}{dr} = \frac{A}{2\pi h} \frac{1}{r} \quad (5.5)$$

$$\text{Om } S_{K,X,Potentiell} > r_{Max} \quad (5.6)$$

$$\frac{dh}{dx} = \frac{dD_{Grv}}{dx} \quad (5.7)$$