



UPPSALA
UNIVERSITET

UPTEC W 13038

Examensarbete 30 hp
Oktober 2013

Grundvattenmodellering av föroreningstransport

Ett uppdragsanpassat beräkningsverktyg

Emil Friberg

Referat

Grundvattenmodellering av föroreningstransport – Ett uppdragsanpassat beräkningsverktyg

Emil Friberg

Målet för detta arbete var att bygga upp en modell i modelleringsprogrammet MODFLOW för spridning av förorenande ämnen i grundvattnet. Syftet med modellen var att finna en balans mellan den mycket enkla modellen som Naturvårdsverket har satt upp för förorenad mark och en fullskalig platsspecifik modell.

Utgångspunkten var att studera litteraturen för att finna lämpliga generella parametrar som beskriver föroreningstransport i grundvattnet. Tre genomförda uppdrag med förorenad mark användes som referenskälla, men även för att evaluera den framtagna modellen. Föroreningarna som förekom i dessa uppdrag och som studerades i detta arbete är bensen, PCE och arsenik. Att finna lämpliga parametrar för beskrivning av transporten visade sig vara ganska enkelt, det finns en god förståelse för vilka faktorer som har betydelse. Däremot var det svårare att finna generella värden till dessa parametrar. Sammanställningar gjorda av Naturvårdsverket var en god källa. Den uppbyggda modellen döptes till ESM.

Alla valda parametrar analyserades och modellen känslighetsanalyserades. Resultatet visade att vissa parametrar ger större känslighet än andra. Samtidigt visade analyserna att känsligheten varierar beroende på vilket intervall en viss parameter studeras samt att modellens känslighet även är beroende på värdena på de andra parametrarna. Bland annat visade det sig att dispersion alltid är en känslig parameter inom vissa intervall. Sorption och grundvattenflödets gradient visade sig enbart vara känsliga i vissa fall.

ESM jämfördes med analytiska lösningsmetoder, Naturvårdsverkets riktlinjesmodell samt de tre utvalda uppdragen. Resultatet var blandat. I jämförelsen med den enklaste analytiska lösningsmetoden med enbart advektion och dispersion överensstämde inte resultaten. Då även sorption användes blev resultatet mycket bra med en hög överensstämmelse. Det gick inte att jämföra Naturvårdsverkets modell rakt av med ESM då förutsättningarna var ganska skilda. Däremot visade jämförelsen i ett större perspektiv att ESM ger en bättre bild av föroreningsspridningen än vad Naturvårdsverkets riktlinjesmodell ger.

Även jämförelsen mellan ESM och de utvalda uppdragen gav blandat resultat, vissa fall blev resultatet mycket bra medan andra mindre. Generellt gav ESM en bra bild av föroreningssituationen och dess karaktär men den har svårigheter att återspegla verkligheten beträffande uppmätta halter och andra mer specifika parametrar. Slutsatsen blev att ESM kan användas initialt för att få en bild av situationen och att modellen är enkel att förändra men kan inte återspegla alla aspekter på föroreningstransporten.

Nyckelord: MODFLOW, MT3DMS, föroreningstransport, PCE, bensen, arsenik, riktvärde för förorenad mark

*Institutionen för geovetenskaper; luft-, vatten- och landskapslära. Uppsala universitet
Villavägen 16, Se-752 36 UPPSALA*

Abstract

Groundwater modelling of contamination transport – An assignment adapted calculation tool

Emil Friberg

The goal for this work was to build a model in the modelling program MODFLOW for spreading of contamination in groundwater. The purpose was to find a good balance between the simpler model that the Swedish Environmental protection agency has put together and a full-scale site-specific model.

The base for the work was to define which general parameters were needed to describe contamination transport in groundwater. Along with the literature, three actual cases from contaminated sites were chosen as references and for evaluation of the proposed model. The contaminants that were studied in these three examples were PCE, benzene and arsenic. Parameters which can describe the contaminant transport were relatively straight forward to define; there exists a good understanding of which parameters affect the transport. It turned out to be harder to find representative values for these parameters, but compilations by the Swedish Environmental Protection Agency have been a good source. The model that was built was named ESM.

All chosen parameters were analyzed and the model was sensitivity tested. The result showed that some parameters were more sensitive than others and in some specific ranges of values. It was for example show that dispersion was always a sensitive parameter in some ranges.

ESM was compared with some analytical solutions, the Environmental Protection Agency model and the chosen cases. The results from these comparisons were not conclusive. In the comparison between ESM and the simple analytical solution with only advection and dispersion, the ESM results did not match the analytical solution, but when sorption was added the results were in good agreement with a high similarity. It was not really possible to compare ESM and the Environmental protection agency model directly because the setup was too different. In a larger content ESM gives a better average view over the contamination spread situation.

In the comparison between ESM and the chosen cases the results were also mixed, some results showed good agreement while other results did not match at all. Generally ESM appeared to give a good picture of the contamination spread situation but the conclusion was that it can not predict pollution concentrations and other specific measured parameters. Therefore the further conclusions where that ESM can be used at a first stage to get an overview of the situation but the model can not fully predict the reality.

Key words: MODFLOW, MT3DMS, contaminant transport, modelling, PCE, benzene, arsenic, guidelines for contaminated land.

*Department of Earth Sciences. Program for air, water and landscape science.
Uppsala University, Villavägen 16, Se-752 36 UPPSALA*

Förord

Detta arbete är gjort som ett examensarbete inom civilingenjörsprogrammet i Miljö- och vattenteknik vid Uppsala universitet motsvarande 30 ECTS. Arbetet genomfördes våren 2013 i samarbete med företaget WSP Environmental och avdelningen Mark och Vatten vid Globenkontoret i Stockholm.

Handledare under arbetets gång har varit Hanna Zandin, hydrolog på WSP, Mark och Vatten avdelningen. Ämnesgranskare av arbetet har varit universitetslektor Fritjof Fagerlund på institutionen för geovetenskaper vid Uppsala universitet.

Jag skulle vilja börja med att tacka Hanna för all hjälp med arbetet och korrekturläsningen av rapporten. Vid mötgångar har du alltid varit lika positiv och entusiastisk, det är trots allt en stor skillnad mellan modulera och modellera! Jag vill även tacka Fritjof för den hjälpen jag fått både före och under arbetets gång, framför allt all administrativ hjälp som sträcker sig utanför ämnesgranskarens åtagande. Ett stort tack till Mark och Vatten-gruppen på WSP Environmental för den trevliga tiden hos er. Även om resan till Globen har varit lång varje dag har det alltid varit roligt och trevligt att komma dit. Vill även tacka Sven för möjligheten att göra detta examensarbete och möjligheten att få vara på WSP och lära känna alla. Vill skicka ett speciellt tack till Ashutosh som i tid och i otid har hjälpt mig med MODFLOW och arbetet samt alla inspirerande diskussioner och samtal, lycka till med svenskan.

Vill slutligen tacka Anna för ditt tålamod då jag konstant pratat grundvatten och för din hjälp med korrekturläsning.

- Handledare: *Hanna Zandin, WSP Environmental*
- Ämnesgranskare: *Fritjof Fagerlund, Institutionen för geovetenskaper, Uppsala*
- Examinator: *Allan Rodhe, Institutionen för geovetenskaper, Uppsala*

Stockholm, Juni 2013.

Emil Friberg

Populärvetenskaplig sammanfattning

Grundvattenmodellering av föroreningstransport

– Ett uppdragsanpassat beräkningsverktyg

Emil Friberg

Att hantera och sanera förorenade marker är ett återkommande problem i Sverige. Både då förståelsen över föroreningar och miljö har ökat men även då städer växer och gamla industrier flyttar och marken projekteras för bostäder och gamla föroreningar hittas. Vid arbete med förorenad mark kan modeller används för bättre förståelse och för val av sanering. Att skapa en full modell över ett område är både tidskrävande och svårt, alternativt kan en mycket enklare modell användas. Naturvårdsverket har byggt en enklare modell som riktlinjer för förorenade marker och den används som standard inom branschen.

Huvudsyftet för arbetet har varit att bygga en modell för föroreningsspridning i grundvatten. Målet med detta arbete var att bygga en standardiserad modell som är bättre än den modellen Naturvårdsverket har satt upp, men samtidigt inte lika komplicerad och tidskrävande som en fullskalig platsspecifik modell. Modellen ska snabbt och med enkla medel kunna förändras och förbättras för den specifika platsen som studeras.

Till hjälp har ett modellverktyg kallat MODFLOW används, som är ett verktyg för att modellera grundvatten och det finns även tillägg till programmet som kan användas för att simulera föroreningstransport. Utöver detta har tre tidigare genomförda uppdrag som handlat om förorenad mark använts. Dessa var en gammal bensinstation som läckt en stor mängd bensin, en gammal träimpregneringsanläggning som spridit ut impregneringskemikalier som bland annat innehöll arsenik och ett sista uppdraget som var en igenstängd kemtvätt som läckt ut kemikalier.

Den utvecklade modellen kom att döpas till ESM och benämns så för att särskilja denna till andra modeller vid diskussioner och samtal. Problemet analyserades noga genom studier av relevant och framstående litteratur, de tre utvalda uppdragen och modellens olika parametrar. Resultatet av modellanalysen blev att olika faktorer påverkar resultatet olika beroende på val av andra faktorer. Vissa faktorer är alltid viktiga medan andra är enbart viktiga i kombination av andra val.

ESM testkördes mot de tre utvalda uppdragen för att se hur väl modellen kan beskriva verkligheten och om den kan vara användbar. Modellen hade svårigheter att beskriva verkligheten fullt ut men visade goda resultat i ett större perspektiv. ESM gav en bra bild av föroreningssituationen och vilka faktorer som verkar vara viktiga i de specifika fallen, men kunde inte förutse de uppmätta halterna i grundvattnet i olika punkter.

Slutligen kunde det konstateras att ESM är användbar för en första och enklare bild över föroreningsspridningen och vilka faktorer som troligen kommer vara viktiga. Modellen kan förhoppningsvis effektivisera och spara tid vid arbete med förorenad mark vilket i ett stort perspektiv skulle vara ett steg i rätt riktning mot en giftfri miljö.

Ordlista

Advektion – Transport av lösta ämnen med grundvattnet (spridningsprocesser är ej med)

Akvifer – Öppen eller sluten geologisk formation som lagrar och transporterar grundvatten

Akvifug - Geologisk formation som inte släpper ifrån sig eller transporterar grundvatten

Akviklud – Geologisk formation som innehåller men inte transporterar grundvatten

Bensen - Aromatiskt kolväte, tillsats i bensin

Dispersion – Utspridning av ett ämne i ett medium, genom hastighetsvariationer

ESM – Namn på den utvecklade modellen i MODFLOW

Geometriskt medelvärde – Ger det typiska värdet av en talserie $\tilde{a} = \sqrt[n]{a_1 \cdot a_2 \cdot \dots \cdot a_n}$

GW eller **GV** – Grundvatten, ofta i samband med märkning av grundvattenrör

GWR eller **GVR** – Grundvattenrör

Hydraulisk gradient – Ges av lutningen på grundvattenytan i öppna akviferer

Hydraulisk konduktivitet – Markens förmåga att leda vatten

Kinematisk porositet – Andel hålrum av markens totala volym som deltar i strömningen

Koncentrationskontur – Gränsen för en viss koncentration i plymen

Konceptuell modell – Uttänkt struktur och lösning, en övergripande idé

MODFLOW – Numerisk modell för simulering av grundvattenströmning (en programkod)

NVV – Av författaren förkortning av Naturvårdsverkets riktvärdesmodell

MT3DMS – Transportmodul tillhörande MODFLOW för simulering av ämnestransport

Plym - En förorenings utbredning i rummet

Plymens utbredning – I detta arbete definierat som sträckan till en viss halt ansatt av NVV

PCE - Perklöretylen eller tetrakloreten, klorerat lösningsmedel

Sorption – Fastläggning av en förorening till mediet

TDI – Tolerabelt dagligt intag

Innehåll

| | | |
|-------|--|----|
| 1 | Inledning..... | 1 |
| 1.1 | Introduktion | 1 |
| 1.2 | Mål och syfte | 1 |
| 1.3 | Övergripande metod för genomförande | 1 |
| 1.4 | Frågeställningar | 1 |
| 2 | Metod | 2 |
| 2.1 | Litteraturstudie..... | 2 |
| 2.2 | Undersökning av lämpliga uppdrag..... | 2 |
| 2.2.1 | Tillgång till data | 2 |
| 2.2.2 | Landskapets förutsättningar | 2 |
| 2.2.3 | Återkommande problematik..... | 3 |
| 2.2.4 | Användbarhet av en spridningsmodell..... | 3 |
| 2.2.5 | Färdigställd modell..... | 3 |
| 2.2.6 | Varierande uppdrag | 3 |
| 2.3 | Utarbetning av en modell | 3 |
| 2.4 | Utvärdering – kalibrering och validering | 4 |
| 3 | Bakgrund till modeller | 5 |
| 3.1 | Analytisk lösning på ämnestransport..... | 6 |
| 3.2 | Naturvårdsverkets riktvärden | 7 |
| 3.2.1 | Generell modellbeskrivning | 7 |
| 3.2.2 | Fördjupning av vattendelen..... | 8 |
| 3.3 | MODFLOW..... | 11 |
| 3.3.1 | Bakgrund | 11 |
| 3.3.2 | Struktur..... | 11 |
| 3.3.3 | Huvuddel | 11 |
| 3.3.4 | Moduler | 13 |
| 3.4 | MT3DMS..... | 14 |
| 4 | Teori | 16 |
| 4.1 | Uppdrag | 16 |
| 4.1.1 | Boxholm - Gammal impregneringsanläggning | 18 |

| | | |
|-------|---|----|
| 4.1.2 | Estländaren - Bensinläckage från en gammal bensinmack | 20 |
| 4.1.3 | Holms – Spill och läckage från en kemptvätt | 22 |
| 4.2 | Viktiga fysikaliska parametrar för en grundvattenmodell | 23 |
| 4.2.1 | Hydraulisk konduktivitet | 24 |
| 4.2.2 | Porositet | 25 |
| 4.2.3 | Grundvattenbildning | 25 |
| 4.2.4 | Topografi | 27 |
| 4.2.5 | Jordlager | 27 |
| 4.2.6 | Randvillkor | 28 |
| 4.2.7 | Valda parametrar till konceptualisering av ESM | 29 |
| 4.3 | Aktuella föroreningar och kemiska parametrar | 29 |
| 4.3.1 | PCE | 29 |
| 4.3.2 | Bensen | 31 |
| 4.3.3 | Arsenik | 31 |
| 4.4 | Transport av föroreningar | 32 |
| 4.4.1 | Advektion | 32 |
| 4.4.2 | Dispersion | 32 |
| 4.4.3 | Sorption | 34 |
| 4.4.4 | Nedbrytning och förångning | 35 |
| 4.5 | Val av kemiska parametrar | 36 |
| 5 | Resultat | 36 |
| 5.1 | ESM | 36 |
| 5.1.1 | Konceptuell modell | 36 |
| 5.1.2 | Numerisk MODFLOW modell | 37 |
| 5.2 | Känslighetsanalys av parametrar | 39 |
| 5.2.1 | Randvillkor | 40 |
| 5.2.2 | Vattenbalans | 41 |
| 5.2.3 | Advektion | 41 |
| 5.2.4 | Dispersion | 42 |
| 5.2.5 | Sorption | 45 |
| 5.2.6 | Nedbrytning | 46 |
| 5.3 | Utbredningshastighet | 47 |
| 5.4 | Generell jämförelse | 49 |

| | | |
|-------|---|----|
| 5.5 | Jämförelse med utvalda uppdrag | 51 |
| 5.5.1 | Boxholm | 51 |
| 5.5.2 | Holms | 53 |
| 5.5.3 | Estländaren | 54 |
| 6 | Diskussion | 56 |
| 6.1 | Konceptualiseringen | 56 |
| 6.2 | Uppdragens inverkan | 59 |
| 6.3 | Val av parametervärden | 59 |
| 6.4 | Modellens känslighet för olika parametrar | 62 |
| 6.5 | Jämförelse med analytisk lösning | 63 |
| 6.6 | Naturvårdsverkets riktvärdesmodell | 64 |
| 6.7 | De tre utvalda uppdragen | 65 |
| 6.7.1 | Boxholm | 65 |
| 6.7.2 | Holms | 66 |
| 6.7.3 | Estländaren | 68 |
| 6.8 | Användbarhet | 69 |
| 7 | Slutsatser | 71 |
| 8 | Litteraturförteckning | 72 |
| | Appendix A | 74 |
| | A.1 Estländaren | 74 |
| | A.2 Beräkningar | 75 |
| | A.3 Tabeller | 75 |
| | A.4 Figurer | 76 |
| | A.5 ESM sammanfattning av parametrar | 78 |

1 Inledning

1.1 Introduktion

Sverige har nationella miljö kvalitetsmål för att ange riktning av miljöarbetet och bland dessa mål finns bland annat *Gifrfri miljö* och *Grundvatten av god kvalitet*. Målet är att långsiktigt skydda miljö, människan och naturresurser från negativ påverkan av förorenade områden samt minska mängderna och halterna av kemikalier i miljön. Vid utredningar av förorenad mark är det ofta viktigt att kunna bedöma föroreningens spridning och karaktär för att kunna vidta lämpliga åtgärder. För att kunna få en detaljerad bild över grundvattenströmningar och föroreningsspridning kan en tredimensionell grundvattenmodell skapas. Detta är tidskrävande och många kunder till konsulter är inte beredda att betala för detta. I dagsläget används Naturvårdsverkets riktvärdesmodell i sådana lägen inom branschen. Däremot kan det ibland vara önskvärt att få en större precision men ändå undvika att bygga upp en hel modell från grunden. Med denna bakgrund gjordes detta arbete i samarbete med WSP Environmental.

1.2 Mål och syfte

Målet med arbetet var att ta fram en grundvattenmodell i MODFLOW som med justeringar kan anpassas till förutsättningarna vid olika typer av uppdrag. Detta för att ge en relativt enkel men ändå tillförlitligare bedömning av föroreningsspridningen än den transportberäkning som görs med Naturvårdsverkets riktvärdesmodell.

1.3 Övergripande metod för genomförande

- Genomförande av en litteraturstudie med fokus på modellering av grundvatten, föroreningsspridning, MODFLOW, Naturvårdsverkets riktlinjer och modeller.
- Undersöka vilka typer av uppdrag där modellering av föroreningsspridning i grundvatten är passande att tillämpa och identifiera lämpliga kriterier för att välja ut tre fall att arbeta vidare med.
- Arbeta fram en modell i MODFLOW att använda som utgångspunkt vid uppdrag likande de utvalda uppdragen.
- Testa och utvärdera modellen mot de tre tidigare utvalda uppdragen.

1.4 Frågeställningar

- Vilka beräkningsverktyg och modeller används idag för att bedöma föroreningsspridning och hur noggrant blir resultatet i förhållande till insatsen?
- Hur ser uppdragen angående förorenad mark och grundvatten ut, finns det lämpliga scenarion där en grundvattenmodell kan vara användbar?
- Går det att skapa en modell för att beskriva hur dessa föroreningar beter sig i grundvatten?
- Hur väl beskriver detta beräkningsverktyg och modellen verkligheten?
- Går det att med rimlig tidsåtgång anpassa modellen till platsspecifika förhållanden?
- Går det att kalibrera och validera modellen?
- Är modellen användbar?

2 Metod

2.1 Litteraturstudie

Initialt var litteraturstudien mer generell inriktad för att få en uppfattning av problemets karaktär och vad som har gjorts. Naturvårdsverket spelar en central roll genom sin riktvärdesmodell och för att de har gjort ett antal sammanställande rapporter om informationsläget inom grundvattenmodellering och ämnestransport. Dessa beskriver verksamhetspraxis som finns i branschen och är en god sammanställning av läget idag. Naturvårdsverkets rapporter ansågs som en god och lämplig källa. Vidare gjordes en djupare studie i MODFLOW samt den transportmodul som användes, MT3DMS.

Resultatet av litteraturstudien presenteras under rubriken *Teori* och får ses som indirekta resultat och inte direkta resultat. Huvudsyftet är att ta fram en grundvattenmodell och indirekt att finna lämpliga parametrar och avgränsningar. Således krävs litteraturstudien för att kunna bygga en modell och resultatet från själva modellen får ses som huvudsyftet med arbetet.

2.2 Undersökning av lämpliga uppdrag

Att finna lämpliga uppdrag att testa och bygga modellen emot är viktigt för att på ett bra sätt kunna utvärdera modellen men även inrikta och avgränsa modellen. Då tillgången på olika uppdrag genom WSP's arkiv var mycket god sattes olika kriterier upp för att kunna välja ut tre lämpliga uppdrag. Lämpliga kriterier baserades på datakvalitet, terräng, problematik, användbarhet och tidigare modellering.

2.2.1 Tillgång till data

För att kunna bygga en bra modell som är användbar och möjlig att kalibrera och validera krävs god tillgång till data. Brist på data orsakar både osäkerheter och problem med kalibrering och validering. Därför får datatillgången anses som ett viktigt kriterium vid val av uppdrag. Följande data är av intresse:

- Jordlagerföljd och data från geologiska undersökningar
- Topografi och landskapets karaktär
- Grundvattenytans läge
- Typ av förorening och uppmätta halter i ett antal mätpunkter
- Utbredning av föroreningen i tid och rum

2.2.2 Landskapets förutsättningar

Ett område representeras av ett stort antal celler i tre dimensioner i MODFLOW (se avsnitt 3.3). På grund av de begränsningar som uppstår då ett område representeras av fyrkantiga block blir det svårt att simulera ett område med stora höjdskillnader och branta sluttningar. MODFLOW har svårt att hantera detta på ett bra sätt och resultaten kan bli mycket felaktiga, alternativt att det inte går alls.

2.2.3 Återkommande problematik

För att modellen ska vara användbar i praktiken räcker det inte bara med att den fungerar, det krävs även att den fungerar på vanlig och återkommande problematik. Modellen får inte bara fungera på ett enskilda fall. Lämpliga uppdrag är således sådana där problematiken är återkommande eller förväntas vara återkommande.

2.2.4 Användbarhet av en spridningsmodell

Även om en grundvatten- och spridningsmodell ökar förståelsen och är möjlig att bygga upp vid många olika uppdrag är det inte alltid praktiskt lämpligt då det inte efterfrågas.

Frågeställningen måste således vara sådan att en spridningsmodell av denna typ kan svara på den. Detta är i synnerhet lämpligt vid uppdrag där Naturvårdsverkets riktvärdesmodell har använts för att besvara frågor, men där det uttryckts att en bättre modell hade varit önskvärd.

2.2.5 Färdigställd modell

Uppdrag där någon typ av spridningsmodell eller grundvattenmodell redan är uppbyggd kan vara lämpliga att använda. Om uppdraget har använt en enklare modell, t.ex.

Naturvårdsverkets riktvärdesmodell, kan denna jämföras med den nya modellen för att visa förbättringar. Om istället en mer grundläggande modell har satts upp kan denna användas för att påvisa den nya modellens eventuella brister och fel.

2.2.6 Varierande uppdrag

För att få en användbar modell är det nödvändigt att den går att använda i flera olika fall, om än med vissa förändringar. Därför är ett kriterium att uppdragen skiljer sig åt, med avseende på områdets och föroreningens karaktär. Således kan samma typ av frågeställning förekomma om de skiljer sig åt för de andra kriterierna.

2.3 Utarbetning av en modell

Modellen ska vara så generell som möjligt utan att tappa för mycket trovärdighet eller bli för enkel för att uppnå målet. Samtidigt måste den snabbt kunna förändras och förbättras för en användare för ett specifikt fall och uppdrag. Framtagandet av denna balans blev en ”trial-and-error”-metod där kontinuerliga diskussioner fördes med handledare och kollegor.

Utgångspunkten var att finna de ”minsta gemensamma nämnarna” i de tre utvalda uppdragen och bygga upp modellen utifrån detta med följande arbetsgång:

- I. Undersöka uppdragen och titta på vilka data som finns, vilka problem som kan uppkomma och titta på vilka minsta gemensamma nämnare som finns.
- II. Kombinera den information som framkommit i uppdragen tillsammans med litteraturstudien för att konceptualisera och bygga en modell i MODFLOW.
- III. Undersöka att själva modellen gör som det är tänkt och ger rimliga resultat utefter de inparametrar som har använts.
- IV. Kalibrera och validera modellen mot de tre utvalda uppdragen.

Modellen döptes till ESM och för att urskilja den från andra diskuterade modeller kommer den uppbyggda modellen härmed kallas ESM i texten.

2.4 Utvärdering – kalibrering och validering

Utgångspunkten var att se rimligheten i resultaten och försöka förbättra utgångsmodellen. Ett kontinuerligt kalibreringsarbete skedde genom arbetet för att förbättra ESM-modellen tills ett godtagbart resultat gavs.

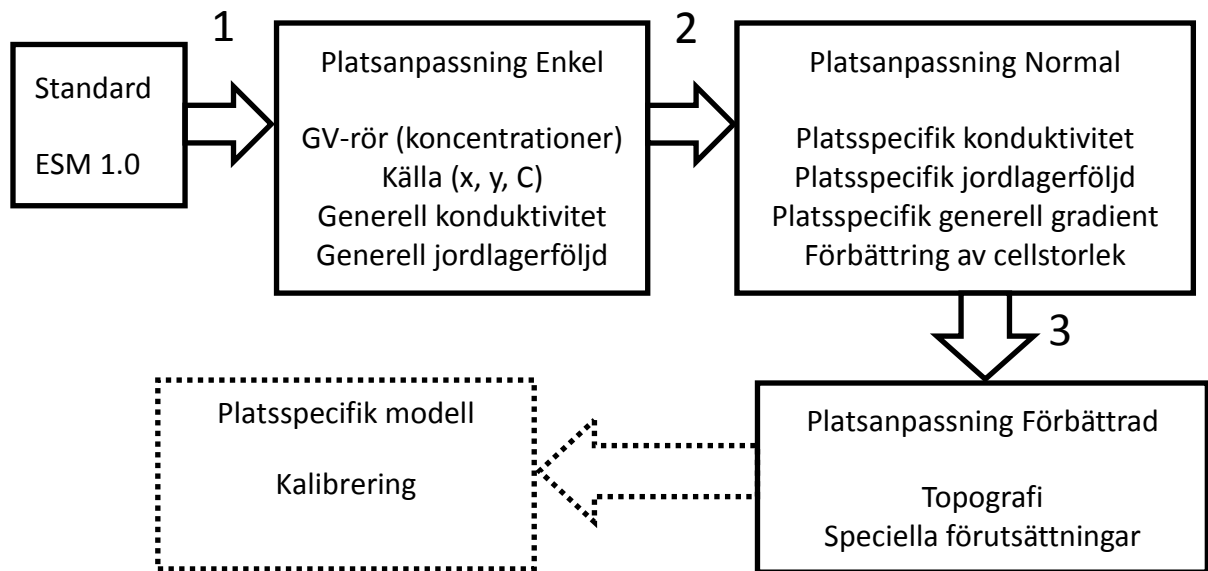
De valda parametrarna har känslighetsanalyserats för att få en uppfattning om vilka parametrarna som påverkar resultatet mer än andra och i vilken riktning. Detta sågs som en viktig del i kalibreringen för att finna realistiska värden på de parametrarna som var svårbestämda alternativt var tvungna att kalibreras in.

En känslighetsanalys ger svar på hur parametrarna påverkar resultatet. Genom att studera en parameter i taget och låta resten vara konstanta ses den studerade parameterns inverkan på resultatet. Genom att studera utparametrarnas förändring $\Delta f(x)$ mot en förändring i inparameter x fås känsligheten (se ekvation 1), vilket motsvarar den lokala lutningen av $f(x)$ med avseende på x .

$$\text{Känslighet} = \frac{\Delta f(x)}{\Delta x} \quad (1)$$

ESM-modellen jämfördes även med en analytisk metod samt Naturvårdsverkets riktvärdesmodell i ett generellt fall där ESM kördes under samma förutsättningar som den analytiska metoden och Naturvårdsverkets modell. En jämförelse under samma förutsättningar mellan ESM och en analytisk metod kan ge modellen och de valda parametrarna en hög trovärdighet.

När en välfungerande modell hade skapats användes de tre utvalda uppdragen för att validera modellen. Genom att göra ESM mer platsspecifik i steg undersöktes vilka parametrarna som gav störst påverkan på resultatet. Tre steg för en allt mer platsanpassad modell genomfördes (se figur 1). Steget till en platsspecifik modell, vilken behöver kalibreras, är omfattande och tidskrävande och att kunna undvika detta steg vore en stor fördel.



Figur 1. Förbättringssteg (1-3) för ESM mot de utvalda uppdragen, samt vad som skulle krävas för en platsspecifik modell.

Målet med att förbättra ESM i steg mot en allt mer platsspecifik modell är att finna vilka parametrar som påverkar resultatet mest och att finna om en viss nivå ger mycket större förbättring än en annan och således hur mycket modellen bör förbättras för att ge ett bra resultat.

3 Bakgrund till modeller

Det går att beskriva vattnets rörelse i ett poröst medium och ämnens transport i vatten med hjälp av differentialekvationer. Dessa ekvationer är ofta omöjliga att lösa analytiskt för ett verkligt fall utan att göra kraftiga förenklingar. Här kommer datormodeller in i bilden då dessa numeriskt kan lösa dessa ekvationer utan att behöva göra lika kraftiga förenklingar, om än många förenklingar. Men dessa ekvationer är grundläggande för alla typer modeller, oberoende av om det är en enkel modell eller en mer avancerad modell.

Då målet var att skapa en modell som ger bättre resultat än de metoder som används idag är det viktigt att känna till vad som används idag, vilket i Sverige ofta är Naturvårdsverkets riktvärdesmodell. Det är även viktigt att känna till hur MODFLOW fungerar, programmet som den nya modellen byggdes i, men också de analytiska lösningarna som finns. För modellering av förorenings spridning är de fysikaliska parametrarna som styr vattnets väg i landskapet viktiga. Dessa påverkar i sin tur ämnestransporten tillsammans med de kemiska parametrarna, som styr processer så som sorption och nedbrytning. Detta kan implementeras och tas hänsyn till på olika sätt, vilket beskrivs i detta kapitel. Mer detaljerad beskrivning av de fysikaliska och kemiska processerna görs i avsnittet 4.

3.1 Analytisk lösning på ämnestransport

Grunden för ämnestransport i grundvatten bygger på massans bevarande i tre dimensioner (Bedient, m.fl., 1999) (se ekvation 2).

$$\frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} = -n \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2)$$

Där

F är massflödet per areaenhet och tidsenhet [$\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$]

x, y, z är riktningar [m]

n är porositet [enhetslös]

C är koncentration [kg/m^3]

t är tid [s]

Den enklaste versionen är den där enbart advektion och dispersion tas med och i enbart en dimension (Bedient, m.fl., 1999) (se ekvation 3). Denna går att lösa med hjälp av Laplacetransformationen och med olika antaganden fås olika ekvationer.

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (3)$$

För en oändlig kolumn med ingen bakgrundshalt och konstant koncentration i en punkt fås en lösning av ekvation 3 (Bedient, m.fl., 1999) (se ekvation 4). Term nummer två går att ignorera i de flesta praktiska fallen då den är försumbart liten (Bedient, m.fl., 1999).

$$\frac{C(x, t)}{C_0} = 0,5 \left(\operatorname{erfc} \left[\frac{x - vt}{2\sqrt{Dt}} \right] \pm e^{(vx/D)} \cdot \operatorname{erfc} \left[\frac{x + vt}{2\sqrt{Dt}} \right] \right) \quad (4)$$

Där

erfc är den komplementära felfunktionen (se appendix)

C är koncentration [kg/m^3]

C_0 är initial koncentration [kg/m^3]

t är tid [s]

x är sträckan [m]

v är hastigheten [m/s]

D är dispersionskoefficienten [m^2/s]

Om linjär sorption tas med tillkommer en faktor R, som representerar retardationen, dvs. fördröjningen och en annan ekvation fås ur ekvation 3 (Bedient, m.fl., 1999) (se ekvation 5). För beräkning av faktorn R hänvisas läsaren till senare avsnitt 4.4.

$$\frac{C(x, t)}{C_0} = 0,5 \left(\operatorname{erfc} \left[\frac{Rx - vt}{2\sqrt{RDt}} \right] \pm e^{(vx/D)} \cdot \operatorname{erfc} \left[\frac{Rx + vt}{2\sqrt{RDt}} \right] \right) \quad (5)$$

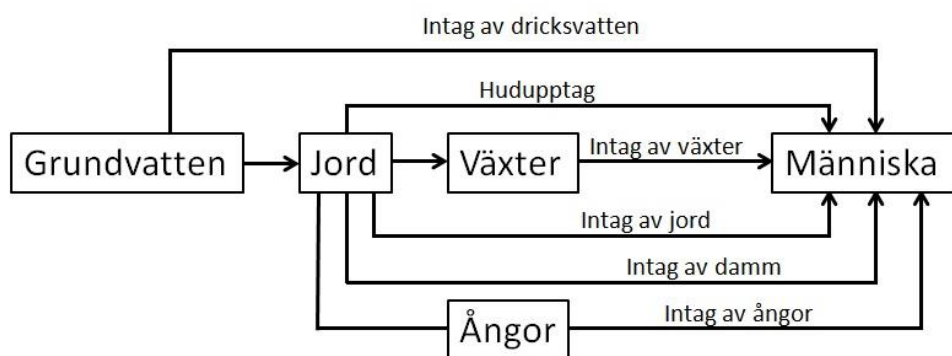
Det går alltså att analytiskt få fram olika ekvationer beroende på randvillkor och antaganden, men för mer avancerade situationer är detta inte längre praktiskt möjligt och numeriska metoder blir därför nödvändiga. Det kan dock vara bra att jämföra de numeriska lösningarna mot en analytisk lösning där den numeriska modellen körs under samma förutsättningar för att på så sätt validera den numeriska modellen.

3.2 Naturvårdsverkets riktvärden

Naturvårdsverket har satt upp riktlinjer för hantering av förorenade områden och efterbehandling utefter de nationella miljömålen. En riktvärdesmodell som har satts upp genom att väga in miljö, hälsorisker samt andra aspekter, beräknar ett riktvärde för en specifik förorening och område.

3.2.1 Generell modellbeskrivning

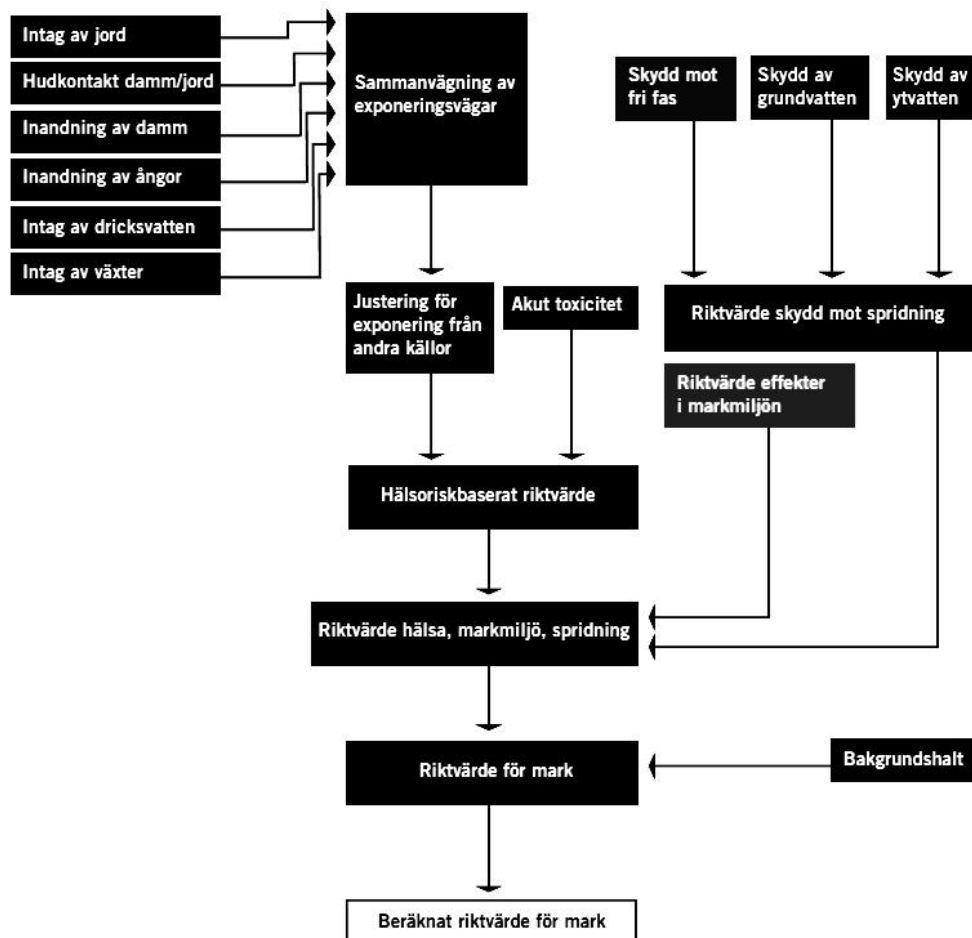
Riktvärdet som tas fram är ett gränsvärde som inte får överskridas i området. Om halterna är högre bör åtgärder vidtas. Markanvändningen delas in i två kategorier beroende på användningen, känslig och mindre känslig markanvändning, där olika krav ställs. Flertalet exponeringsvägar till människor betraktas och ett hälsoriskbaserat riktvärde tas fram (se figur 2). Ett ämne anses inte vara skadligt förrän ett visst tröskelvärde har passerats. Denna toleransnivå anges i tolerabelt dagligt intag (TDI) vilket alltså anges för en människa. Naturvårdsverket anser att den förorenade marken inte ska ta upp mer än 50 % av TDI, för vissa ämnen som har högre bakgrundshalter inte mer än 20 % av TDI samt för vissa långlivade föroreningar inte mer än 10 % (Naturvårdsverket, 2009). Där tröskelvärden inte finns anses risken att drabbas negativt vara proportionell mot dosen och acceptabla risknivåer har istället satts upp statistiskt.



Figur 2. Olika exponeringsvägar som betraktas. Figur efter Naturvårdsverket (2009).

Modellen tar i beaktande fördelning och transport av föroreningar, där olika ämnesspecifika konstanter används för beskrivning av fasfördelningar och spridning. Vidare tar den hänsyn till vilka halter ett ekosystem kan hantera i markmiljö, vilket däremot är svårt att anpassa platsspecifikt på ett bra sätt, då det utgår från generella ekotoxiska tester (Naturvårdsverket, 2009). Riktvärdena som använts i samband med grundvatten är satta för att människor ska kunna använda vattnet som dricksvatten utan hälsorisker medan halter i ytvatten är satta för

att undvika negativ påverkan på djur- och växtliv. Slutligen vägs alla dessa olika riktvärden in och vissa justeringar genomförs så att ett specifikt riktvärde för marken och en viss typ av förorening erhålls (se figur 3)



Figur 3. Sammanställning av de olika riktvärdena för beräkning av ett slutgiltigt riktvärde för marken. Figur efter Naturvårdsverket (2009).

Inom modellen finns det olika osäkerheter och de varierar mellan olika delar av modellen. Bland annat är exponering och spridning av förorening från vatten och växter till människor relativt säkra medan osäkerheten är större i bedömning av effekter, då referensvärdena som används är framtagna genom djurförsök och inte på människor.

3.2.2 Fördjupning av vattendelen

Naturvårdsverket definierar flertalet problem med att föroreningar sprids genom grund- och ytvatten; så som förstörda dricksvattentäkter nedströms, spridning till sjöar, vattendrag och våtmarker eller förstöra framtida grundvattenresurser. Ett riktvärde för halter i marken tas fram med hjälp av förenklade samband. Ett riktvärde för grundvatten beräknas genom att ansätta en maximal halt från litteraturen som inte får överskridas och sedan räkna bakvägen för att finna vilken halt detta motsvarar i det aktuella området (Naturvårdsverket, 2009) (se ekvation 6).

$$C_{GroundWater} = \frac{C_{critical-gw}}{DF_{gw} \cdot CF_{water-mob}} \quad (6)$$

Där:

$C_{GroundWater}$ är det platsspecifika beräknade värdet som inte får överskridas

$C_{critical-gw}$ är riktvärdet för skydd av grundvatten från litteraturen

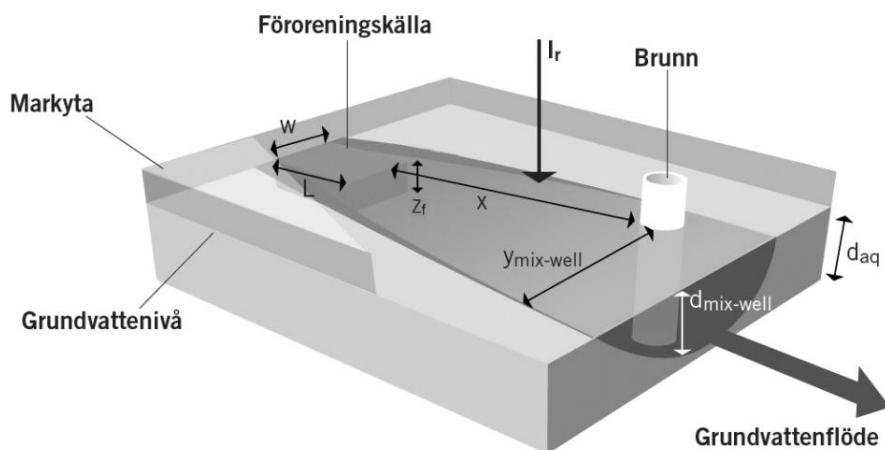
DF_{gw} är en utspädningsfaktor

$CF_{water-mob}$ är en faktor för fördelning av föroreningen mellan vatten och jord

På samma sätt beräknas ett värde för ytvatten. De ämnesspecifika värden som används för detta baseras på normer från Livsmedelsverket eller WHO. Även i detta fall anser Naturvårdsverket att det dagliga intaget av föroreningar genom dricksvatten inte bör överskrida 50 % av TDI (Naturvårdsverket, 2009). För ytvattnet sätts riktvärden med avseende på miljöeffekter. Dessa riktvärden är därför ofta lägre än för grundvattnet vilket leder till att skydd för människor redan täckts in. Vissa justeringar genomförs beroende på sammanhanget, t.ex. om en stor vattentäckt ligger nedströms eller om området redan har höga bakgrundsvärden av den aktuella föroreningen.

Modellen bygger på att urlakningen av det förorenande ämnet är proportionell mot halten, vilket inte alltid är sant, då urlakning beror på flertalet variabler. Vidare hanterar inte modellen fördröjande processer, så som sorption, eller spridning genom dispersion vilket gör att den kan överdriva halten på långa avstånd från föroreningskällan. Då ingen tidsaspekt tas med går det inte att förutse tidpunkt för maximal föroreningshalt och risken för att överdriva maximala koncentrationen är överhängande (Naturvårdsverket, 2009).

Utspädningen beräknas utifrån ett förenklat scenario där en förorening finns i grundvattnet och sprids till en närbelägen brunn i flödesriktningen (se figur 4). Sedan beräknas utspädningen av den initiala koncentrationen i denna brun med hjälp av en utspädningsfaktor och koncentrationen i föroreningspunkten. Denna halt kan sedan användas för att beräkna halter vid ett visst avstånd från källan och för att ta fram ett riktvärde för området.



Figur 4. Schematisk bild över utspädning i riktvärdesmodellen. Bild efter Naturvårdsverket (2009).

Utspänningsfaktorn för en föroreningskälla till en brunn DF_{gw} [dimensionslös] beräknas med hjälp av bredden W [m] och djupet Z_f [m] av föroreningskällan kombinerat med tjockleken på spridningszonen (se ekvation 7). Spridningszonens tjocklek $d_{mix-well}$ [m] beräknas med hjälp av och bredden av spridningszonen $y_{mix-well}$ [m] (se ekvation 8) som i sin tur beräknas separat (se ekvation 9) (Naturvårdsverket, 2009).

$$DF_{gw} = \frac{W \cdot Z_f}{(2y_{mix-well} + W) \cdot d_{mix-well}} \quad (7)$$

$$d_{mix-well} = y_{mix-well} + d_{aq} \left[1 - \exp\left(-\frac{(L+X)I_r}{K \cdot i \cdot d_{aq}}\right) \right] \quad (8)$$

$$y_{mix-well} = \sqrt{0.0112(L+X)^2} \quad (9)$$

Där

d_{aq} är akviferens mäktighet [m]

X är avståndet mellan källan och brunnen [m]

L är längden på föroreningskällan [m]

W är bredden på föroreningskällan [m]

Z_f är djupet av föroreningskällan [m]

K är konduktiviteten [m/s]

i är hydrauliska gradienten [m/m]

I_r är grundvattenbildningen [m/år]

För grundligare beskrivning och djupare förståelse av modellen föreslås Naturvårdsverkets rapport 5976, *Riktvärden för förorenad mark – Modellbeskrivning och vägledning*, (Naturvårdsverket, 2009), vilken finns att tillgå gratis.

3.3 MODFLOW

3.3.1 Bakgrund

MODFLOW är en grundvattenströmningsmodell som utvecklades i början av 80-talet av U.S. Geological Survey. Modellen började som ett samlingsprojekt för att sammanställa flertalet mindre koder till en enklare och mer lättförståelig kod och namngavs ”USGS Modular Three-Dimensional Finite-Difference Ground-water flow Model”. Namnet beskriver modellen ganska väl men den blev senare känd under namnet MODFLOW (Harbaugh, 2005). Från början var modellens användningsområde ganska begränsat men med tiden har fler och fler moduler adderats vilket gör att MODFLOW har fått allt fler tillämpningsområden.

I detta projekt har programvaran Visual MODFLOW använts. Det är ett grafiskt gränssnitt (bland flera), som används för att underlätta användandet av MODFLOW. MODFLOW är alltså koden och ekvationerna som används och Visual MODFLOW är ett av flera användargränssnitt som finns att tillgå på marknaden.

3.3.2 Struktur

MODFLOW bygger på olika moduler som huvudprogrammet anropar i turordning för simuleringen. Då dessa moduler är fristående kan de användas valfritt beroende på vad som simuleras och stor frihet ges på detta sätt att lägga till och utveckla nya moduler, utan att behöva ändra i andra delar (Harbaugh, 2005). Den grundläggande koden till MODFLOW är även skriven på ett sådant sätt att den kan köras på de flesta datorer och kan hantera i stort sett de flesta filformaten för indata. Detta tillsammans med enkelheten i koden och begränsade minnes och de prestandakrav bidrog troligen till den stora spridningen av MODFLOW, framför aningen mer avancerade, men mer krävande, konkurrenter som från början inte kunde köras på en persondator (Gustafsson & Refsgaard, 2007).

3.3.3 Huvuddel

MODFLOW beräknar grundvattenflöden med hjälp av Darcys lag (Domenico & Schwartz, 1990) (se ekvation 10).

$$q = -K \frac{\partial h}{\partial l} \quad (10)$$

Där

q är flöde per area [m/s]

K är konduktiviteten [m/s]

h är total potential (\sum tryck- + lägespotential) [m]

l är sträckan mellan två punkter [m]

Darcys lag kombinerat med en tredimensionell differentialekvation som härleds ur principen om massans bevarande ger en beskrivning av flöde i tre dimensioner (Harbaugh, 2005) (se ekvation 11).

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) + W = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (11)$$

Där

K är konduktiviteten i x-, y- och z-led [m/s]

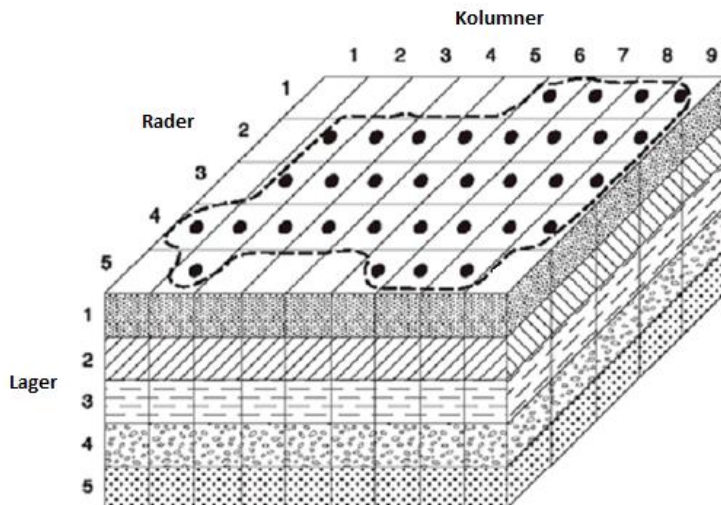
h är totalpotential [m]

W är en källterm uttryckt som volymflöde per enhetsvolym [s^{-1}]

S_s är specifik magasinskoefficient [m^{-1}]

t är tid [s]

Genom att kombinera detta med en diskretisering av akviferen till beräkningsceller (se figur 5), där varje cell får ett nummer i,j,k utefter placering i x-, y-, och z-led (Harbaugh, 2005), kan MODFLOW simulera grundvattenflöde. Varje cell, förutom kantcellerna, har således kontakt med upp till sex andra celler, där ett flöde kan uppstå och beräknas. Detta ger upp till sex olika ekvationer för varje cell som behöver lösas.



Figur 5. En schematisk akvifer med aktiva celler som MODFLOW använder sig av. Figur efter Harbaugh (2005).

Kantcellerna som bildar randvillkoren kan beskrivas på tre olika sätt beroende på vilken typ av hydraulisk gräns som simuleras, t.ex. ett vattendrag eller en grundvattendelare. Cellerna som bildar randvillkoren kan antingen ha ett konstant tryck, konstant tryck inom varje tidssteg eller ett specificerat in- eller utflöde, t.ex. flödet noll, vilket betyder att inget flöde sker över randen. För övriga celler beräknas den hydrauliska potentialen i varje tidssteg. Typiskt används två grupper av modellgränser, impermeabel rand ("no-flow") eller rand med konstant potential (Harbaugh, 2005).

Varje enskild ekvation för varje cell kan inte lösas separat men genom att kombinera alla olika ekvationer vid varje tidssteg går det att lösa ekvationerna simultant med hjälp av

iteration. Detta är nödvändigt då det fortfarande finns en okänd variabel, total hydraulisk potential (Harbaugh, 2005). Tidsderivatorna som kommer ur differentialekvationen approximeras med hjälp av baklängesapproximation. Resultatet från approximationen avviker från det sanna värdet, men det är en numeriskt stabil metod vilket gör att modellen undviker att förstora och sprida fel. Genom att använda denna metod blir felen i varje tidssteg större men det totala felet förminskas med tiden (Harbaugh, 2005).

En vattenbalans beräknas sedan separat vilket gör att den kan användas för att kontrollera modellen. Vattenbalansen görs på in- och utgående vatten, inte på enskilda vattenflöden mellan celler i själva modellen. Storleken på felet (D) beräknas som en procentsats (se ekvation 12) och bör vid en bra simulering vara litet (Harbaugh, 2005).

$$D = \frac{100 (in - ut)}{(in + ut)/2} [\%] \quad (12)$$

3.3.4 Moduler

I MODFLOW finns ett stort antal olika moduler att använda beroende på vad som ska modelleras, t.ex. sjöar, vattendrag eller dränering. För en utförlig förklaring av varje modul hänvisas läsaren till Harbaugh (2005), då detta är för omfattande för denna rapport. Nedan beskrivs ett par moduler som var viktiga i detta arbete.

3.3.4.1 Dräneringsmodulen - DRN

Dräneringsmodulen (Drain) simulerar dränering, t.ex. i diken och täckdikning, men den kan även användas för att modelltekniskt fixera grundvattenytan vid en viss nivå och i det fallet leda bort överflödigt vatten ur modellen, vilket beskrivs noggrannare i avsnitt 5.1. Modulen bygger på att dränering sker till en viss nivå. Nedanför den specificerade nivån (HD), vilket kan ses som botten på ett dike eller ett dräneringsrör (se figur 6) är dräneringen inaktiv (Harbaugh, 2005) (se ekvation 13). Konduktans (CD) är en matematisk beskrivning på hur fort och långt bort dräneringens avsänkning sker. Oftast finns inte tillräckligt med information för att beräkna konduktansen (Schlumberger Water Services, 2011) och den får därför kalibreras fram för att finna ett bra värde.

$$\begin{aligned} Q_{ut} &= CD(h - HD) \quad \text{för } h > HD \\ Q_{ut} &= 0 \quad \text{för } h < HD \end{aligned} \quad (14)$$

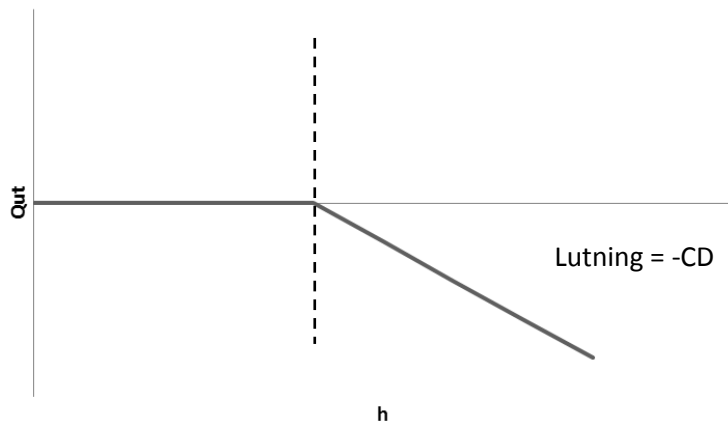
Där

Q_{ut} är utflödet av vatten [m^3/s]

CD är konduktans [m^2/s]

h är totalpotential i cellen [m]

HD är tröskelvärde för dräneringen [m]



Figur 6. Konceptuell skiss på hur dräneringsmodulen fungerar, innan h har passerat tröskelvärdet HD är $Q_{ut} = 0$. Figur efter Harbaugh (2005).

3.3.4.2 Recharge - RCH

Recharge är en modul som hanterar grundvattenbildningen (se avsnitt 4.2.3). Modulen kan även användas till att simulera annan typ av grundvattenbildning t.ex. konstgjord infiltration och bevattning (Schlumberger Water Services, 2011). Det går även att använda Recharge för enbart nederbörd och simulera avdunstning i en separat modul. Modulen adderar vatten till modellen i varje tidssteg beroende på längden av tidssteget, arean på cellen och infiltrationsmängd (Harbaugh, 2005) (se ekvation 14).

$$Q_R = IA \quad (14)$$

Där

Q_R är sammanlagd grundvattenbildning till en cell [$m^3/\text{år}$]

I är grundvattenbildningen per ytenhet [$m/\text{år}$]

A är arean av en cell [m^2]

3.4 MT3DMS

MT3DMS är modul till MODFLOW som hanterar ämnestransport. Modellen är inte utvecklad av USGS som utvecklade MODFLOW utan är byggd separat (Zheng, 1990). Tidigare hette modulen MT3D men vid en större uppdatering döptes den om till MT3DMS, vilket representerar andra generationen. Även om MT3DMS är en modul är den dock klart mer omfattande än många av de andra modulerna och en djupare förståelse kan vara nödvändig för användandet av den.

MT3DMS är byggd för att köras med MODFLOW men den kan även användas med andra grundvattenflödesmodeller. MT3DMS hanterar dispersion, advektion, in- och utflöden och reaktion av ämnen (Zheng, 1990) (se ekvation 15). Den kan även hantera flera ämnen på en gång. Modellen körs efter att grundvattenmodellen har körts. Ett antagande är därför att ämnestransporten inte påverkar grundvattenströmningen. För djupare beskrivning av de olika transportprocesserna hänvisas läsaren till avsnitt 4.4, i detta avsnitt hanteras enbart hur processerna har implementerats i MT3DMS.

$$\frac{\partial(\theta C^k)}{\partial t} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\theta D_{ij} \frac{\partial C^k}{\partial x_j} \right]}_{\text{Dispersion}} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i C^k)}_{\text{Advektion}} + \underbrace{q_s C_s^k}_{\text{In- och utflöde}} + \underbrace{\sum R_n}_{\text{Reaktion}} \quad (15)$$

Där

C^k är koncentrationen av ämne k [kg/m^3]

Θ är porositeten [dimensionslös]

t är tiden [s]

x_j är sträckan mellan två punkter [m]

D_{ij} är den hydrodynamiska dispersionskoefficienten [m^2/s]

v_j är grundvattenströmningens partikelhastighet i riktningen j [m/s]

q_s är flödesvolym per volym [s^{-1}]

C_s^k är koncentrationen för källan/sänkan för ämne k [kg/m^3]

$\sum R_n$ är de kemiska reaktionerna [$\text{kg}/(\text{m}^3\text{s})$]

Termen in- och utflöde hanterar om ett ämne tillförs eller tas bort ifrån modellen, detta skulle motsvara själva läckaget av en förorening, alternativt en pumpning eller på andra sätt avlägsnande av en förorening.

Inflödet kan implementeras på olika sätt beroende på typ och karaktär av föroreningskälla:

- Föroreningen kan placeras som en konstant koncentration i grundvattnet för att efterlikna en förorening som konstant släpps ut med en viss mängd.
- Föroreningen kan implementeras som en viss halt i grundvattenbildningen, kan ses som utlakning.
- Föroreningen kan placeras som en punktkälla.

I reaktionstermen hanteras både nedbrytning och sorption. MT3DMS kan hantera både linjär och icke linjär sorption samt Freundlich och Langmuir sorption. Den kan även hantera jämvikts- och ickejämviktssorption (Zheng, 1990). Nedbrytningen sker genom samma metod som radioaktivt sönderfall. En halveringstid beskriver nedbrytningshastigheten och processen är irreversibel (ej omvändbar) (se ekvation 16). Processen delas upp i två termer, en för den lösta fasen och en för den fastlagda fasen (Zheng, 1990). Nedbrytningshastigheten beräknas utefter halveringstiden (Zheng, 1990) (se ekvation 17).

$$-(\lambda_1 \theta C + \lambda_2 \rho_b \hat{C}) \quad (16)$$

$$\lambda = \frac{\ln(2)}{t_{1/2}} \quad (17)$$

Där

λ är nedbrytningshastighet [s^{-1}]

θ är porositet [enhetslös]

ρ_b är densiteten av jorden [kg/m^3]

C är koncentrationen i lös fas [kg/m^3]

\hat{C} är koncentrationen i fastlagd fas [kg/kg]

$t_{1/2}$ är halveringstiden [s]

Dispersionsdelen hanterar både molekylär och mekanisk dispersion (Schlumberger Water Services, 2011) (se ekvation 18) och läsaren hänvisas till Zheng, 1990, för en djupare förståelse för hur detta är implementerat i modellen. Det bör poängteras att det matematiskt inte går att urskilja molekylär och mekanisk dispersion i modellen (Jonasson, m.fl., 2007).

$$D = \alpha_l \frac{V_l^2}{|v|} + \alpha_h \frac{V_h^2}{|v|} + \alpha_v \frac{V_v^2}{|v|} + D^* \quad (18)$$

Där

D är den hydrodynamiska dispersionskoefficienten [m^2/s]

α är dispersivitet [m]

$V_{l,h,v}$ är grundvattnets partikelhastighet i longitudinell-, transversell respektive vertikal riktning [m/s]

v är transporthastigheten på föroreningen [m/s]

D^* är effektiv molekylär dispersion [m^2/s]

4 Teori

4.1 Uppdrag

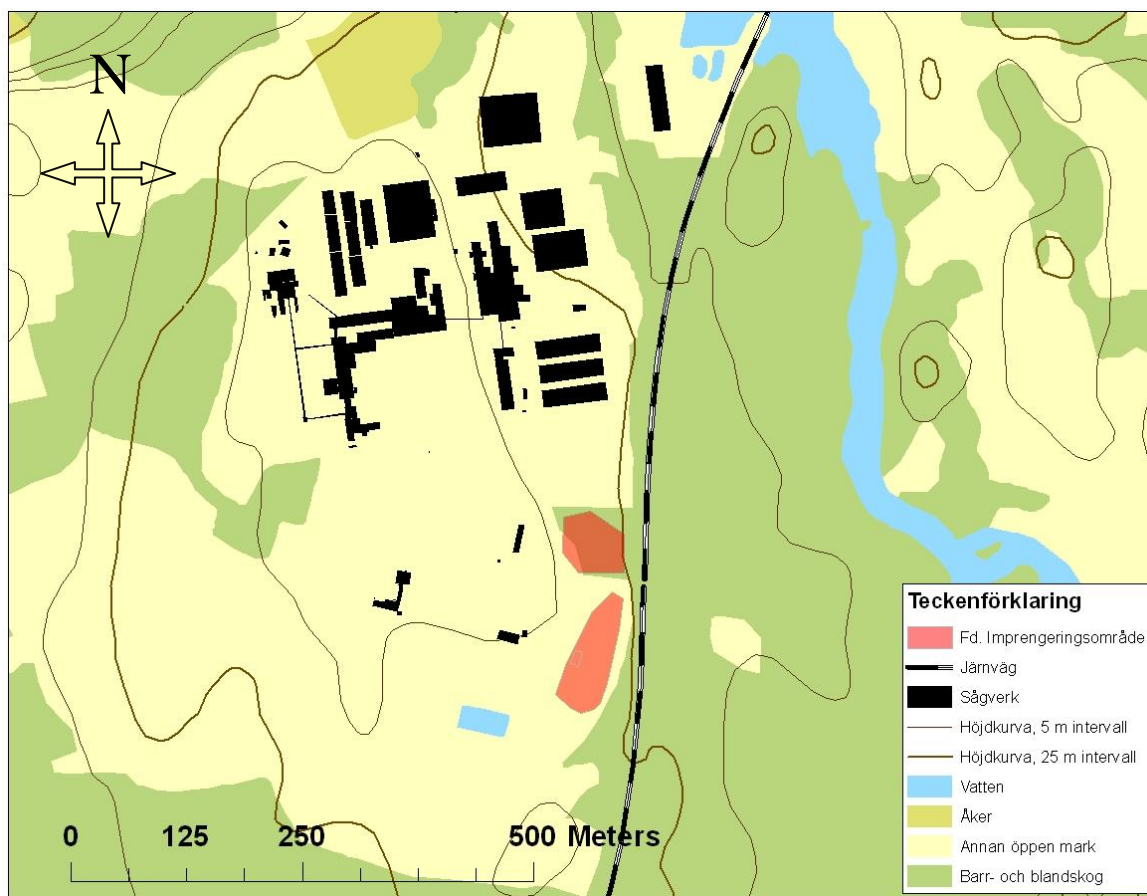
Utefter de framtagna kriterierna (se avsnitt 2.2) utvärderades totalt sju olika uppdrag från WSP och utvärderingen kombinerades med en diskussion med insatta personer på WSP för att välja ut de tre uppdragen (se tabell 1). Valet föll på Estländaren, Holms och Boxholm.

Tabell 1. Utvärdering av uppdrag utefter kriterierna, värde mellan 1-5 där 1 är mycket dåligt och 5 mycket bra för examensarbetets syfte.

| | I | II | Estländaren | IV | Boxholm | VI | Holms |
|---------------------------|-------------------------|------------------------|---------------|--------------|-------------------------|------------|------------|
| Typ | Impregneringsanläggning | Destruktionsanläggning | Bensinstation | Industri | Impregneringsanläggning | Industri | Kemtvätt |
| Område | Småland | Stockholm | Stockholm | Östergötland | Östergötland | Uppland | Skåne |
| Förorening | Metall | Olja + Klorerat | Bensin | Metall | Metall | Klorerat | Klorerat |
| God data | | | | | | | |
| ○ Förorening | 5 | 4 | 5 | 4 | 5 | 4 | 5 |
| ○ Grundvatten | 2 | 4 | 5 | 4 | 4 | 4 | 5 |
| ○ Topografi och jordarter | 4 | 2 | 4 | 5 | 5 | 5 | 4 |
| Kupering | 4 | 4 | 4 | 4 | 3 | 4 | 4 |
| Återkommande | - | 4 | 5 | 3 | 4 | 4 | 5 |
| Användbarhet | 1 | 4 | 5 | 2 | 5 | 2 | 4 |
| Tidigare modeller | - | 2 | 3 | 3 | 3 | 2 | 4 |
| Summa | 16 | 24 | 31 | 25 | 29 | 25 | 31 |
| Medelvärde | 3,2 | 3,4 | 4,4 | 3,6 | 4,1 | 3,6 | 4,4 |

4.1.1 Boxholm - Gammal impregneringsanläggning

Vid Boxholms sågverk har impregnering skett mellan åren 1946 och 1987. Fram till 1973 är det okänt vilket impregneringsmedel som har används men efter det året har CCA används (Österås, m.fl., 2013), vilket består av koppar, krom och arsenik, därav namnet. Området runt impregneringsplatsen (se figur 7) är kraftigt förorenat av metaller men uppdraget kom att fokusera på arsenik. Det förorenade området uppskattas till ca 1 ha och innehåller uppskattningsvis ca 18 ton arsenik. Idag bedrivs ingen verksamhet på impregneringsplatsen och området är dränerat i öst och väst av ett dike respektive en dräneringsledning. Detta gjordes 1991 för att minska urlakningen vid högt grundvattenstånd. Marken runt impregneringsområdet har historiskt sett varit mer eller mindre vattenmättad ända upp till markytan.



Figur 7. Boxholms sågverk med utmarkerat impregneringsområde och markanvändningen i området som speglar vart fyllnadsmassor återfinns. Skapad efter data från Österås, m.fl. (2013).

I närheten av sågverket, österut, ligger en fastighet med tre dricksvattenbrunnar, 3, 9 och 100 meter djupa. I brunnen som är 9 meter djup har förhöjda halter av arsenik, krom och koppar uppmätts. Initialt misstänktes detta komma från impregneringsanläggningen men bedömningar som har gjorts tyder på att det inte är troligt.

Längs med sågverket och det gamla impregneringsområdet går en stambana samt ett äldre industrispår med diken på vardera sida.

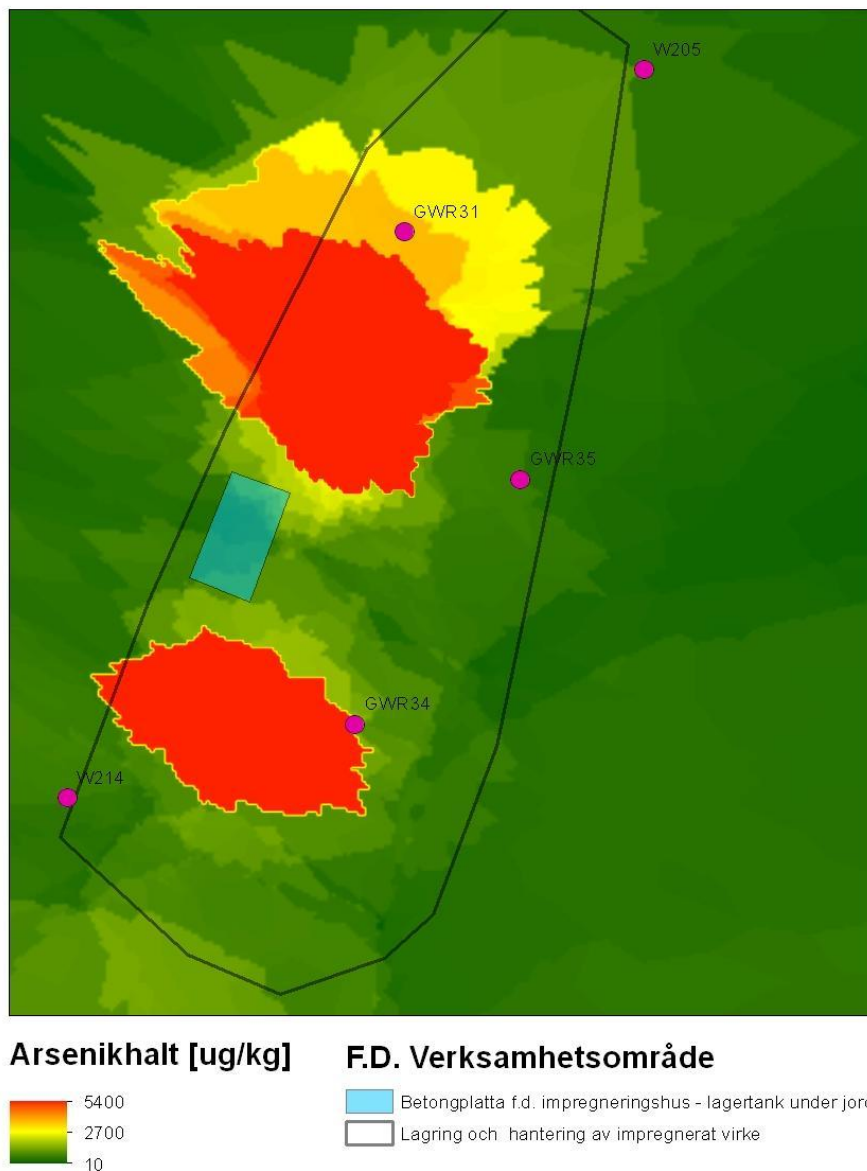
Marken i området består främst av sandig och siltig morän. Marken är även mycket blockig, stenar på över 5 m³ har påträffas både under och ovan markytan. Ovanpå moränen förekommer områden bestående av fyllnadsmassor med en varierad mäktighet på 0,5-2 meter och moränen underlagras av berg. Vid kraftiga regn eller snösmältning kan grundvattnet ligga i markytan, men oftast ligger den ca 0,5-2,5 meter under markytan (Österås, m.fl., 2013). Generellt går grundvattenströmningen mot öster där Svartån avgränsar 300 meter bort. Gradienten uppskattas till ~2,2–2,4 % baserat på uppmätta grundvattennivåer i observationsrör. Den största mängden vatten som infiltrerar på impregneringsområdet dräneras direkt ner i diket på östra sidan medan en viss mängd infiltrerar längre ner till moränen och kan transporteras under diket och vidare mot Svartån. Det dränerade vattnet hamnar senare i två sedimentationsdammar belägna 600 m norr om området.

Föroreningen av CCA är idag spridd över hela det f.d. impregneringsområdet, med varierande halter. Generellt är halterna i marken höga framför och bakom själva impregneringsplatsen (se figur 8), men hela området är förorenat. Halter på över 5000 mg arsenik per kg torr jord förekommer och halter på 470 µg/L i grundvattnet har uppmätts (se tabell 2). Även aningen förhöjda halter har återfunnits i dräneringsvattnet från området och förhöjda halter i sedimenten i dräneringsdiket samt sedimentationsdammarna, däremot har ingen påverkar på Svartån observerats. Det är stor skillnad på arsenikhalterna i vattenproverna om proven filtreras först eller inte.

Tabell 2. Arsenikförekomster i grundvatten vid Boxholms sågverk år 2005.

| Brunn ID | Halt Arsenik [µg/L] |
|--------------------------|----------------------------|
| W202 (ej med på figur 8) | 7 |
| W205 | 4 |
| W214 | 0 |
| GWR 31 | 56 |
| GWR 34 | 210 |
| GWR 35 | 470 |

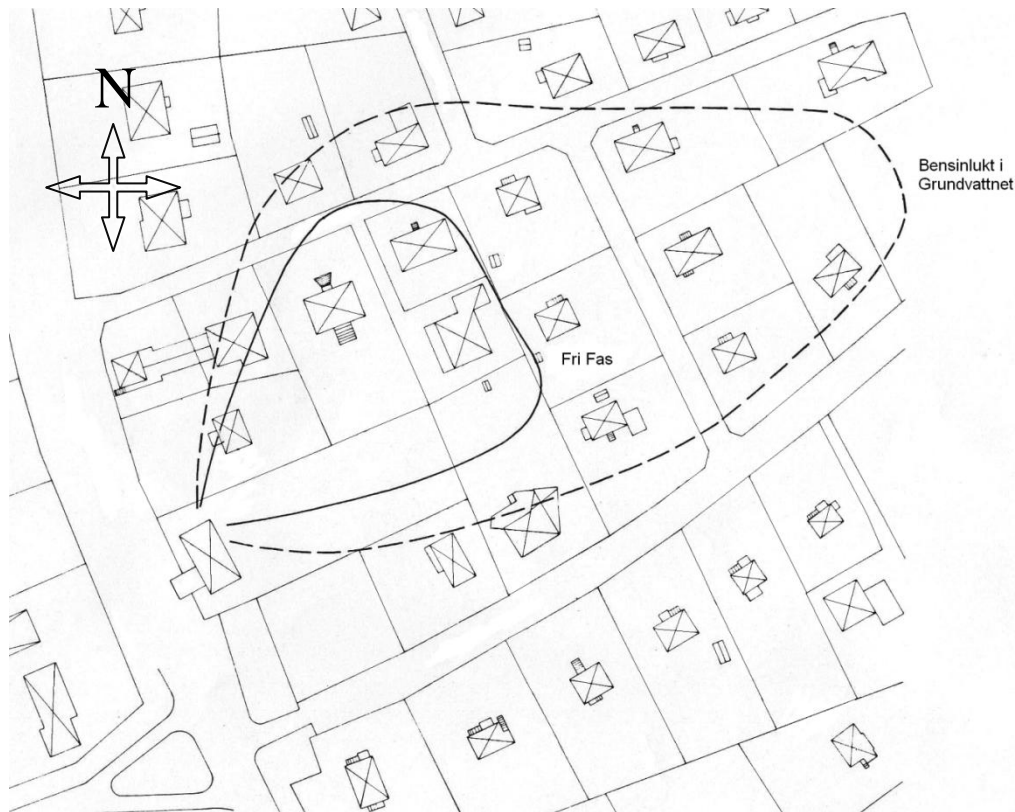
Frågeställningen ur vattensynpunkt har varit om det är möjligt för arseniken att sprida sig till nämnda dricksvattenbrunnar och ner till Svartån samt om arseniken lakas ur det förorenade området i någon större grad.



Figur 8. Interpolerad arsenikhalt i marken utifrån 165 mätpunkter vid Boxholms sågverk, med markerade grundvattenrör.

4.1.2 Estländaren - Bensinläckage från en gammal bensinmack

I Sollentuna, norra delen av Stockholm, låg tidigare en bensinstation som under 60-talet läckte en stor mängd bensin ur en av tankarna. Uppskattningar har gjorts på att det rör sig om 150 m^3 , vilket skulle motsvara ca 50 liter per dygn (Berglund, m.fl., 2003). En stor mängd fri fas låg ovanpå grundvattenytan medan en del löstes upp i grundvattnet och spreds vidare (se figur 9). Under 70-talet sanerades området och uppskattningsvis avlägsnades 80 m^3 bensin genom pumpning samt schaktning och problemet ”glömdes”. 1999 återupptäcktes föroreningen i samband med borrhning för bergvärme. Området saneringspumpades igen och i dagsläget anses den fria fasen bensin vara avlägsnad.



Figur 9. Uppskattad spridning av fri fas (heldragen linje, ca 150 m) och gräns för bensinlukt i grundvattnet (streckad linje, ca 400 m) från 1972 (Berglund, m.fl., 2003), okänd skala.

Området begränsas i väster av en topografisk grundvattendelare och i öster av en rullstensås. Flödena är generellt från väst till öst, samt nordlig riktning i åsen. Var grundvattenflödet når åsen är osäkert men grundvattnet som passerar det förorenade området flödar troligen till åsen. 1200 meter nordöst om föroreningen ligger en reservvattentäkt med beräknad kapacitet på 140 L/s (Berglund, m.fl., 2003).

Det aktuella området är väl undersökt båda med hänsyn till parametrar som jordlager, konduktivitet och topografi och vad gäller bensenhalter i grundvattnet och grundvattnets strömning och nivåer. Generellt består jordlagerföljden i marken av fyllning, lera, sand och morän. Grundvattennivåer finns för 15 olika rör med ett medeldjup på 4 m under markytan från 5 olika tillfällen över en 7 månaders period. Den hydrauliska gradienten uppskattas till 1-2 % östlig riktning (se appendix). I elva punkter har den hydrauliska konduktiviteten uppmätts och spannet ligger på $0,82 - 35 \cdot 10^{-6}$ m/s, mestadels har mätningarna skett i sandlagren.

I nästan samtliga grundvattenrör påträffades olika bensinkomponenter och halter av bensen upp till 12 mg/L. Gränsvärdet är endast 0,5 µg/L enligt dricksvärdesnormen (Naturvårdsverket, 2009). De högst uppmätta halterna motsvarar 24 000 gånger högre halter än vad som är acceptabelt. Det ansågs även finnas en klar risk att bensen skulle spridas till åsen och reservvattentäkten.

Statens geotekniska institut (SGI) har använt området som studieobjekt för naturlig nedbrytning av bensen och självrening av föroreningen. SGI har gjort modellering av området, där en longitudinell dispersivitet på 6,9 - 11,8 m och en transversell på 0,3 - 1,7 m, samt en

hydraulisk gradient på 1,8 % användes. Dessa värden på parametrarna gav användbara resultat och utifrån det ansågs att möjligheten till nedbrytning av bensen var goda (Nordbäck & Tiberg, 2004).

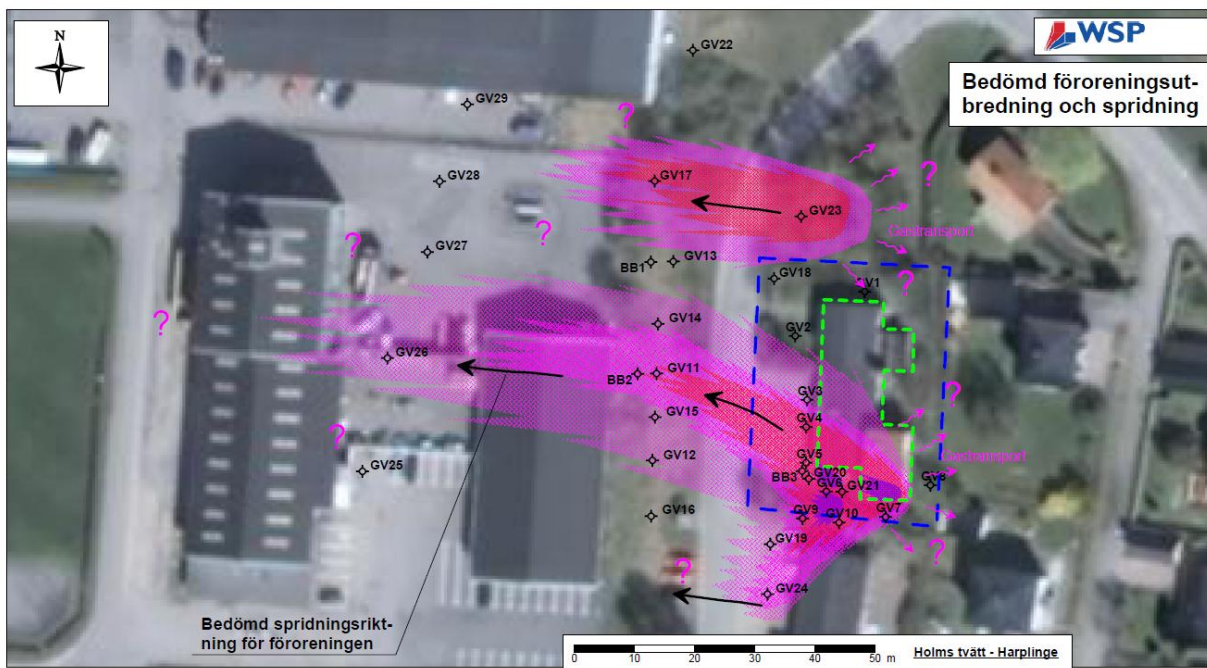
Den stora frågan från ett grundvattenperspektiv har varit hur långt föroreningen faktiskt kan spridas och om det är fara för åsen, vattentäkten och lokala brunnar.

4.1.3 Holms - Spill och läckage från en kemtvätt

I Halmstads kommun låg mellan åren 1979 och 2009 en kemtvätt, Holms tvätt. Tvätten har troligen läckt avsevärd mängd perkloretylen (PCE) men även andra typer av kemikalier som användes i processerna. Detta har troligen skett genom spill och läckande ledningar men även genom dumpning av tvättrester. Arbetet kom att fokusera på PCE och dess nedbrytningskomponenter (se avsnittet 4.3.1). Vid undersökningen för Halmstads kommuns räkning hittades två källor med höga halter PCE och två plymer utifrån dessa källor. Inför en eventuell sanering var det varit viktigt att veta PCE-plymens spridning i grundvattnet för på ett effektivt sätt rena området.

Markytan sluttar generellt aningen åt väster. Direkt väster om kemtvätten återfinns dessutom en gammal banvall som ligger i samma nivå som kemtvätten (Davidsson, 2013). Den generella bilden av jordlagerföljden för området är: fyllning 0,5 - 2,0 meter, lera 0,5 - 2,0 meter, sandigt material/morän 1,0 - 1,5 meter. Bergytan anses luta i motsatt riktning, således öster ut. På grund av svårigheter att borra i området samt att det är en gammal israndzon är det troligt att de olika lagren är klart mer komplexa än vad som har kunnat fastslås. Vid borring av djupa borrhål gick det inte att fastslå jordlagerföljden. Berg påträffades i ett par punkter på 30 meters djup.

Grundvattenytan återfinns på 1,0 - 1,5 meters djup under markytan under sommaren och flödet sker generellt i västlig riktning. I de södra delarna av området anses dock grundvattnet strömma i nordvästlig riktning. Närmsta ytvattenrecipient är 2 km bort och närmsta uttagsbrunn för vattentäkt är 1 km bort. Den hydrauliska gradienten är uppskattad till 2,2 % och avtar västerut ner mot 0,8 % (Davidsson, 2013). Den hydrauliska konduktiviteten i de övre lagren har mätts upp från 10^{-3} till 10^{-5} m/s medan konduktiviteter på 10^{-7} till 10^{-11} m/s uppmättes i lerlagren. I den mellanliggande moränen uppmättes stor variation, troligen på grund av stora heterogeniteter. Konduktiviteten var där 10^{-5} till 10^{-10} m/s.



Figur 10. Bedömd spridning av PCE vid Holms, lokalen samt tomten är markerade med inre respektive yttre sträck. Alla grundvattenrör är även markerade, figur efter Davidsson (2013).

Runt fastigheten har 32 grundvattenrör satts (se figur 10). Precis intill den troliga föroreningskällan uppmättes halter av PCE på 24 mg/L. Halterna sjunker sedan kraftigt västerut, men även 40 meter från föroreningskällan återfinns förhållandevis höga halter PCE på 650 µg/L (Davidsson, 2013). Den uppmätta dekloreringsgraden, nedbrytning av PCE, är relativt låg men värden på upp emot 50 % har funnits. Det innebär att hälften av PCEn har brutits ner, vilket återspeglas i mängden återfunna nedbrytningsprodukter. Enligt Davidsson (2013) tyder detta på att förutsättningen för relativt god biologisk nedbrytning finns. De mycket låga halterna nedbrytningsprodukter som är uppmätta tyder troligen på att föroreningskällan ligger nära och inte nödvändigtvis på dåliga nedbrytningsförhållanden.

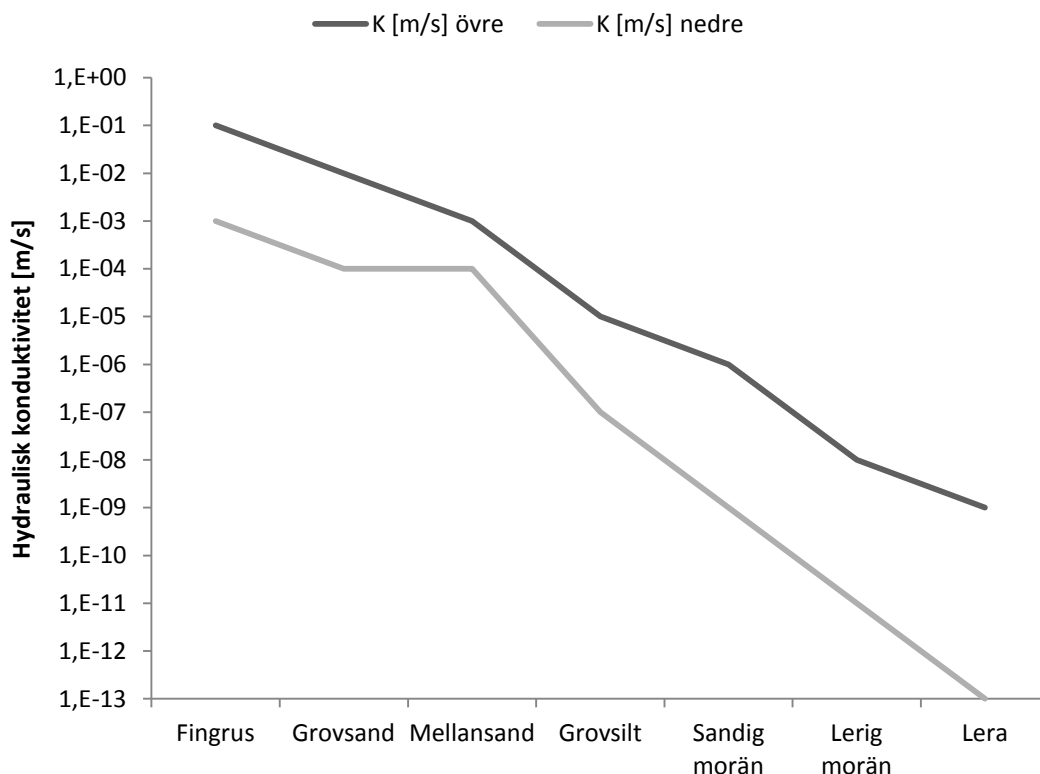
4.2 Viktiga fysikaliska parametrar för en grundvattenmodell

Vid modellering av förorenings spridning är det ytterst viktigt med en bra grundvattenflödesmodell (Gustafsson & Refsgaard, 2007). Utan en acceptabel grundvattenflödesmodell blir resultatet oanvändbart, så en stor vikt bör läggas vid denna. Då marken ofta är mycket heterogen och variabler förändras i både tid och rum krävs nästan alltid att stora förenklingar görs. Modellen i sig själv är en förenkling i första början och utöver detta antas ofta vissa områden vara homogena och tidsaspekten tas många gånger inte med (Brömssen, m.fl., 2006), så kallad "steady-state" simulering. Ofta modelleras transport vid stationära förhållanden och många generella värden används (Gustafsson & Refsgaard, 2007), både på grund av bristen i dataunderlaget och brist av tid.

För att modellera grundvatten är vissa modellparametrar centrala; hydrogeologiska egenskaper så som hydraulisk konduktivitet, porositet, vattentillförsel, lagerföljder och höjddata. Generella värden för dessa egenskaper behöver då sammanställas för att en generell modell skall kunna byggas.

4.2.1 Hydraulisk konduktivitet

Den hydrauliska konduktiviteten (K) är ofta central i grundvattensammanhang och beskriver vilken kapacitet ett medium har att transportera en vätska. Konduktiviteten beror både på mediet samt vilken vätska eller fluid som transporteras och är proportionell mot fluidens densitet, inverst proportionell mot viskositeten och relaterad till kornstorleken hos mediet (Domenico & Schwartz, 1990). Konduktiviteten varierar stort mellan olika medier så som mellan sand och lera, men varierar även stort i rummet då marken är heterogen. Dock antas ofta att marken är homogen över en större yta. Vissa försök har gjorts att sammanställa data, både i Sverige (se figur 11) och utomlands (se appendix).



Figur 11. Mättad hydraulisk konduktivitet för några vanliga jordmaterial efter data från Espeby & Gustavsson (1998) (Observera den logaritmiska skalan).

Ett generellt värde för olika typer av jordarter går således att ta fram (se tabell 3), om än med viss osäkerhet. Berg har mycket varierade konduktivitet, mycket beroende på hur sprickigt berget är. Kraftigt uppsprucket berg kan ha lika höga konduktiviteter som sand (10^{-3} m/s) medan solid sten kan ha så låg som $3 \cdot 10^{-14}$ m/s (Domenico & Schwartz, 1990). Bear (1972) hävdar även att yngre granit, således förhållandevis solitt berg, har en hydraulisk konduktivitet på 10^{-10} till 10^{-12} m/s. Det kan vara svårt att finna ett bra generellt värde, då vattengenomsläppligheten till stor del styrs av sprickor i berget och deras sammankoppling. Om berggrunden antas vara solid kan ett värde på under 10^{-12} m/s ansättas för bergmassan vilket har gjorts i ESM.

Tabell 3. Valda generella värden på konduktivitet för olika jordarter samt berg.

| Jordart | Generellt valt K [m/s] |
|--------------|------------------------|
| Fingrus | 10^{-2} |
| Grovsand | 10^{-3} |
| Mellansand | $3 \cdot 10^{-4}$ |
| Grovsilt | 10^{-6} |
| Sandig morän | $3 \cdot 10^{-8}$ |
| Lering morän | $3 \cdot 10^{-10}$ |
| Lera | 10^{-10} |

4.2.2 Porositet

Porositeten ökar generellt med minskad kornstorlek. Grovt grus kan ha en porositet på 24 % och lera har upp emot 60 % medan bergarter oftast har klart lägre porositet (Domenico & Schwartz, 1990). Utefter Naturvårdsverkets riktvärden (Naturvårdsverket, 2009) och sammanställning av porositet i vanliga material (se tabell 4) valdes ett generellt värde på porositeten till 40 % och den kinematiska porositeten till halva det värdet, 20 %.

Tabell 4. Porositeter i vanliga jordtyper, angivet i procent, data från Domenico & Schwartz, 1990.

| Porositet | Lågt [%] | Högt [%] | Medel [%] |
|------------|----------|-------------------|-----------|
| Grovt grus | 24 | 36 | 30 |
| Fint grus | 25 | 38 | 31,5 |
| Grovsand | 31 | 46 | 38,5 |
| Finsand | 26 | 53 | 39,5 |
| Silt | 34 | 61 | 47,5 |
| Lera | 34 | 60 | 47 |
| | | Medelvärde | 39 |

4.2.3 Grundvattenbildning

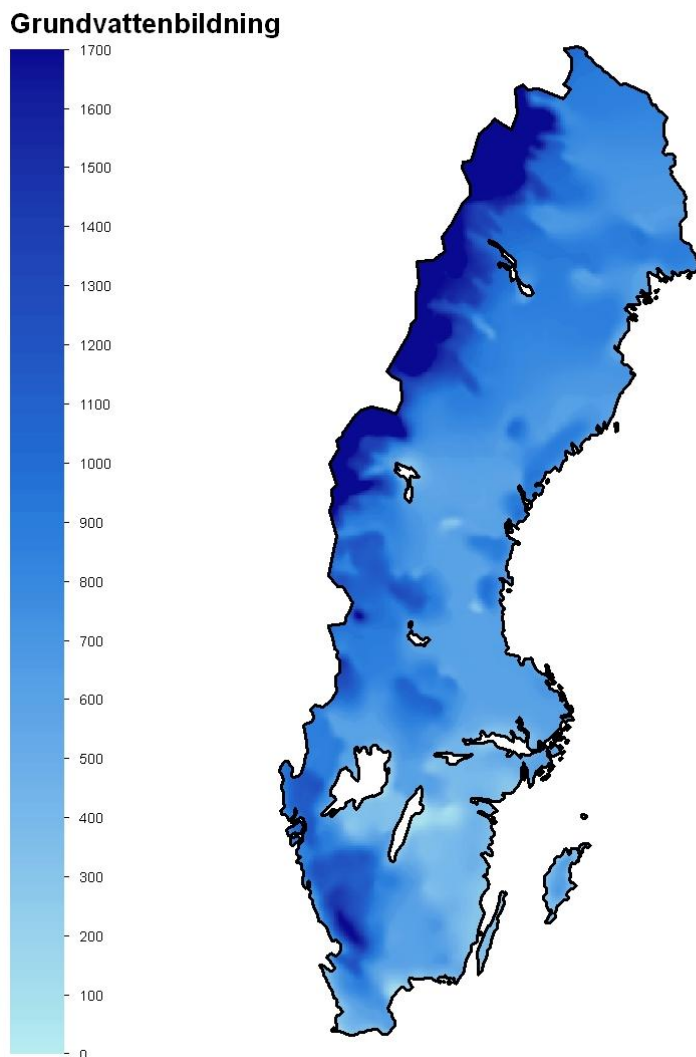
Nederbörd bildar grundvatten genom perkolation och driver grundvattenflöden och nivåer. Andelen nederbörd som bildar grundvatten är beroende av flertalet faktorer så som jordtyp, markanvändning och topografi. Stora delar av ett avrinningsområde är inflödesregioner för grundvatten där grundvatten bildas och ent liten del är utströmningsområden, där grundvatten bildar vattendrag och sjöar (Rodhe, m.fl., 2006). Genom att anta att hela avrinningsområdet är ett inströmningsområde erhålls den potentiella grundvattenbildningen, d.v.s. den grundvattenbildningen som skulle ske om hela området vore ett inströmningsområde (Rodhe, m.fl., 2006). I många områden så som städer är det vanligt med hårdgjorda ytor där ytavrinningen blir betydande, men om ytavrinningen bortses ifrån blir grundvattenbildningen lika med skillnaden mellan nederbörd och avdunstning under en längre tid.

Naturvårdsverket har ansatt ett standardvärde för grundvattenbildningen i sin riktvärdesmodell på 100 mm/år (Naturvårdsverket, 2009) vilket är klart lägre än de värden som beräknats fram, bland annat av Rodhe m.fl. (2006) på ~150 - 600 mm/år.

Naturvårdsverkets ansatta värde är satt i underkant för att hantera hårdgjorda ytor och

ytavrinning, detta för att spegla att föroreningar ofta ligger i områden med hårdgjorda ytor (Naturvårdsverket, 2009). För ett bättre värde på grundvattenbildningen över olika regioner i Sverige kan data för verklig nederbörd och avdunstning under normalperioden (SMHI, 2009), 1961-1990, användas. Genom att i varje punkt interpolera fram nederbörd och avdunstning och sedan beräkna skillnaden fås ett mer platsspecifikt värde för grundvattenbildningen i olika delar av Sverige (se figur 12). Denna beräkning tar dock inte hänsyn till hårdgjorda ytor. Det är därför bättre att använda den maximala grundvattenbildningen för ett område i grundvattenmodellen och sedan i själva modellen ta hänsyn till hårdgjorda ytor och andra faktorer som kan påverka. Genom att göra på detta sätt blir resultatet mer korrekt vid t.ex. avsänkning av grundvattennivån genom pumpning. Avsänkningen överskattas inte då modellen får tillgång till mer vatten som annars hade försvunnit genom ytavrinning.

I stora delar av Sverige ligger grundvattenbildningen på ungefär 100 till 300 mm/år och ett ansatt standardvärde på 200 mm/år i bebodda områden så som Mälardalen ansågs vara ganska rimligt, se appendix för mer detaljerade bilder.



Figur 12. Grundvattenbildning för olika regioner i Sverige i mm/år. Bild framtagen utifrån data efter SMHI's normalperiod (SMHI, 2009).

4.2.4 Topografi

Topografin styr många gånger grundvattenflöden och grundvattennivåer. I denna studie har bedömningen gjorts att det i de flesta fall krävs topografisk data för att en användbar hydrologisk modell ska kunna upprättas. Nivåmätningar av grundvattnet är mycket användbart för att kunna kalibrera in den hydrologiska modellen och nödvändigt för att ge en användbar modell (Gustafsson & Refsgaard, 2007). Även jordlagerföljder kan vara lämpliga att använda för att på ett bra sätt beskriva konduktivitetens förändring i rummet.

I Naturvårdsverkets riktvärdesmodell antas den hydrauliska gradienten vara 3 %, vilket är högre än för de beräknade gradienterna i de tre utvalda uppdragen (se avsnitt 4.1). Det generella värdet på gradienten sattes istället till 2 % men tanken är att användaren av modellen ändrar detta om gradienten i det aktuella området avviker.

4.2.5 Jordlager

Jordlagerföljden och mäktigheten kan variera stort mellan olika platser och bör anpassas till lokala förhållanden i grundvattenmodellen genom att använda lämpliga hydrauliska konduktiviteter och mäktighet för olika lager. Som en utgångspunkt studerades först de tre utvalda uppdragen (se avsnitt 4.1) och jordlagerföljderna sammanställdes här för respektive uppdrag. Sedan gjordes en total sammanställning för att få en initial jordlagerföljd i standardmodellen som sedan kan modifieras av användaren.

För Holms finns det ett antal provpunkter, totalt ca 30 stycken borrhål. Här fanns det redan en beräknad min- och maxnivå för varje lager (Davidsson, 2013). Dessa användes och ett medelvärde bildades för de olika jordlagrens mäktighet (se tabell 5).

I Boxholm är lagerföljden fyllning, morän och sedan berg. Tyvärr är enbart fyllningens mäktighet känd (se tabell 5) om än med många provpunkter. Ett värde för moränen eller berget kan dock inte fastslås. Detta problem är ganska vanligt förekommande bland uppdrag där föroreningsspridning är av intresse.

För Estländaren har 78 provborrningar ner till berggrunden genomförts. Varje prov har kategoriserats till 6 olika jordlagerföljder (*sand* och *isälvsgrus* slogs samman till *sand och grus*). Lerlagret har oftast en mäktighet på 1-2 meter och sand/grus lagret oftast en mäktighet på 2-3 meter enligt Berglund, m.fl. (2003). De 78 provborrningarna användes för att ta fram ett medelvärde för varje lager då detta saknades. Eftersom det fanns punkter som avvek mycket ur mängden valdes ett geometriskt medelvärde för att ge en mer rättvis bild (se tabell 5).

Tabell 5. Sammanställning av beräknade jordlagerföljder från tre valda uppdrag. Observera att värdet för berg är antal meter från markytan till bergytan. ¹ Geometriskt medelvärde. ² Visual MODFLOW kräver lagertjocklek på minst 1 meter.

| Uppdrag - Holms | Min [m] | Max [m] | Medelvärde [m] |
|------------------------------|----------------|----------------|-----------------------------------|
| Fyllning | 0,5 | 1 | 0,75 |
| Sand | 1 | 1,5 | 1,25 |
| Lera | 0,5 | 2 | 1,25 |
| Morän | 8 | 7,5 | 7,75 |
| Berg (djup) | 10 | 12 | 11 |
| Uppdrag - Boxholm | Min [m] | Max [m] | Medelvärde¹ [m] |
| Fyllning | 0 | 2,1 | 0,9 ² |
| Morän | okänd | okänd | - |
| Berg (djup) | okänd | okänd | - |
| Uppdrag - Estländaren | Min [m] | Max [m] | Medelvärde¹ [m] |
| Fyllning | 0,5 | 16,4 | 2,6 |
| Lera | 1 | 4 | 1,7 |
| Sand och grus | 1 | 42 | 4,0 |
| Morän | 0,5 | 22 | 2,2 |
| Berg (djup) | 0,5 | 42 | 7,4 |

Utgående från dessa värden ansattes ett medelvärde för fyra olika typer; fyllning/sand som blir en öppen akvifer, sedan ett lerlager, efter detta bildar morän en sluten akvifer som avgränsas nedtill av berget (se tabell 6). Både Estländaren och Holms kan ses på detta sätt om vissa lager slås ihop, vidare kan även Boxholm beskrivas genom att avlägsna lager 2 och 3. Det bör observeras att dessa värden används som en grund för modellparametrarna och inte som sanna värden.

Tabell 6. Sammanställning av jordlagerföljder för ESM-modellen. Värdet för berg är antal meter från markytan till bergytan. Observera att summan av tjockleken i lager 1-3 bör vara samma som lager 4. Detta stämmer dock ej och värdena bör inte tas som helt sanna utan snarare som riktvärden.

| Lager | Typ | Material | Medelmäktighet [m] |
|--------------|----------------|---------------------|---------------------------|
| 1 | Öppen Akvifer | Fyllning/sand | 2,3 |
| 2 | Akviklud | Lera | 1,4 |
| 3 | Sluten Akvifer | Morän (sand + lera) | 6,2 |
| 4 | Akvifug | Berg | 9,9 (djup till berg) |

4.2.6 Randvillkor

Det krävs även externa randvillkor till en modell, som sätter de mycket viktiga modellgränserna. Utströmningsområden, vattendrag och sjöar är exempel på externa randvillkor. Även interna randvillkor som kan påverka vattenflöden är viktiga, exempelvis pumpbrunnar, infiltrationsanläggningar och dränering. För att sedan få en uppfattning om att modellen beskriver grundvattenflödena någorlunda bra behövs verkliga värden som kan användas för kalibrering/validering. Grundvattennivåer i brunnar är lämpligt att använda men även nivåer i sjöar och vattendrag kan vara användbara vid kalibrering och validering.

4.2.7 Valda parametrar till konceptualisering av ESM

Utefter de val som gjorts bland enskilda parametrar skapades en konceptuell modell med 5 lagerindelningar (se tabell 7) där lager 4 och 5 båda representerar berg men är uppdelade på två lager. Detta ger möjligheten att omvandla ena berglagret till en annan typ av jordlager om det skulle vara önskvärt att beskriva något av de andra lagren mer noggrant, t.ex. dela upp lager 1 i fyllning och sand. Vid modellering av enbart en akvifer kan de två översta lagren inaktiveras och den slutna akviferen blir således en öppen akvifer, alternativt kan de lägre lagren omvandlas till berg och modellera på så vis enbart en öppen akvifer.

Tabell 7. Valda generella hydrologiska värden för den konceptuella grundvattenmodellen.

| Lager | Typ | Material | K_x [m/s] | K_y [m/s] | K_z [m/s] | Måktighet [m] |
|-------|----------------|---------------------|-------------------|-------------------|-------------------|---------------|
| 1 | Öppen Akvifer | Fyllning/sand | 10^{-5} | 10^{-5} | 10^{-5} | 2,5 |
| 2 | Akviklud | lera | 10^{-10} | 10^{-10} | 10^{-10} | 1,5 |
| 3 | Sluten Akvifer | Morän (sand + lera) | $3 \cdot 10^{-8}$ | $3 \cdot 10^{-8}$ | $3 \cdot 10^{-8}$ | 6,0 |
| 4 | Akvifug | Berg | 10^{-12} | 10^{-12} | 10^{-12} | 15,0 |
| 5 | Akvifug | Berg | 10^{-12} | 10^{-12} | 10^{-12} | 15,0 |

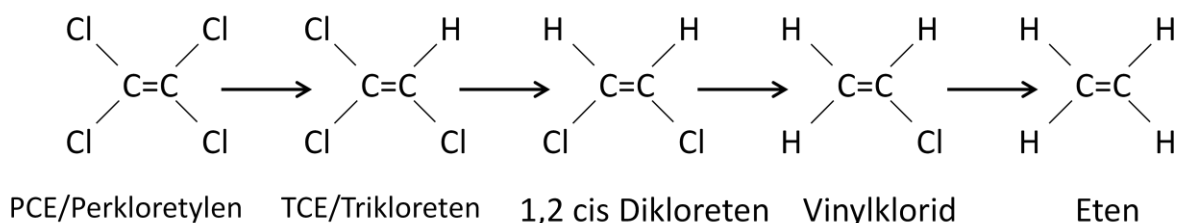
| Parameter | Typ | Värde | Enhet |
|-----------|---------------------|-------|-----------|
| I | Grundvattenbildning | 200 | mm/år |
| dh/dl | Hydraulisk gradient | 0,02 | m/m |
| n | Porositet | 0,4 | Enhetslös |
| n_e | Kinematik porositet | 0,2 | Enhetslös |

4.3 Aktuella föroreningar och kemiska parametrar

I de tre uppdragsfallen förekommer tre olika typer av föroreningar; PCE, bensen och arsenik. Alla tre är skadliga men spridningsprocesserna i marken skiljer sig åt. PCE och bensen bryts ner medan arsenik kan fastläggas kraftigt.

4.3.1 PCE

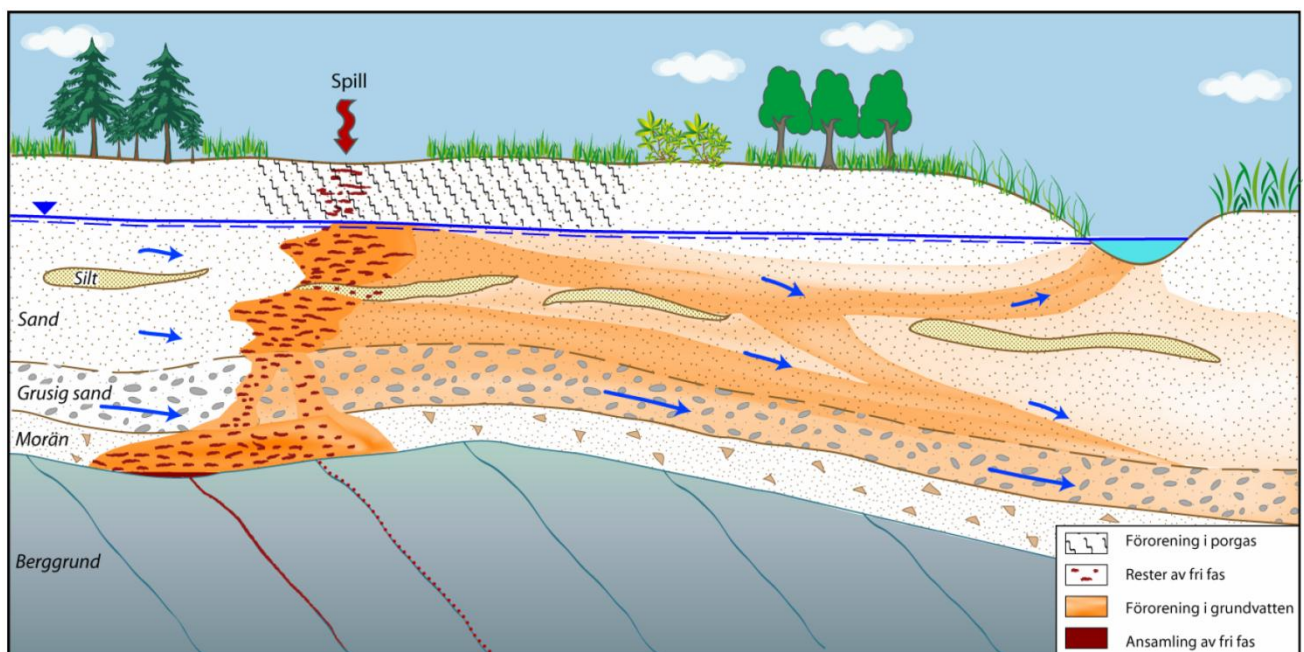
PCE (perkloretylen eller tetrakloreten) är ett lösningsmedel som tidigare var vanligt förekommande vid kemtvätt. Mycket stora mängder har använts genom åren, dock är PCE på väg att fasas ut som lösningsmedel (Sterner, 2003). PCE har även använts inom industrin som avfettningsmedel och i vissa fall även inom slakteribranschen för extrahering av slaktrester (Englöv, m.fl., 2007). PCE bryts ner biologiskt i flertalet steg (se figur 13) till eten som är den första icke skadliga delen i kedjan. PCE ger bland annat njurskador (Sterner, 2003).



Figur 13. Nedbrytning av PCE. Efter Englöv, m.fl. (2007).

Halveringstiden för PCE kan vara upp emot 5 år (Walger, 2006) men fullskalig nedbrytning kommer inte beaktas i själva modellen. PCE kommer brytas ner men ingen av produkterna kommer att tas hänsyn till. För att få en fullständig bild av förorenings-spridningen är det nödvändigt att titta på alla produkterna men det ryms inte inom detta arbete, standard versionen av MT3DMS kan heller inte hantera detta. Det får ändå anses värdefullt att titta på PCEs spridning för att få en viss bild av spridningen.

PCE har en densitet som är högre än vatten 1620 kg/m^3 (Englöv, m.fl., 2007), och även nedbrytningsprodukterna har en högre densitet än vatten bortsett från vinylklorid, vilket är en gas. Vid PCE-utsläpp kommer föroreningen först och främst hålla sig i fri fas och sjunker under grundvattenytan för att sedan lösas upp och spridas med grundvattnet (se figur 14). Den fria fasen kan bli kvar i jorden under mycket lång tid och kontinuerligt förorena grundvattnet som passerar området, med ett tidsperspektiv på hundratals år (Englöv, m.fl., 2007). PCE sorberas och bryts visserligen ner men eftersom dessa processer inte är så starka kan PCE spridas över stora avstånd.

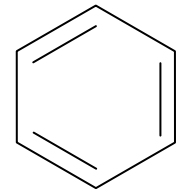


Figur 14. Spridning av PCE och andra klorerade lösningsmedel vilka är tyngre än vatten. Bild från Naturvårdsverkets rapport 5663 med tillåtelse.

Vid modellering av PCE och andra klorerade lösningsmedel är advektion, mekanisk dispersion, förångning och nedbrytning viktiga faktorer (Jonasson, m.fl., 2007). Varken förångning eller den fria fasen tas med i ESM-modellen, framför allt eftersom MT3DMS inte kan hantera dessa aspekter. PCE kommer i modellen vara i lös fas alternativt i fast fas som regleras med en linjär sorptions koefficient.

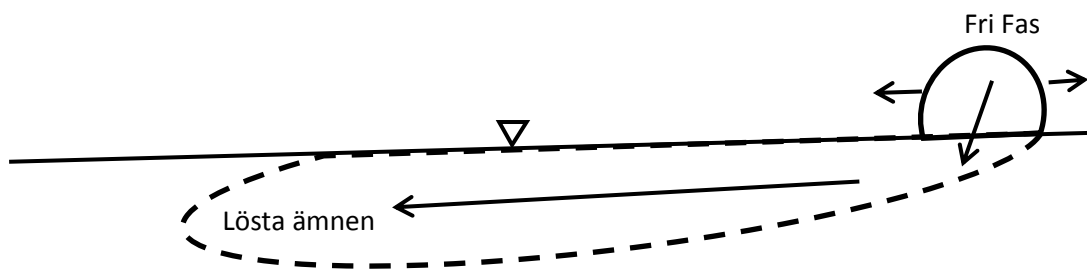
4.3.2 Bensen

Bensen är ett aromatiskt kolväte bestående av 6 kol- och 6 väteatomer (se figur 15) och förekommer framför allt som en tillsats i bensin för att öka oktantalet (Sterner, 2003). Nackdelen med bensen är att det även är cancerframkallande.



Figur 15. Kemisk struktur av bensen.

Bensin har till skillnad från PCE en lägre densitet än vatten på 879 kg/m^3 (Domenico & Schwartz, 1990) så vid läckage av bensin bildar bensen först en fri fas ovanpå grundvattenytan. Med tiden löser sig bensenens komponenter i grundvattnet och kan transporteras med vattnet eller brytas ner. Detta medför att spridningen av fri fas påverkar spridningen i vattenfasen. Då den fria fasen rör sig flyttas källan till den lösta bensinföroreningen i grundvattnet (se figur 16). På samma sätt påverkas spridningen av bensen som är en komponent i bensin.



Figur 16. Konceptuell skiss på hur den fria fasen rör sig ovanpå grundvattenytan och vattenlös bensen sprids med grundvattnet.

Vid modellering av aromater, som bensen tillhör, är det fyra egenskaper som är viktiga: advektion, mekanisk dispersion, nedbrytning (aeroba förhållanden) och förångning (Jonasson, m.fl., 2007). På samma sätt som tidigare kommer nedbrytning och fasfördelning mellan fast och lös fas tas hänsyn till, men den fria fasen och förångning kommer att lämnas utanför.

4.3.3 Arsenik

Arsenik är en halvmetall som används till många olika saker och har stor användbarhet, bland annat till träskyddsmedel (impregnering), bekämpningsmedel och vissa färger. Arsenik är skadligt, starkt toxiskt och även cancerframkallande (Sterner, 2003). Trots dess vanlighet finns det inget utvecklat Freundlich-samband (se avsnitt 4.4.3) mellan den lösta och fasta fasen. Det beror troligen på svårigheter att finna ett tillräckligt bra samband och inte avsaknaden av försök att göra det (Gustavsson, m.fl., 2007).

Arsenik förekommer till skillnad mot andra metalljoner som anjon (As^{III} och As^{V}) och är redoxkänsligt. Troligen binder inte arsenik alls till varken lermineral eller humus, utan binder snarare till oxider istället (Gustavsson, m.fl., 2007). Oxider är vittringsprodukter som bildas när mangan, aluminium och järn vittrar från bergarter. Järnoxider är vanligt i de flesta jordar medan rena aluminium- och manganoxider är mer ovanliga. Processen är mycket pH-beroende och vid låga pH-värden binder arsenik mycket hårt. Det är intressant att först avgöra om arsenik fastläggs i den förorenade marken eller inte innan en modell byggs upp för en specifik plats.

Vid modellering av arsenik är advektion, mekanisk dispersion, sorption och upptag av växter viktiga faktorer att ta hänsyn till. Stor vikt bör läggas vid sorption och vid att om möjligt beskriva denna process kemiskt, vilket tyvärr inte kommer att ske i ESM.

4.4 Transport av föroreningar

De viktigaste egenskaperna för ämnestransporten av bensen, PCE och arsenik i grundvatten är advektion, mekanisk dispersion, sorption och nedbrytning.

4.4.1 Advektion

Advektion är då det lösta ämnet transporteras med vattnet och omfattar inte processer som sprider ut ämnet. Ämnestransporten antas inte heller påverka grundvattenströmningen. Detta kan dock vara felaktigt i vissa fall med tunga ämnen men i praktiska fall är detta antagande oftast helt gångbart (Domenico & Schwartz, 1990). Vattnets hastighet kan beskrivas med hjälp av Darcys lag där hastigheten beräknas genom att ta hänsyn till den kinematiska porositeten (se ekvation 19), alltså de porer som bidrar till vattenflödet (Domenico & Schwartz, 1990).

$$v = -\frac{K}{n_e} \frac{\partial h}{\partial l} \quad (19)$$

Där

v är grundvattnets partikelhastighet [m/s]

K är hydraulisk konduktivitet [m/s]

n_e är kinematisk porositet [dimensionslös]

dh/dl är hydraulisk gradient [m/m]

4.4.2 Dispersion

Hydrodynamisk dispersion är utspridning av ämnet på grund av variation i strömningshastigheter (mekanisk dispersion) och koncentrationsskillnader i mediet (diffusion) (se ekvation 20) (Domenico & Schwartz, 1990). Ofta är diffusionen mycket mindre än den mekaniska dispersionen (Gustafsson & Refsgaard, 2007) och kan många gånger bortses ifrån. Därför beaktas härmed enbart den mekaniska dispersionen (Domenico & Schwartz, 1990) (se ekvation 21) och benämns dispersion.

$$D = D' + D_d^* \quad (20)$$

Där

D är hydrodynamisk dispersionskoefficient [m^2/s]

D' är mekanisk dispersionskoefficient [m^2/s]

D_d^* är effektiv diffusionskoefficient [m^2/s]

$$D' = v * \alpha \quad (21)$$

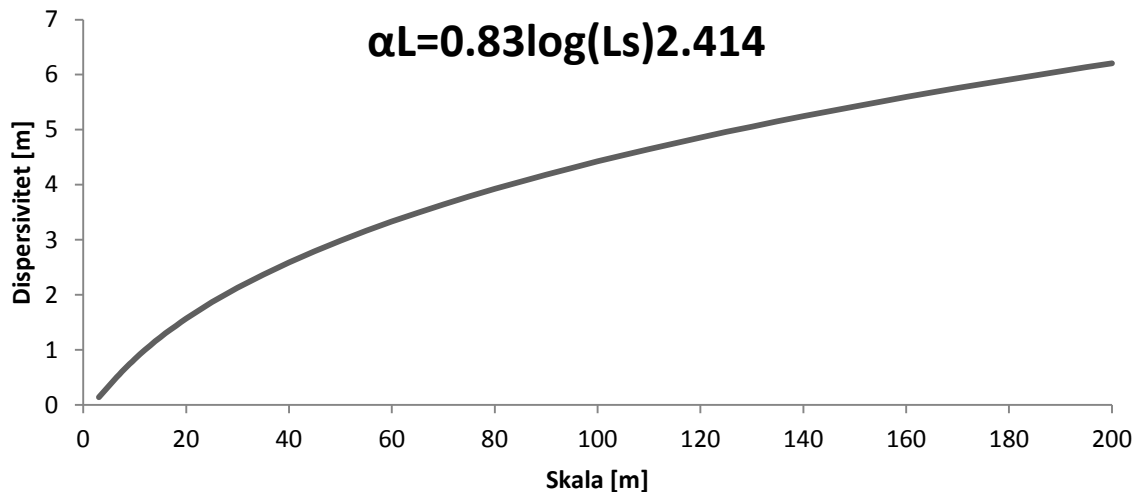
Där

D' är mekanisk dispersionskoefficient [m^2/s]

v är grundvattnets partikelhastighet i flödesriktningen [m/s]

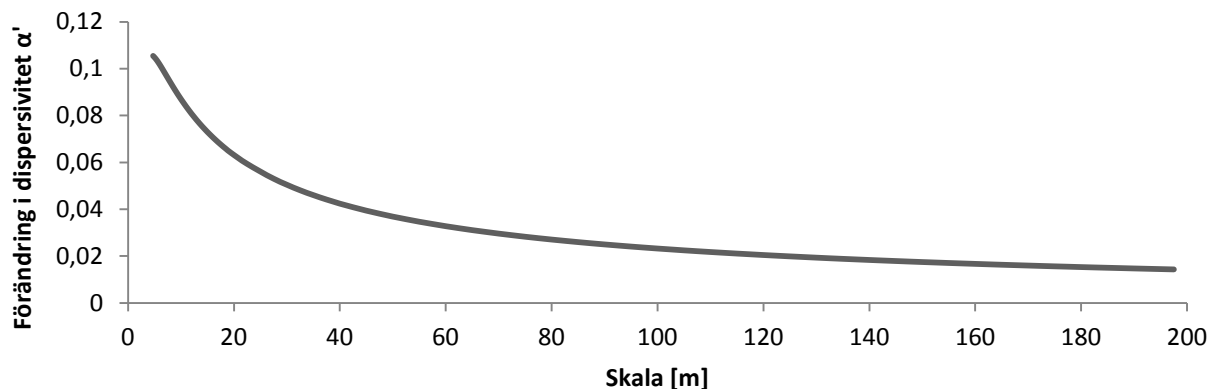
α är dispersiviteten i flödesriktningen [m]

Dispersionen sker i x-, y-, och z-led och behöver inte nödvändigtvis vara lika stor i alla riktningarna. Ofta följer dispersiviteten (α) följande mönster $\alpha_{\text{longitudinell}} > \alpha_{\text{transversell}} > \alpha_{\text{vertikal}}$ (Jonasson, m.fl., 2007). Det har även visat sig att värdet på dispersiviteten har med skalan som studeras att göra. En sammanställning av 59 olika fältstudier, dock med blandade säkerheter, visade ett samband mellan skalan som studerades och lämpliga värden på dispersiviteten (Domenico & Schwartz, 1990). Försök att skapa en matematisk beskrivning har även gjorts (se figur 17). En allmän tumregel är dock att dispersiviteten inte bör vara större än 10 % av transportsträckan (Jonasson, m.fl., 2007).



Figur 17. Matematisk beskrivning mellan studerad skala [L_s] och den longitudinella dispersiviteten [α_L] (Xu, m.fl., 1995).

Valet av dispersivitet kommer från valet av skala som studeras och vid närmre analys av denna funktion (se figur 17) visar det sig att den är som mest känslig av inparametern (skala) vid låga värden (se figur 18). Vid värden runt 4 meter är förändringen och alltså känsligheten som störst för att sedan avta med allt större studerad skala.



Figur 18. Dispersivitetens känslighet vid olika skalor som studeras efter formeln i figur 17.

Det går även att beskriva dispersionen med hjälp av en normalfördelning och standardavvikelse där plymens varians i utbredning beskrivs (Domenico & Schwartz, 1990) (se ekvation 22).

$$\sigma = \sqrt{2Dt} \quad (22)$$

Där

σ är standardavvikelsen i plymens utbredning [m]

D är dispersionen [m^2/s]

t är tiden [s]

4.4.3 Sorption

Retardation är fördröjningsprocessen som sker på grund av sorption. Sorption omfattar adsorption, absorption och kemisk sorption. Adsorption sker framför allt genom tre processer; jonbyte, ytkomplexbildning och hydrofob adsorption. Lösa joner kan attraheras och fastläggas genom jonbyte men då jordpartiklar oftast är negativt laddade är detta endast relevant för katjoner (Gustavsson, m.fl., 2007). Jonbyte är även den svagaste processen av de tre adsorptionsprocesserna (Jonasson, m.fl., 2007). Ytkomplexbildning är då lösa joner reagerar med reaktiva ytgrupper på ytan av markpartiklar där humus och lermineral är de två viktigaste komponenterna i marken. Denna process är mycket pH-beroende (Jonasson, m.fl., 2007). För hydrofoba ämnen är den hydrofoba adsorptionen viktig då dessa ämnen gärna binder till humus och därför är även markens humushalt i dessa fall viktig för sorptionen.

Oftast antas sorptionen vara direkt proportionell mot koncentrationen vilket nämndes i avsnittet 3.4 men för en bättre beskrivning kan Freundlichs samband, som tar hänsyn till förändring av pH och koncentration, användas. Problemet är att ekvationen enbart är kalibrerad för den omättade zonen (Gustavsson, m.fl., 2007) och således inte går så bra att använda för transport i den mättade zonen. Därför kommer linjär sorption att användas. Linjära K_d -värden är lätt att finna för föroreningar då Naturvårdsverket bland annat har tabellerade värden för de flesta vanliga föroreningar (Naturvårdsverket, 2009). Antagandet

om linjär sorption är att förhållandet för halten i fastlagd och fri fas är direkt proportionell mot konstanten K_d (Zhang, 1990) (se ekvation 23).

$$\bar{C} = K_d C \quad (23)$$

Där

C är den lösta koncentrationen [mg/L]

\hat{C} är den fastlagda koncentrationen [mg/kg]

K_d är fördelningskoefficienten [kg/L]

För organiska ämnen kan en fördelningskoefficient, K_d , beräknas med hjälp av viktandelen organiskt kol i marken (f_{oc}) och fördelningskoefficienten (K_{oc}) (se ekvation 24). Där K_{oc} är fördelningskoefficienten mellan det organiska kolet och det organiska ämnet (Naturvårdsverket, 2009).

$$K_d = K_{oc} \cdot f_{oc} \quad (24)$$

Med hjälp av denna fördelningskoefficient kan sedan en retardationsfaktor beräknas (Bedient, m.fl., 1999) (se ekvation 25), Transporthastigheten kan sedan beräknas utifrån retardationsfaktorn och grundvattnets hastighet (Zheng, 1990).

$$R = 1 + \frac{1}{n} \rho_b K_d \quad (25)$$

Där

R är en retardationsfaktor [dimensionslös]

n är porositet [dimensionslös]

ρ_b är torr skrymdensitet [kg/m^3]

K_d är en fördelningskoefficient [m^3/kg]

4.4.4 Nedbrytning och förångning

Nedbrytning av ämnen kan ske kemiskt och med hjälp av organismer i både anaeroba och aeroba miljöer. Många gånger förenklas dessa annars ganska komplicerade processer matematiskt i motsvarande första ordningens sönderfall av radioaktivt material (Gustafsson & Refsgaard, 2007). Detta görs alltså på samma sätt som implementeringen av nedbrytningen i MT3DMS-modulen. En angiven halveringstid används för beräkning av nedbrytningshastigheten (se avsnitt 3.4 och ekvation 17).

Vissa ämnen kan även förångas och många ämnen kan tas upp av växter. Dessa processer kommer inte att tas i beaktande i denna rapport, dels för att skapa en enklare modell och dels för att MT3DMS inte hanterar dessa reaktioner.

4.5 Val av kemiska parametrar

Om inte platsspecifika värden för dispersion, sorption och nedbrytning finns, används istället följande parametrar (se tabell 8), vilka är en sammanställning av litteraturvärden. Det bör observeras att dessa värden är en sammanställning av blandade källor och i vissa fall medelvärden mellan en ”övre” och ”undre” gräns (se appendix för beräkningar).

Tabell 8. Modellparametrar till föroreningar., ¹ (Naturvårdsverket, 2009), ² se appendix för beräkning, ³ (Wiedemeier, m.fl., 1998), ⁴ (Naturvårdsverket; Institutet Svenska Petroleum, 1998).

| Ämne | Dispersion longi. [m] | Dispersion trans. [m] | Dispersion vertik. [m] | Sorption (K_d) [L/kg] | Nedbrytning [dag ⁻¹] |
|---------|--------------------------|--------------------------|---------------------------|------------------------------|-------------------------------------|
| Arsenik | 2 | 0,2 | 0,02 | 300 ¹ | - |
| Bensen | 2 | 0,2 | 0,02 | 1,48 ^{1;2} | 0,009 ^{4;2} |
| PCE | 2 | 0,2 | 0,02 | 5,26 ^{1;2} | 0,0004 ^{3;2} |

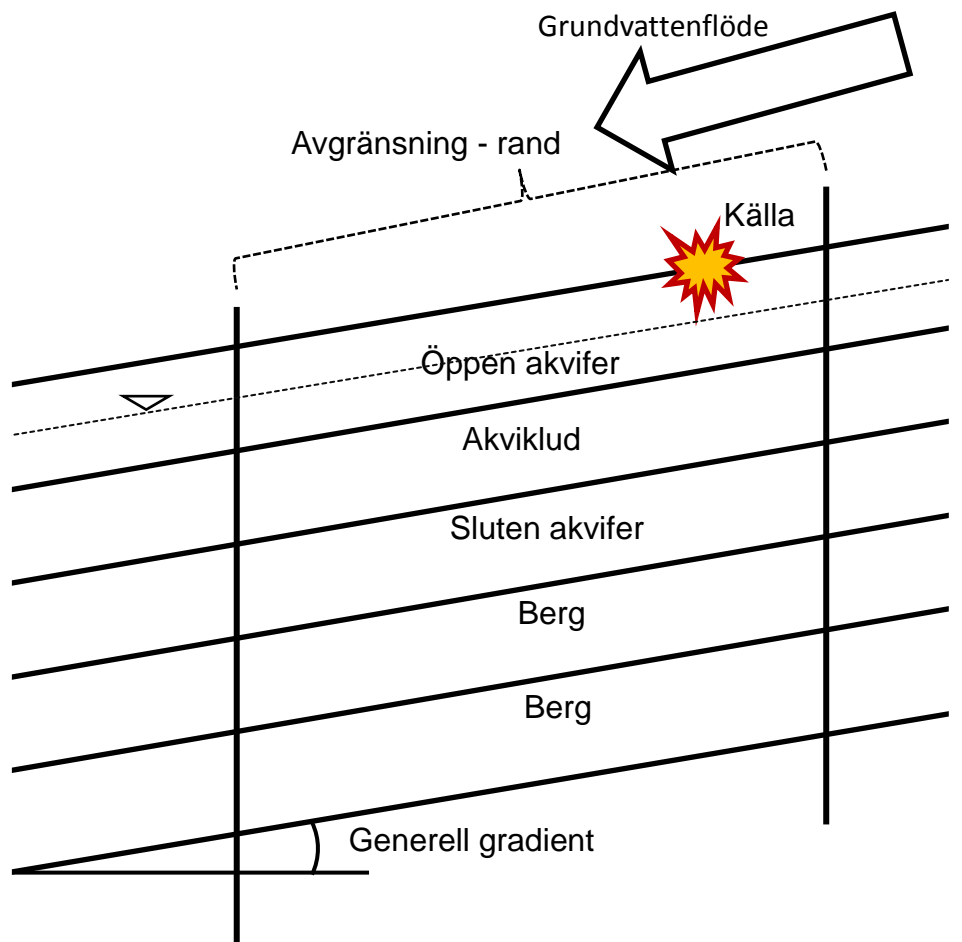
5 Resultat

5.1 ESM

Resultaten av litteraturstudien, analys av de tre utvalda uppdragen och en kontinuerlig diskussion med inblandade personer mynnade ut i en konceptuell modell som sedan byggdes upp i MODFLOW. ESM-modellens parametrar känslighetsanalyserades och därefter testades modellen mot uppdragen.

5.1.1 Konceptuell modell

Utgångspunkten för modellen var att ta en del av ett avrinningsområde och approximera detta linjärt. Randen placerades i modellen så pass långt ifrån händelsecentrum, föroreningsspridningen, att randen inte påverkar resultatet direkt. Konceptualiseringen av händelsecentrum drogs sedan ut så att modellen blir homogen hela vägen ut till randen (se figur 19). Modellens storlek sattes till 1·1 km för att de flesta föroreningar skulle få plats i centrum utan att randen skulle komma så pass nära att den skulle påverka resultatet.



Figur 19. Konceptuell modell av ESM, med lagerföljd och grundvattennivån.

Vidare efterliknas ESM med Naturvårdsverkets enklare modell genom val av parametrar. Där generella värden saknas används annan litteratur så långt det går för att som sista steg använda de tre uppdragen som parameterkälla. Val av parametrarnas storlekar har behandlats i kapitel 4.

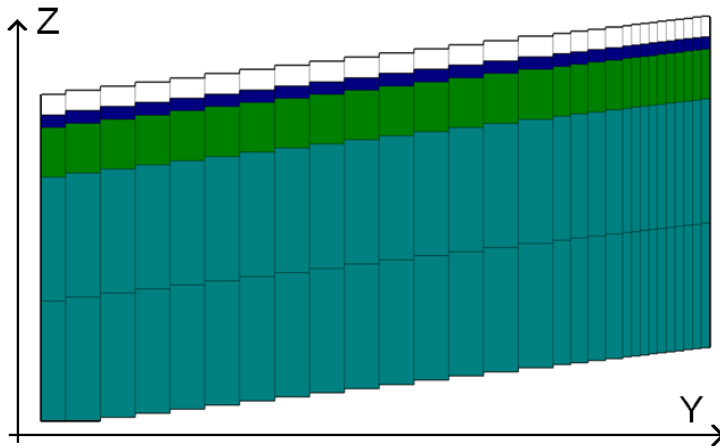
I de utvalda uppdragen har föroreningen redan kommit ut i grundvattnet och efter diskussion med inblandande personer valdes föroreningskonceptualiseringen som en konstant koncentration i grundvattnet. Detta skulle motsvara att grundvattnet står i jämvikt med den förorenade marken som konstant förorenar grundvattnet med en viss koncentration. Detta antagandet underlättar även implementeringen och uppskattningen av föroreningskällan. Många gånger har grundvattenprov tagits varmed förekomst av föroreningar konstaterats och koncentrationer uppmätts. Därigenom är det smidigare att implementera förorening som en konstant koncentration. Alternativet hade varit att placera källan som en bestämd halt i det infiltrerande vattnet men det har visat sig vara mycket svårare att finna en lämplig halt på infiltrationen.

5.1.2 Numerisk MODFLOW modell

Den konceptuella modellen implementerades i MODFLOW med varierande resultat. De flesta parametrarna är direkt implementerade men vissa har ändrats och vissa har tagits fram genom försök. Som tidigare nämnts krävs uppgifter om konduktans för användning av

dräneringsmodulen i MODFLOW (se avsnitt 3.3.4) och ett värde på detta kalibrerades fram med hjälp av vattenbalansen (se avsnitt 3.3)

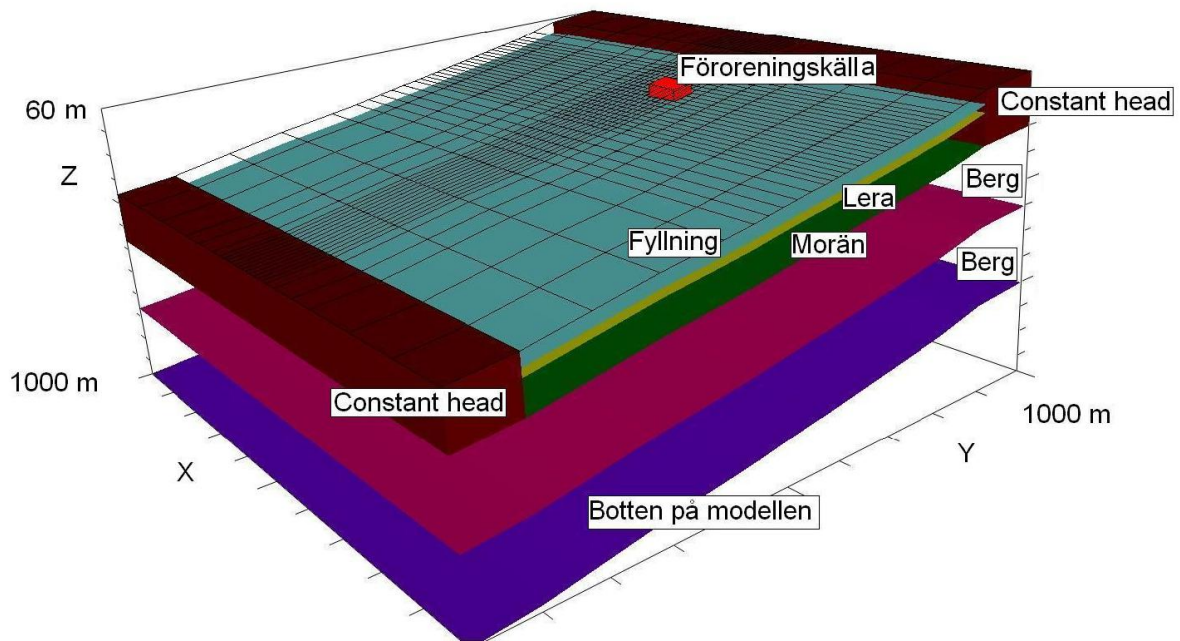
Upströms och nedströms användes randvillkoren konstant hydraulisk potential (h) och på resterande kantceller sattes gradienten över randen till noll ($dh/dn=0$) s.k. no-flow randvillkor, vilket görs per automatik om inget annat randvillkor sätts. Diskretiseringen av cellerna varierades med ökad upplösning nära händelsecentrum och minskade längre bort för att få kortare beräkningstid. Alla lager har en konstant lutning, konduktivitet och tjocklek utefter den konceptuella modellen (se figur 20 & 21). Varje lager är således homogent.



Figur 20. Implementering av den konceptuella modellen i MODFLOW. Flödet sker i negativ Y-riktning, från högre belägna celler till lägre. Observera att detta är bara en utskuren del av modellen i y-led, cellernas storlek blir allt mindre närmre föroreningsområdet, vilket syns till höger i bilden. Se tabell 9 för teckenförklaring av färgerna.

Tabell 9. Teckenförklaring till figur 20.

| Lager | Färg | Material | Typ | K_x [m/s] | K_y [m/s] | K_z [m/s] | Mäktighet [m] |
|-------|--------|----------------|----------------|-------------------|-------------------|-------------------|---------------|
| 1 | Vit | Fyllnadsmassor | Öppen Akvifer | 10^{-5} | 10^{-5} | 10^{-5} | 2,5 |
| 2 | Blå | Lera | Akviklud | 10^{-10} | 10^{-10} | 10^{-10} | 1,5 |
| 3 | Grön | Morän | Sluten Akvifer | $3 \cdot 10^{-8}$ | $3 \cdot 10^{-8}$ | $3 \cdot 10^{-8}$ | 6,0 |
| 4 | Turkos | Berg | Akvifug | 10^{-12} | 10^{-12} | 10^{-12} | 15,0 |
| 5 | Turkos | Berg | Akvifug | 10^{-12} | 10^{-12} | 10^{-12} | 15,0 |



Figur 21. ESM, med lagerindelning, randvillkor, placering av förorening och indelat rutnät. Observera att rutnätet är förstorat 4 gånger för att cellerna ska vara synliga på denna bildstorlek, samt proportionerna i Z led mot X och Y. Infiltrationen och dräneringen är inte markerade i figuren men sker i översta lagret, resterande randvillkor tillåter inget flöde.

Grundvattenbildningen sattes i överkant för att sedan leds ur modellen genom en generell dränering på 0,5 meters djup. Detta kan verka kontraproduktivt och i det initiala fallet tar dräneringen och grundvattenbildning ut varandra och modellen går att köras både med och utan dem. Däremot vid addering av en sänka behövs möjligheten för modellen att få in mer vatten för att inte överskatta grundvattensänkningen. Denna metod är diskutabel och läsaren hänvisas till diskussionsavsnittet för en djupare diskussion. För en sammanställning av alla parametrarna hänvisas läsaren till appendix.

5.2 Känslighetsanalys av parametrar

Alla körningar har körts och analyserats efter en tidsperiod på 7300 dagar (20 år) om inget annat anges. Plymens yttre utbredning, vilken hädanefter benämns rand, har ansatts efter de riktvärden som är framtagna av Naturvårdsverket för förorenat grundvatten (se tabell 10). Utbredningen är alltså sträckan från föroreningskällan till en vald halt.

Tabell 10. Riktvärden för olika ämnen i grundvatten (Naturvårdsverket, 2009).

| Ämne | Riktvärde vatten [$\mu\text{g/L}$] |
|---------|--------------------------------------|
| Arsenik | 5 |
| Bensen | 0,5 |
| PCE | 5 |

5.2.1 Randvillkor

Randvillkoren kan summeras till två olika; dränering och konstant potential. Randvillkoret konstant potential består i sig av ett randvillkor för varje lager i 1-3. Detsamma gäller randvillkoret dränering som består av både dränering och infiltration. Att köra modellen med enbart dränering, utan grundvattenbildning, ger inget då det inte finns något vatten att dränera. Det gör att modellen inte konvergerar och således inte kan finna en lösning. På samma sätt går det inte att köra modellen med infiltration men utan dränering, eftersom då kan inte modellen finna någon lösning med den ansatta infiltrationen. Det kan te sig rimligt med att lagren med vald mäktighet och konduktivitet inte kan föra bort den mängd vatten som kommer in. Detta innebär att modellen kan köras med tre olika uppsättningar randvillkor:

- I. Enbart konstant potential högst upp och längst ner i modellen
- II. Enbart dränering och infiltration, vilket sker på översta lagret i modellen
- III. Dränering och infiltration tillsammans med konstantpotentialrandvillkoren

För att behålla nuvarande önskade hydrauliska gradient på 2 % och konduktiviteter skulle det krävas en mycket större mäktighet i lager 1 än det ansatta för att inte hela nedre området skulle ligga under vatten vid höga nederbördsmängder. Den maximala vattentransporten genom en cell per år (på en meters bredd), vilket kan ses som det vattenledande markdjupet, kan beräknas enligt ekvation 26, vilket beräknas med hjälp av Darcy's lag (se avsnitt 3.3.3). Detta kan motsvara cellen längst ner i modellen som då ska kunna hantera allt vatten från alla celler ovan utan att grundvattennivån blir över cellens nivå och en sjö bildas således.

$$Q_{max} = A \cdot q = A \cdot K \frac{dh}{dl} = 2,5 \cdot 1 \cdot 10^{-5} \cdot 0,02 = 5 \cdot 10^{-7} [m^3/s] \quad (26)$$

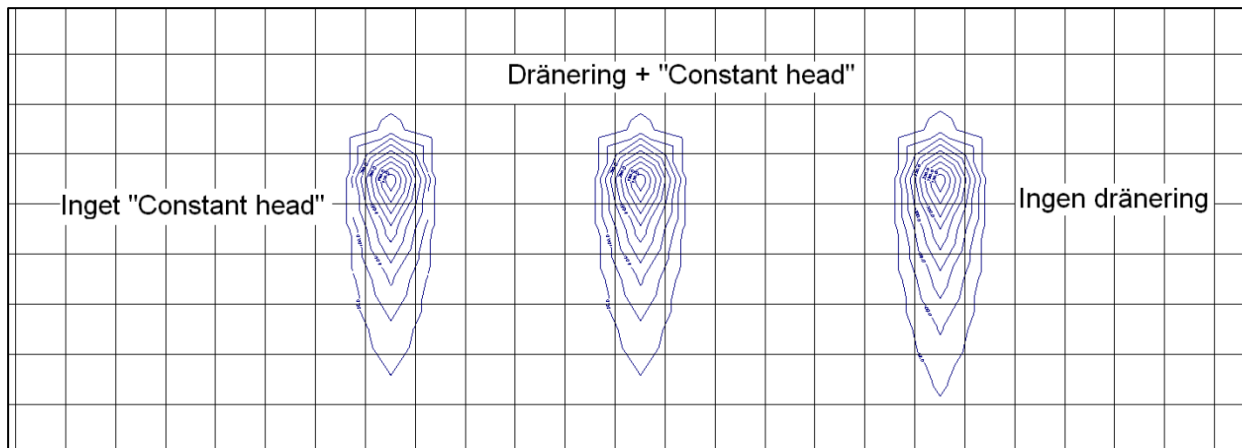
Ett flöde på $5 \cdot 10^{-7} m^3/s$ motsvarar ett flöde på $15,8 m^3/år$. Om det antas att enbart infiltrationen bidrar till vattenflödet (modellens övre kanter ligger på grundvattendelaren) samt att mängden som infiltrerar till nästa lager är försumbar behöver varje cell kunna hantera allt vatten som infiltrerar i alla celler ovan. Den mängd vatten som sista cellen ska kunna hantera utan att översvämma med nuvarande infiltration på 200 mm per år kan beräknas enligt ekvation 27.

$$Q_{in} = A \cdot I = 1 \cdot 1000 \cdot 0,2 = 200 [m^3/år] \quad (27)$$

Nuvarande modell kan dock inte hantera infiltration som är större än 15,8 mm per år utan att översvämmas (beräknat ur ekvation 27 med $Q_{in}=15,8 m^3/år$). För att hantera en infiltration på 200 mm/år och utan att förändra konduktiviteten eller den hydrauliska gradienten skulle det krävas en mäktighet för lager 1 på över 30 meter, vilket kan beräknas bakvägen med hjälp av ekvation 26. På samma sätt går det att räkna ut vilken konduktivitet som skulle krävas för nuvarande parameteruppsättning, $1,2 \cdot 10^{-4} m/s$, vilket motsvarar en grov sand. Dock förutsätter detta att den öppna akviferen inte läcker någon större mängd vatten ner igenom det underliggande lagret.

Den centrala delen av modellen är föroreningsspredning och således är det intressant att se hur valet av randvillkor påverkar plymens utbredning. Plymen förändras enbart marginellt vid

avlägsnandet av dränering och ingen märkbar förändring sker vid avlägsnandet av randvillkoret konstant potential. Tre olika uppsättningar av randvillkoren testades (se figur 22). För att vattenbalansen inte ska bli helt felaktig körs randvillkoret med dränering alltid tillsammans med infiltration, dessa kan inte köras separat utan att få helt orimliga resultat. Modellen är körd i 20 år med dispersion, nedbrytning och sorption. För att köra modellen krävs alltid att ett randvillkor definieras vilket gör att det inte går att köra modellen utan antingen dränering och infiltration alternativt ett konstant potential randvillkor.



Figur 22. Olika modellgränser och utbredningen av bensen. Till vänster – infiltration och dränering. I mitten – infiltration, dränering och konstant potential. Till höger – enbart konstant potential.

5.2.2 Vattenbalans

Vattenbalansen beräknas separat i alla olika lagren enligt ekvation 12, där lager 4 och 5 är sammanslagna. Vid användning av enbart randvillkoret konstant potential, är felet $D=0,01\%$. Vid användningen av infiltration och dränering som randvillkor tar de två randvillkoren ut varandra och nästan inget flöde sker mellan lagren och det enda sättet för vattnet att ta sig ur modellen är genom dräneringen. Felet i vattenbalansen ligger även i detta fall kring $0,01\%$.

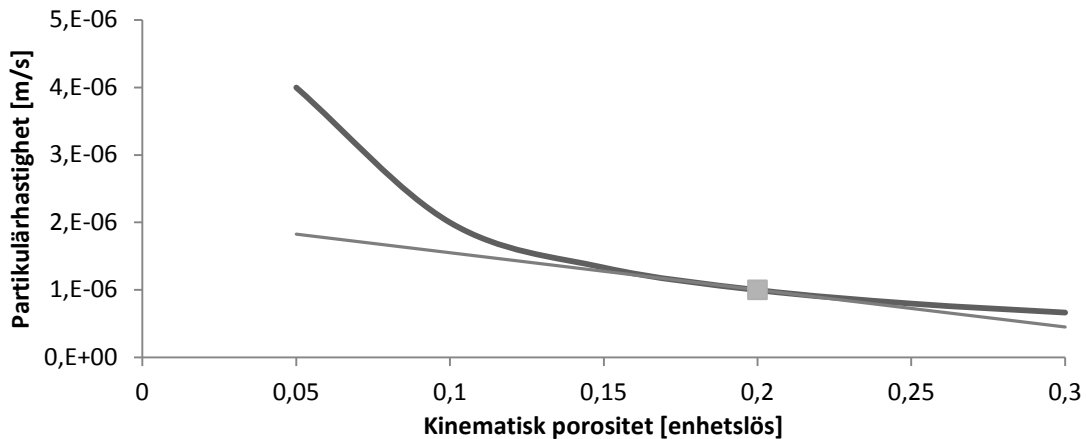
5.2.3 Advektion

Advektionen beror på flödes hastigheten i grundvattnet och med de valda parametrarna beräknades den partikulära grundvattenhastigheten i det översta lagret i flödesriktningen med ekvation 19 till 10^{-6} m/s.

Valet av värdet på parametrarna för kinematisk porositet och hydraulisk gradient, vilka är desamma för alla lagren. Förändring bland dessa parametrar kommer ge olika stora effekter på partikelhastigheten och så även plymens utbredning. Konduktiviteten kan förändras med ett antal potenser, medan den kinematiska porositeten realistiskt sett kommer förändras ytterst lite. Detta ger olika känsligheter för partikelhastigheten och utbredningen då dessa tre variabler förändras inom rimliga gränser.

Analys av ekvation 19 med avseende på de olika variablerna ger att gradienten och konduktiviteten är linjärt proportionella mot hastigheten, vilket ger en derivata på 0,1 för

konduktiviteten ($v=0,1K$) och $5 \cdot 10^{-5}$ [m/s] för hydrauliska gradienten. Kinematiska porositeten ger däremot en avtagande kurva (se figur 23), men om en linjär approximation ansätts i punkten 0,2 ger detta en lutning på $-5 \cdot 10^{-6}$ [m/s]. Kring ett värde på 0,2 betar sig funktionen nästan linjärt och en linjär approximation ansätts. Det bör observeras att det är kinematisk porositet och inte porositet som används, där den kinematiska porositeten är satt till hälften av porositeten.

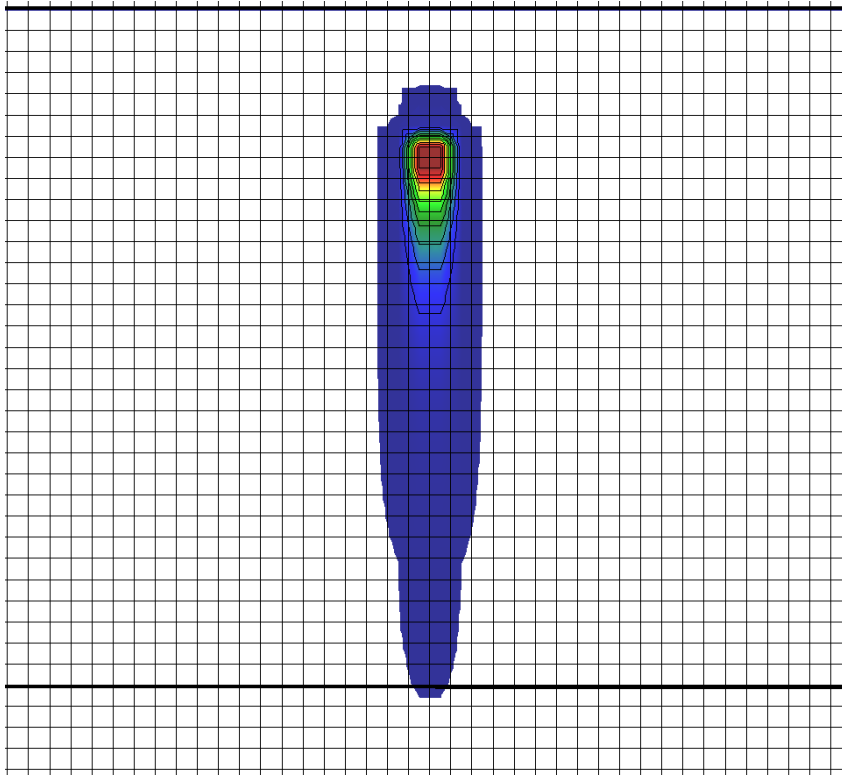


Figur 23. Förhållande mellan kinematisk porositet och partikulärhastighet. Fyrkanten utmärker det initiala standardvärdet och den tunna linjen är den approximation som görs av lutningen.

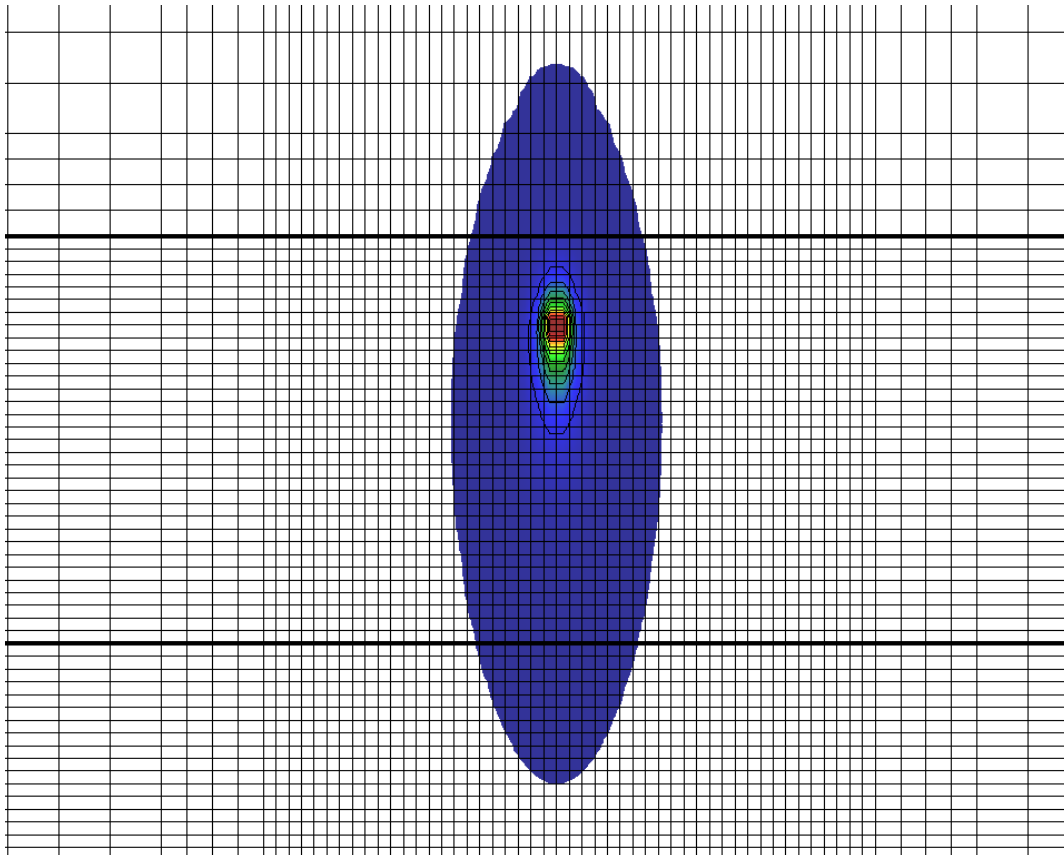
I modellen är både den kinematiska porositeten och gradienten konstanta i alla lager vilket gör att flödes hastigheten är 10 % av konduktiviteten för varje lager. Om hydrauliska gradienten hade satts till 0,03 som i Naturvårdsverkets riktvärdesmodell hade flödes hastigheten ökat från $1 \cdot 10^{-6}$ till $1,5 \cdot 10^{-6}$ m/s, vilket är en 50 % ökning. Däremot om ett lagrets konduktivitet förändras, t.ex. lager 1 ansätts till sand och ett $K=10^{-3}$ m/s, blir flödes hastigheten 10^{-4} m/s, hundra gånger större, en ökning vilken inte är möjlig för varken hydrauliska gradienten eller den kinematiska porositeten.

5.2.4 Dispersion

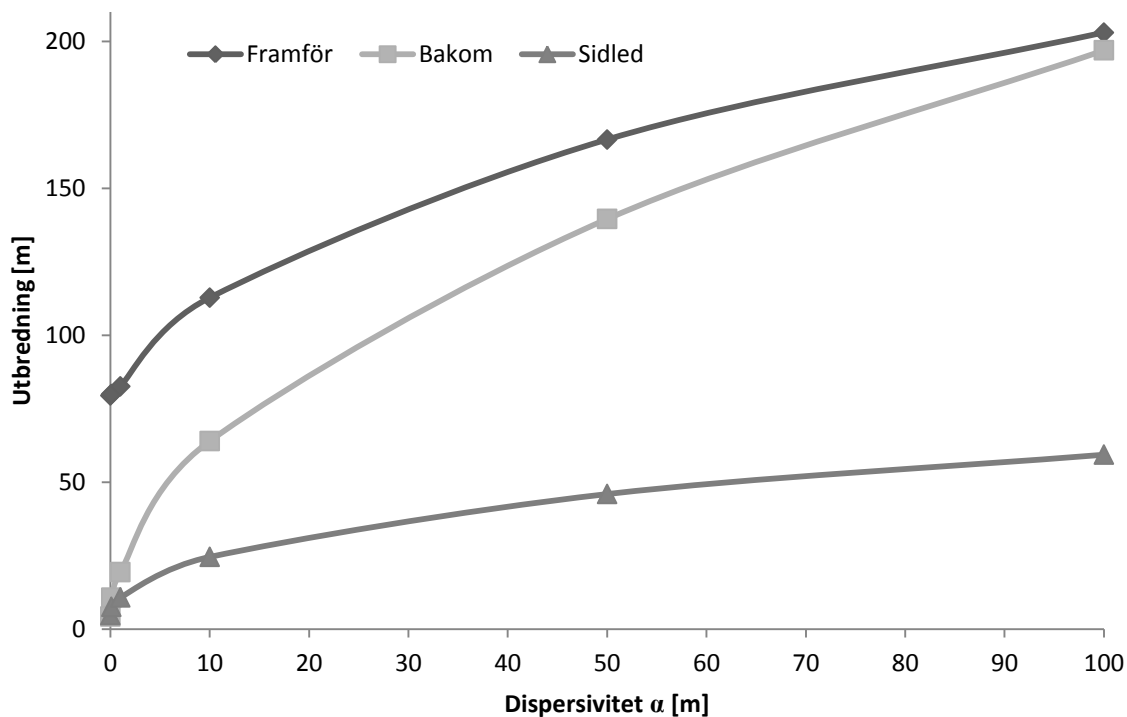
Förändring av dispersionen ger stor påverkan på förorenings spridning, framför allt på den yttre gränsen av plymen, men även på hur långt höga halter kan transporteras (se figur 24 & 25). I det generella fallet finns inget transversellt flöde, i x-led i modellen, utan all spridning i transversell riktning beror på dispersionen. Utöver detta sker spridningen i motsatt riktning mot vattenflödet (se figur 25 & 26). Detta beror på att implementeringen av mekanisk dispersion i MT3DMS sker som kemisk dispersion (Zheng & Wang, 1999), med flöde vinkelrätt mot gradienten.



Figur 24. Bensen med 0,1 m i dispersivitet och generella värdena på de andra variablerna. Varje cell är 6,25 m i x- och y-led och mellan de två kraftiga linjerna är det 100 m. Färgen beskriver halt, röd hög halt, blå låg halt.

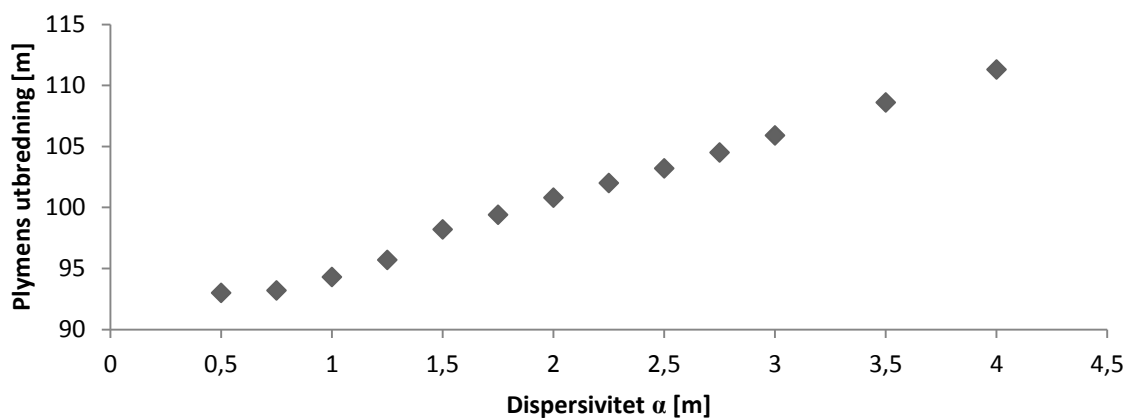


Figur 25. Bensen med 10 m i dispersivitet och generella värdena på de andra variablerna. Varje cell är 6,25 m i x- och y-led, mellan de två kraftiga linjerna är det 100 m. Färgen beskriver halt, röd hög halt, blå låg halt.



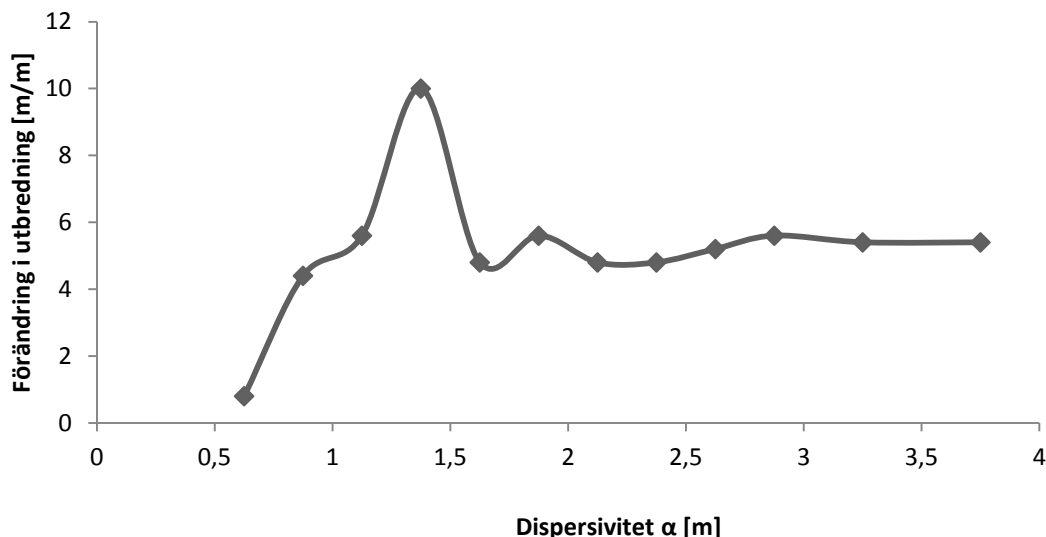
Figur 26. Utbredning bakåt, framåt och sidleds av föroreningskällan beroende på olika dispersiviteter (se appendix för data punkterna).

Vid höga värden på dispersiviteten bli utbredningen framför och bakom föroreningspunkten nästan lika stor och dispersionen är den dominerade processen för föroreningstransporten. Det är även dispersionen som bidrar till en utbredning i sidled. Vid små värden på dispersiviteten ger en ändring i dispersivitet stor påverkan på föroreningens utbredning medan vid stora värden på dispersivitet ger samma ändring en mindre påverkan. Vid en närmare analys runt det valda värdet på dispersivitet i longitudinell riktning (2 m) varierar föroreningutbredningen mycket även vid mycket små förändringar i dispersiviteten (se figur 27).



Figur 27. Utbredning framför föroreningskällan (longitudinell) för olika värden på dispersivitet.

Om lutningen (derivatan av plymutbredningen m.a.p. dispersiviteten) studeras syns det tydligare att förändringen och således känsligheten snabbt förändras för små värden på dispersionen (se figur 28), för att sedan plana ut och lägga sig på en relativt konstant nivå. Det bör tilläggas att toppen som ses mellan 1 och 1,5 är oförklarad och troligen osannolik.



Figur 28. Känslighetsanalys av låga värden på dispersivitet, d.v.s. derivatan av kurvan ”Framför” i figur 26.

5.2.5 Sorption

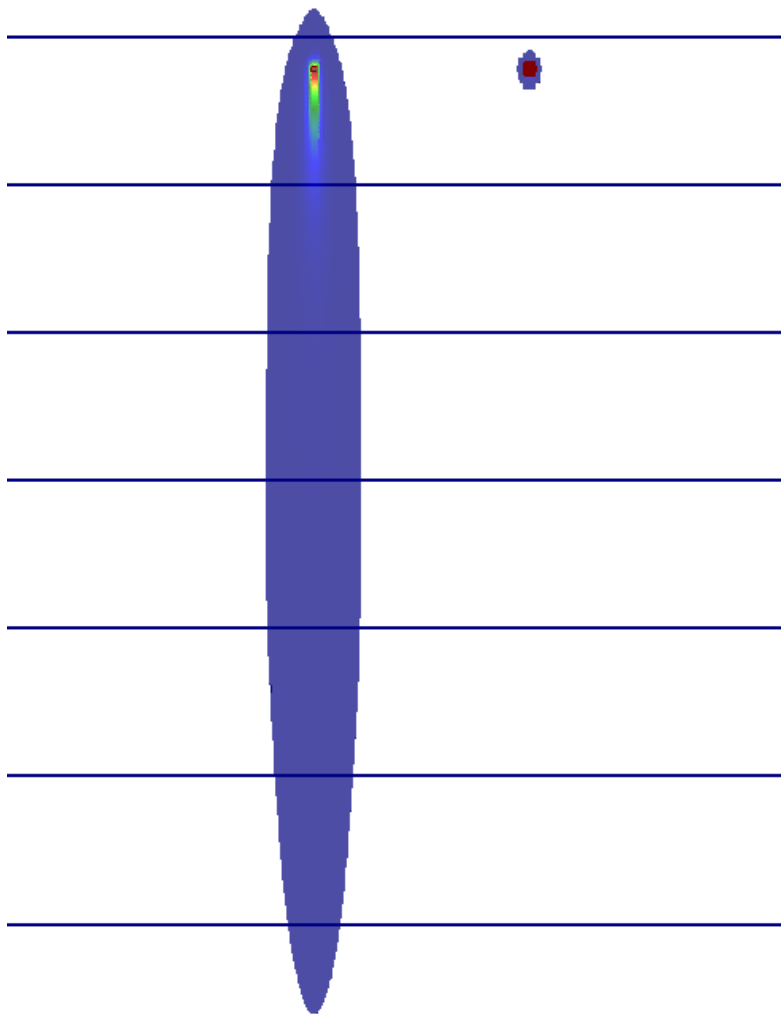
Sorptionen är den dominerande fördröjningsfaktorn för ämnen som inte bryts ner. Många gånger kan denna process bortses ifrån för ämnen så som bensen och PCE som har mycket låga K_d -värden. Skillnaden mellan att ha eller inte ha med sorption i dessa fall blir inte så stor (se tabell 11) förändringen i plymens utbredning minskar endast med 11 % vid tillägg av sorption. Däremot ger avlägsnandet av sorptionen vid modellering av arsenik stor skillnad (se tabell 12 & figur 29).

Tabell 11. Skillnaden i utbredning vid eller saknad av sorption för bensen. Observera enheten på sorption.

| Sorption [L/mg] | Utbredning framför [m] | Utbredning bakom [m] | Utbredning sidled [m] |
|---------------------|------------------------|----------------------|-----------------------|
| 0 | 97,8 | 28 | 13,7 |
| $1,5 \cdot 10^{-6}$ | 88,1 | 27,9 | 13,6 |
| Skillnad [%] | 11,01 | 0,36 | 0,74 |

Tabell 12. Skillnaden i utbredning av arsenik för olika värden på sorption. Observera enheten på sorption

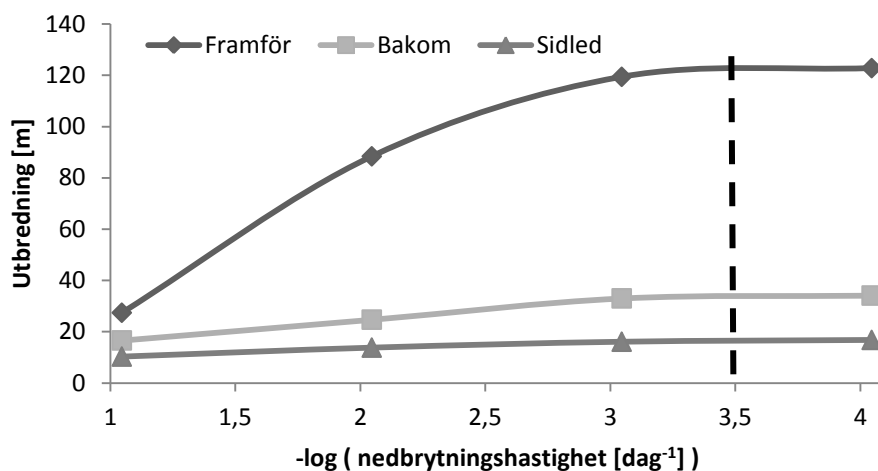
| Sorption [L/mg] | Utbredning framför [m] | Utbredning bakom [m] | Utbredning sidled [m] |
|-------------------------|------------------------|----------------------|-----------------------|
| a | 0 | 639 | 41,2 |
| b | 0,00003 | 29,3 | 20,1 |
| c | 0,0003 | 14,5 | 12,6 |
| d | 0,003 | 10,5 | 8,6 |
| Skillnad c/a [%] | 2,27 | 30,58 | 42,56 |



Figur 29. Plymens utseende för arsenik efter 20 år med och utan sorption. Sträckan mellan två linjer är 100 meter. Den vänstra plymen har ingen sorption, den högra har ett värde på 0,0003 [L/mg]

5.2.6 Nedbrytning

Nedbrytningen dämpar utbredningen och störst förändring av koncentrationen genom nedbrytning sker framför föroreningskällan. Vid mycket kraftig nedbrytning blir utbredningen som väntat liten. Vid låga värden på nedbrytning går plymens utbredning mot densamma som vid avsaknad av nedbrytning. Redan vid värden på $0,0001 \text{ dag}^{-1}$ är nedbrytningens påverkan nästan borta (se figur 30).

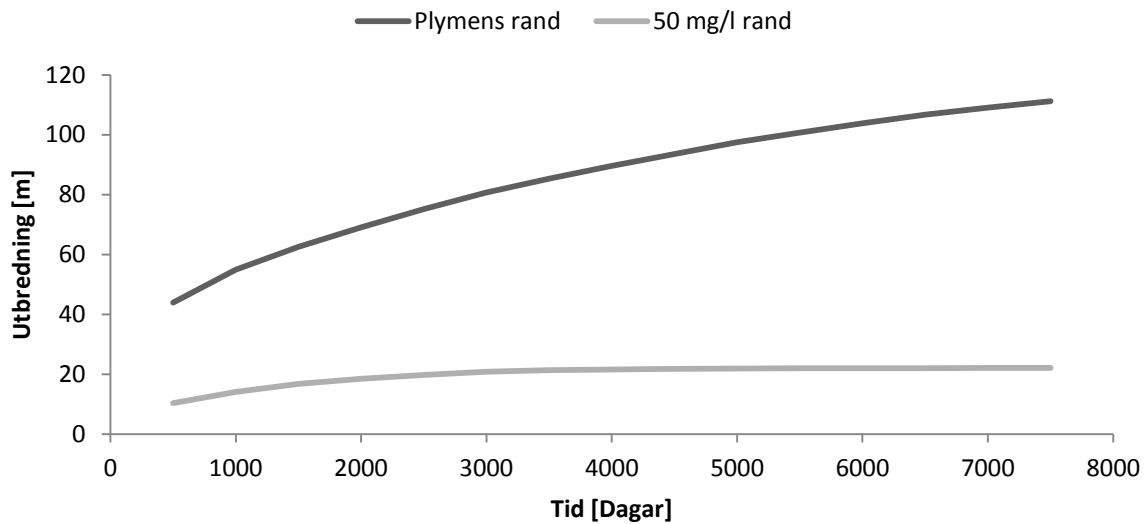


Figur 30. Plymens utbredning vid olika nedbrytningshastigheter. Observera skalan på x-axeln. Efter den streckade linjen planar utbredningen ut och nedbrytningsens påverkan är nästan borta. Modellen är körd i 7300 dagar.

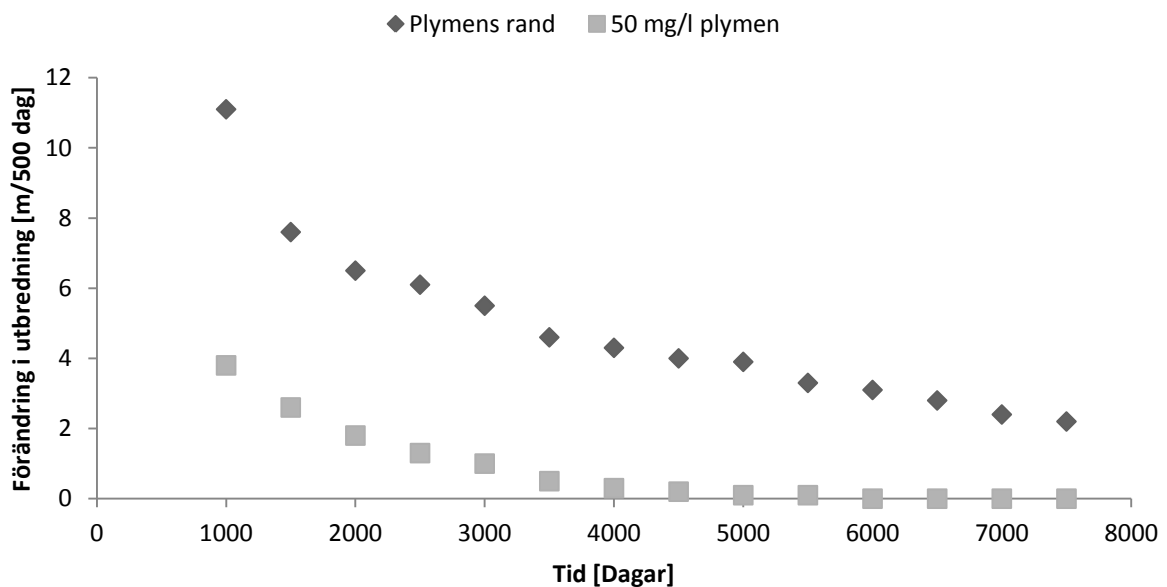
Vid analys av de ekvationer som styr nedbrytningen (se avsnitt 3.4) fås ungefär samma resultat, dvs. vid värden på $0,0001 \text{ dag}^{-1}$ bryts enbart ett par promille ner i varje tidssteg och effekten blir således försumbar.

5.3 Utbredningshastighet

I ESM-modellen antas grundvattenströmningen vara tidsberoende dvs. MODFLOW körs som "steady-state" men föroreningsspridningen i MT3DMS är tidsberoende. Plymens utbredningshastighet fås genom att studera utbredningen vid olika tidssteg. Utbredningen från den kontinuerliga källan ökar långsammare med tiden (se figur 31) det vill säga utbredningshastigheten avtar (se figur 32). Hastigheten med vilket detta sker beror på vilken koncentrationskontur som studeras.

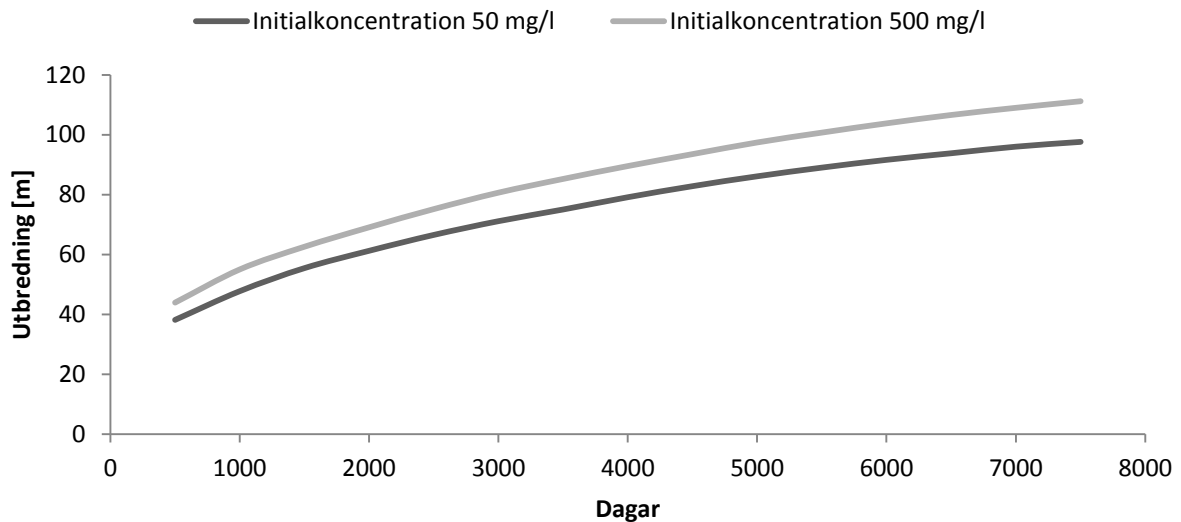


Figur 31. Plymens utbredning framåt och 50 mg/L konturens utbredning. Bensen, initial koncentration 500 mg/L.



Figur 32. Förändring av bensenplymens utbredning mellan två tidsperioder på 500 dagar. Plymens utbredning framåt, 50 mg/L konturens utbredning. Bensen, initial koncentration 500 mg/L.

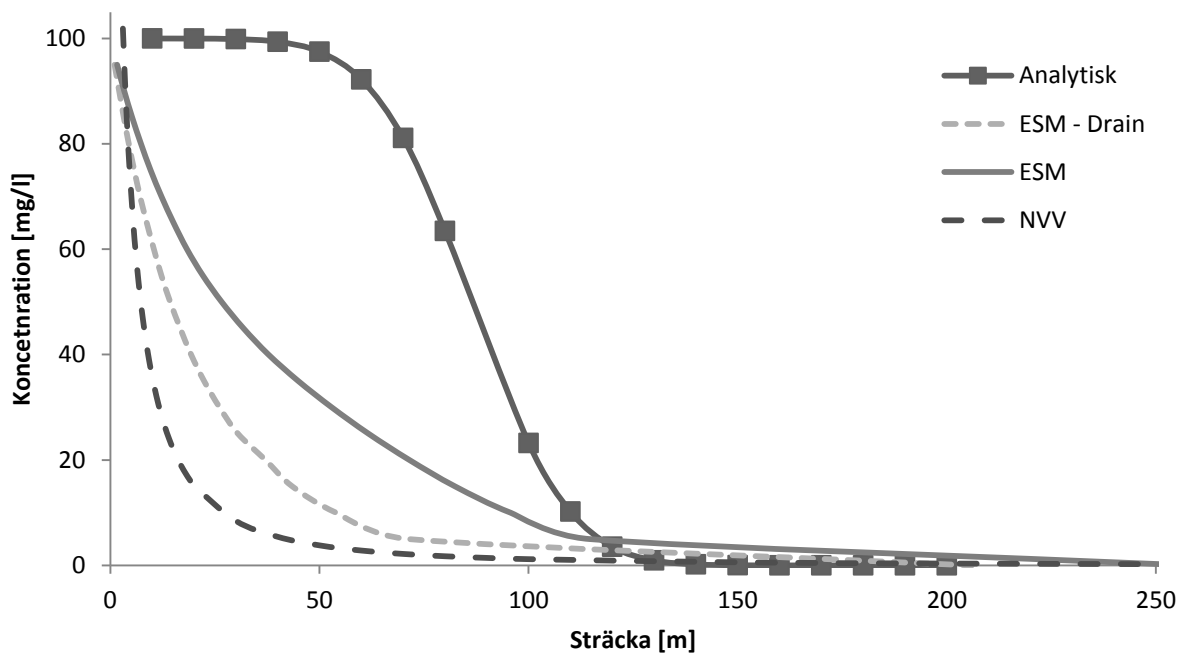
Utbredningshastigheten är även beroende av de olika kemiska och hydrologiska parametrarna. Arsenik som har högre sorption breder ut sig mycket långsammare än bensen. Även initialkoncentrationen har en viss betydelse för utbredningen (se figur 33).



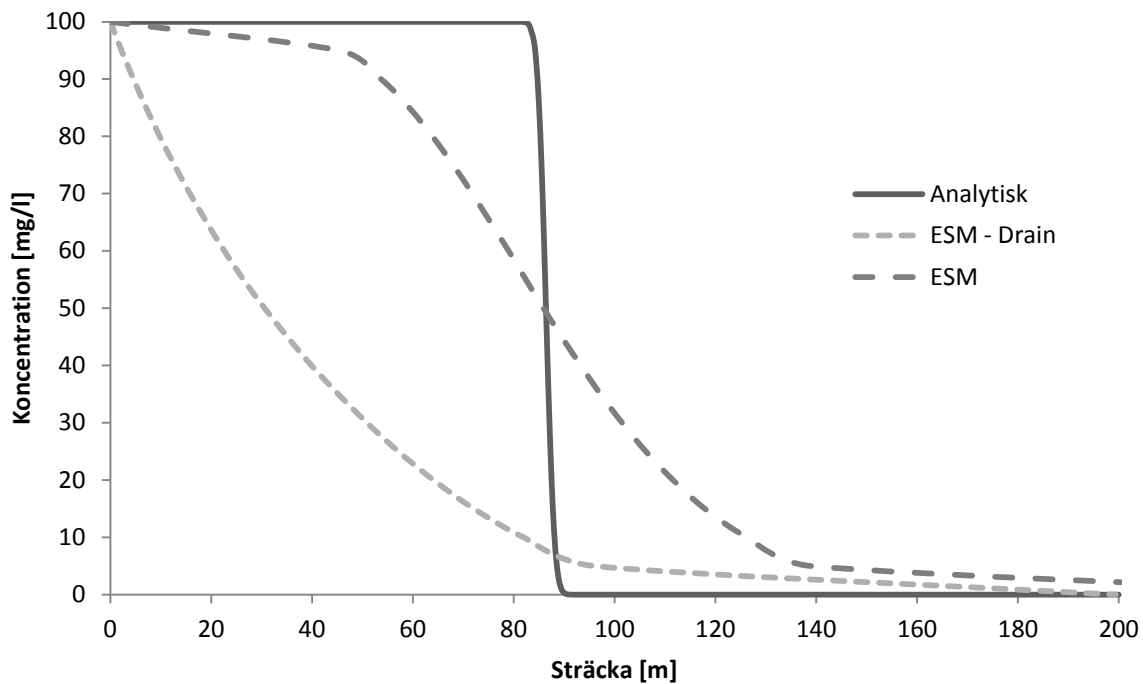
Figur 33. Plymens utbredning för bensen vid olika initialkoncentrationer.

5.4 Generell jämförelse

Vid samma förutsättningar bör ESM-modellens resultat sammanfalla eller vara snarlikt med en analytisk lösning. Om enbart advektion och dispersion används skiljer sig resultatet markant (se figur 34 & 35), där ESM med eller utan dränering och infiltration ger en mycket lägre halt i plymen. Naturvårdsverkets riktvärdesmodell är inte tidsberoende eller uppsatt utifrån samma förutsättningar. Detta gör att en direkt jämförelse inte är möjlig. Däremot visar detta vilka stora skillnader det kan bli mellan riktvärdesmodellen mot ESM och de analytiska lösningarna då tidsaspekten oftast är viktig.

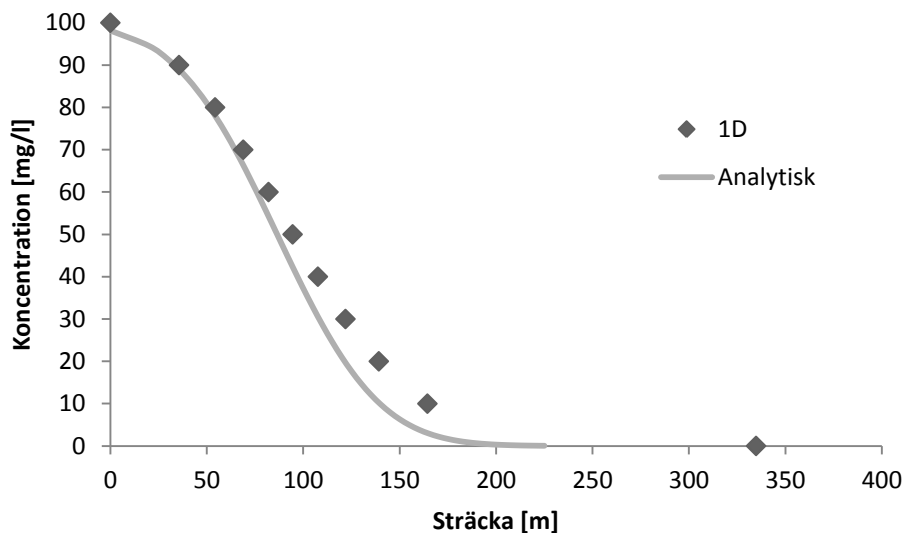


Figur 34. Jämförelse mellan den analytiska lösningen (ekvation 4), ESM efter 1000 dagar med 2 meter i dispersivitet. Naturvårdsverkets riktvärdesmodell (NVV) är tidsberoende.



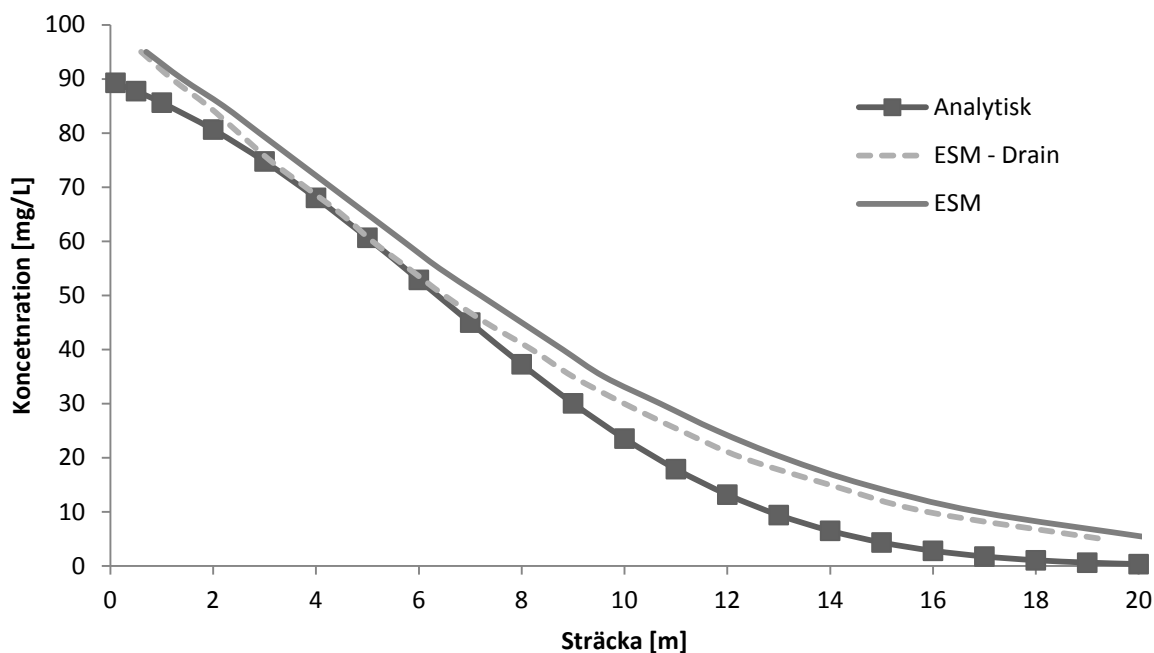
Figur 35. Jämförelse mellan den analytiska lösningen (ekvation 4) och ESM, 1000 dagar med 0,01 meter i dispersivitet.

Om en modell med samma förutsättningar som ESM sätts upp med enbart ett lager och en rad och samma jämförelse görs överensstämmer resultatet mycket bättre (se figur 36). Detta är ett försök att modellera en dimension i en 3D modell för att försöka efterlikna den analytiska lösningen så bra det går.



Figur 36. En "1D" MODFLOW modell men enbart en rad och ett lager i jämförelse med den analytiska lösningen.

Om sorption adderas (se ekvation 5 i avsnitt 3.1) ger det mycket bättre överstämmelse mellan ESM och den analytiska lösningen (se figur 37), i jämförelsen användes PCE. Det bör även observeras att skillnaden mellan att använda drain-modulen och att inte använda den i detta fall är ytterst liten.



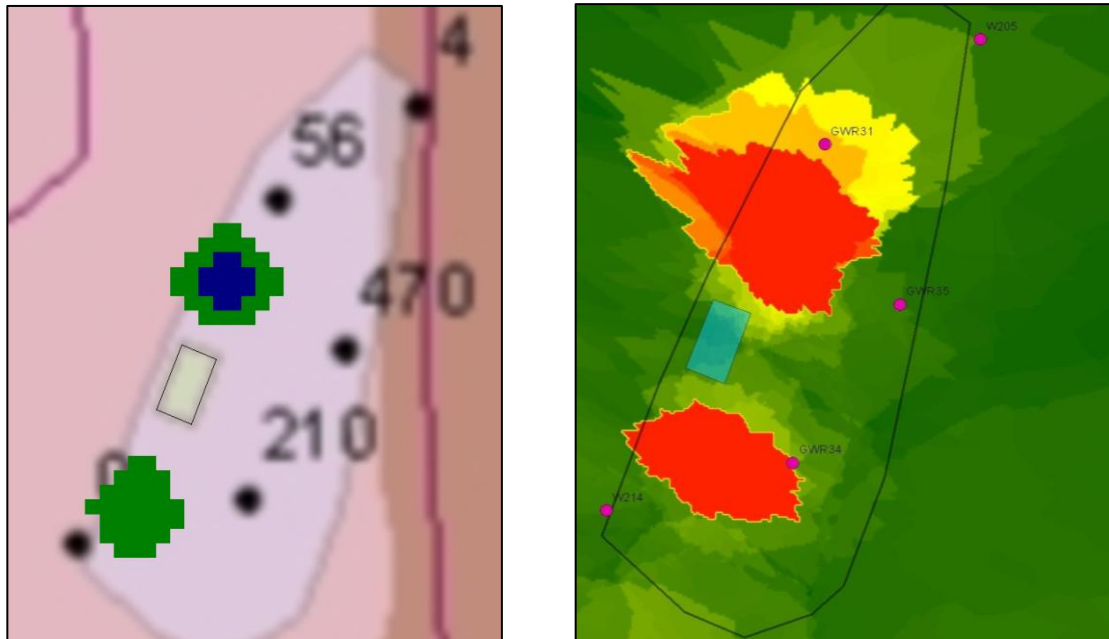
Figur 37. Jämförelse mellan den analytiska lösningen med sorption och ESM efter 1000 dagar med 2 m i dispersivitet och sorption på 1,48 L/kg.

5.5 Jämförelse med utvalda uppdrag

För anpassning av ESM har data som presenterats tidigare under avsnittet 4.1 använts. Så långt som möjligt har digitaliserad data använts och när data saknats har uppskattningar gjorts. Resultatet av jämförelserna visar att det finns ett antal svårigheter med framför allt implementeringen av föroreningen och tidsaspekten. Det har inte praktiskt gått att genomföra steg 3 som beskrivits tidigare (se avsnitt 2.4), utan enbart steg 1 och 2 har genomförts.

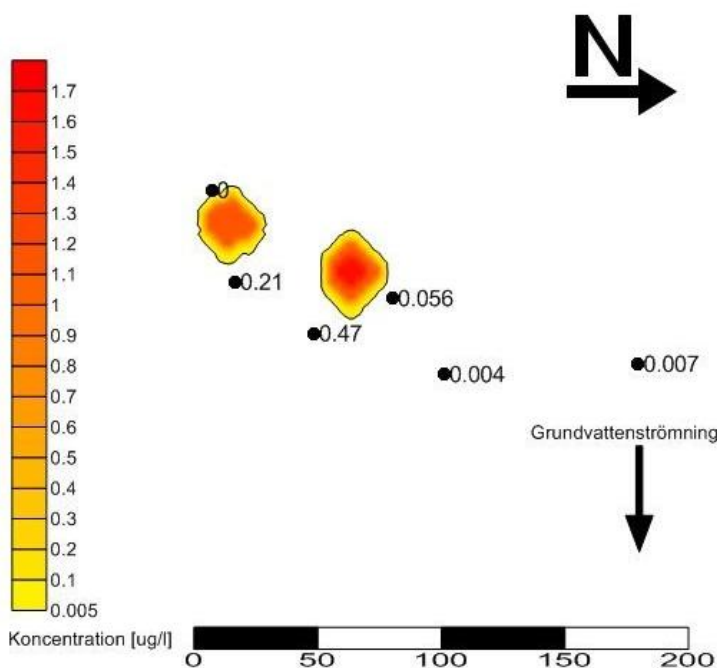
5.5.1 Boxholm

Föroreningen implementerades som konstant koncentration framför och bakom impregneringsplatsen, där värdet i marken omräknades till en halt i grundvattnet med hjälp av fördelningskoefficienten för arsenik. Detta gav en implementerad koncentration på 1,1 och 1,6 mg/L (se figur 38).



Figur 38. Boxholm, implementering av arsenikkoncentrationer framför och bakom impregneringshus. Grön=1,1 mg/L, blå=1,6 mg/L, jämför med figur 8 från avsnitt 4.1.

Modellen kördes i 11 000 dagar, vilket motsvarar ungefär 30 år. Detta är tiden från slutet av impregneringsverksamheten till år 2005 då prover togs och platsen undersöktes. Resultaten från de två första stegen av anpassning av ESM (se avsnitt 2.4) gav båda samma resultat (se figur 39). Första steget är en mer generell beskrivning av området och det andra steget är en mer platspecifik beskrivning av området. Inget av resultaten kan förklara halterna i grundvattnet i de fem mätpunkterna, föroreningen kommer inte ens fram till provpunkterna.



Figur 39. Boxholm, modellerad halt av arsenik i grundvattnet vid impregneringsanläggningen 30 års körtid, anpassningssteg nr 1. Ytterkanten motsvarar 5 µg/L vilket är riktvärdet för arsenik i vatten. Observera att figuren är vriden 90 grader.

Resultatet av modelleringen blir således att arseniken varken sprids till dricksvattenbrunnarna eller till Svartån (se figur 7 i avsnitt 4.1.1). Det bör noteras att de två dränerande diken som kraftigt dränerar området inte lagts in i modellen. Om modellen körs med ett sorptionsvärde på 30 L/kg istället för 300 L/kg rör sig plymen aningen mer, men generellt påverkas inte resultatet.

Om Naturvårdsverkets riktvärdesmodell för spridning i grundvatten sätts upp och en utspädningsfaktor beräknas skulle det på 150 meters avstånd från föroreningen, vilket dricksvattenbrunnarna ligger på, ge en halt på 27 µg/L. Detta är klart högre än de uppmätta halterna i brunnarna (se tabell 13).

Tabell 13. Sammanställning av beräknade och uppmätta halter i den förorenade dricksvattenbrunnen cirka 150 meter öster om Boxholms sågverk.

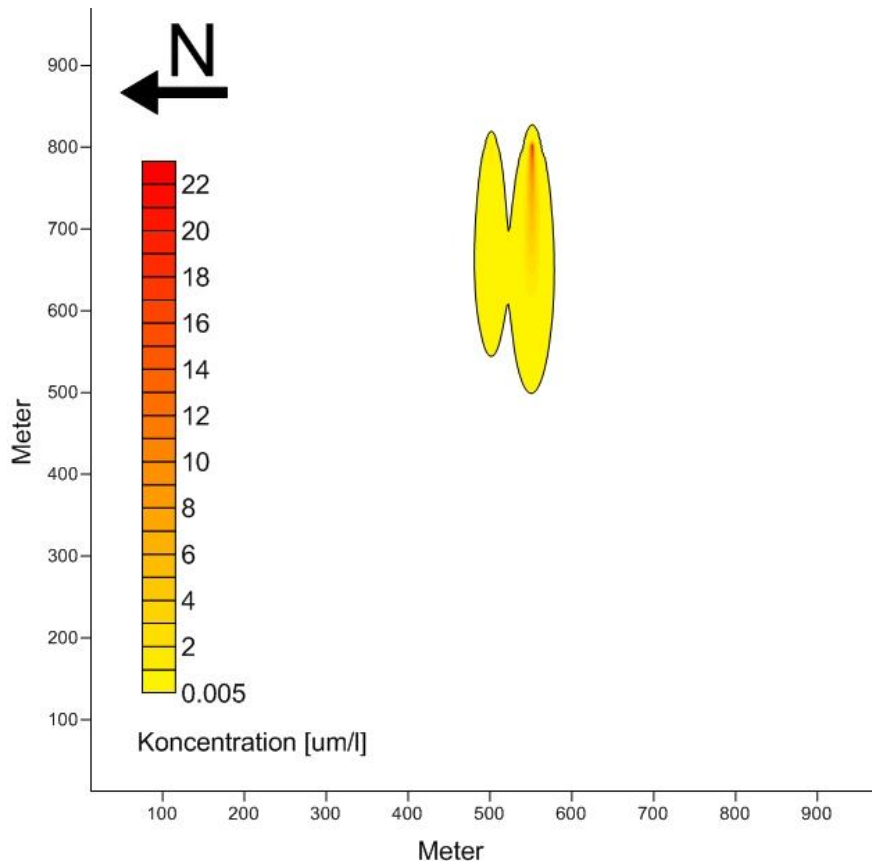
| Arsenik | Koncentration [µg/L] |
|--------------------------|-----------------------------|
| Uppmätt (två tillfällen) | 8,8 och 7,1 |
| NVV | 27 |
| ESM – steg 1 + 2 | 0 |
| Riktvärde | 5 |

5.5.2 Holms

Vid kemptvätten finns två distinkta källor; en söder och en norr om byggnaden. Den ursprungliga källans halt är okänd så föroreningen implementerades efter samma halt som uppmäts i brunnen närmast källan, vilket motsvarar 2 respektive 24 mg/L. Vid avsaknad av digitaliserade rådata genomfördes enbart en jämförelse mellan plymens utbredning efter 20 och 30 år (se figur 40). Resultatet blev en ganska god överensstämmelse vid steg 1, men resultatet drev iväg vid steg 2, som motsvarar en mer platsspecifik beskrivning av jordlagerföljden (se tabell 14).

Tabell 14. Holms, modellerad utbredning i meter efter 20 och 30 år med och utan dränering (D) och infiltration (I).

| Steg 1 | Initial halt [mg/L] | Uppskattad utbredning [m] 30 år | 20 år D+I | 30 år D+I | 20 år | 30 år |
|---------------|----------------------------|--|----------------------|----------------------|--------------|--------------|
| Källa Nord | 2 | 50 | 44 | 54 | 47 | 60 |
| Källa Syd | 24 | 100 | 54 | 66 | 56 | 71 |
| Steg 2 | | | | | | |
| Källa Nord | 2 | 50 | 260 | 340 | 320 | 420 |
| Källa Syd | 24 | 100 | 300 | 400 | 380 | 510 |

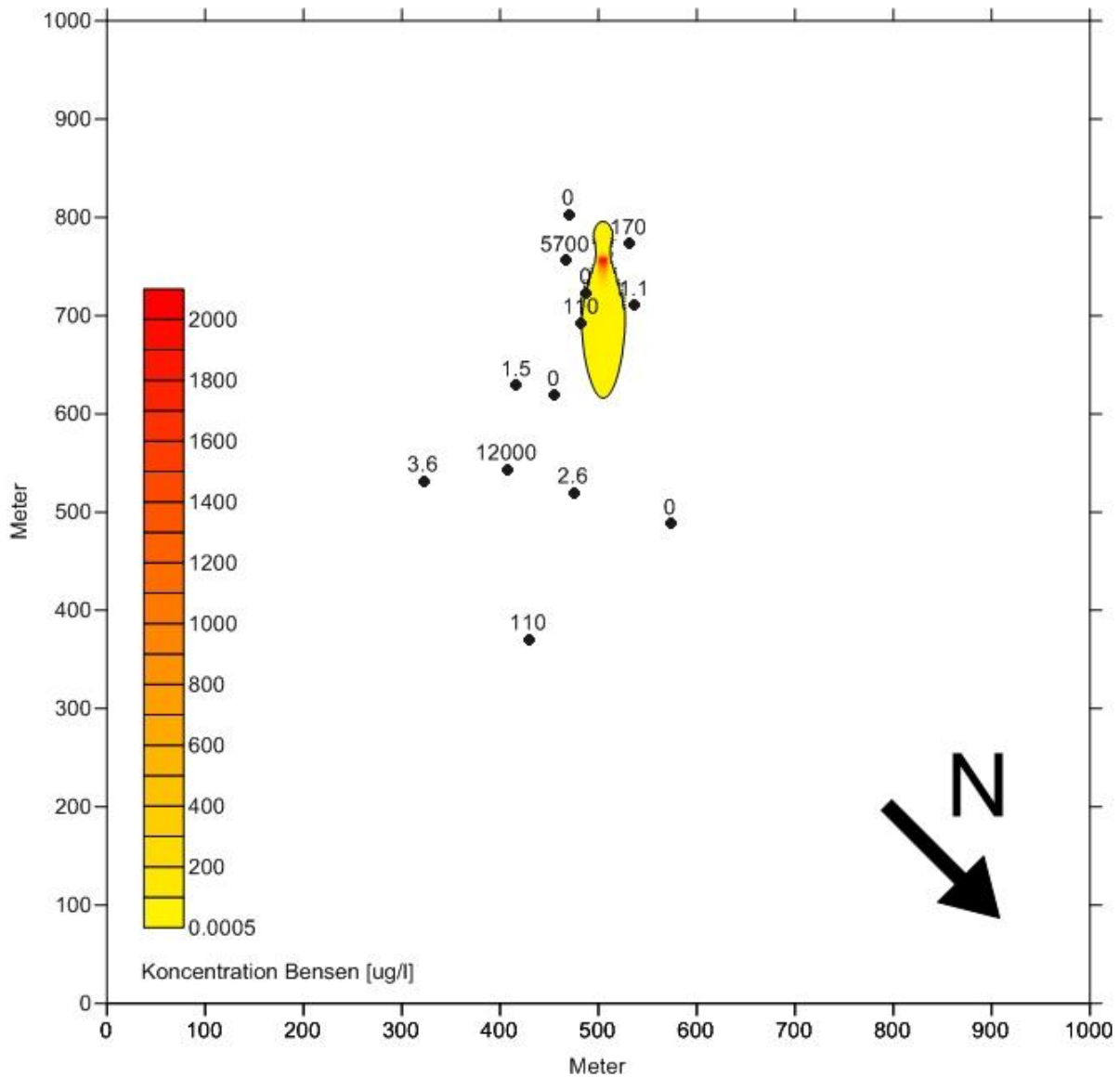


Figur 40. Holms, spridning av PCE efter 20 år med dränering och infiltration, steg 2.

Det finns samtidigt osäkerheter i tolkningen av utbredningen ("uppskattad utbredning"). Detta då plymens utbredning har passerat de sista brunnarna och PCE teoretiskt skulle kunna transporteras längre än de 50 och 100 meter som är angivna som "verklig" utbredning.

5.5.3 Estländaren

Föroreningen är implementerad som en konstant koncentration vid den bedömda placeringen av den läckande bensintanken. Här sätts koncentrationen till den maximala halten bensen som kan lösas i vatten, 1,8 g/L (Domenico & Schwartz, 1990), då det fanns en mycket stor mängd bensen i fri fas som konstant kan bidra till förorening i grundvattnet. Samtidigt ska det påvisas att detta värde med största sannolikhet är överskattat. Det antas att det är fri bensen som är källan men egentligen är bensen en fraktion i bensinen. Halten tilläts vara densamma under hela tidsperioden då fri fas fortfarande fanns när mätningarna genomfördes. ESM kan inte förutse halterna i grundvattenrören. Föroreningen når enbart ett rör, men där är ingen bensenhalt uppmätt (se figur 41). Modellen ger heller ingen bra bild av plymens utbredning (se tabell 15), den är dock aningen bättre än uppskattningen av halterna. Med Naturvårdsverkets riktvärdesmodell beräknades avståndet från källan till halten 0,5 µg/L.

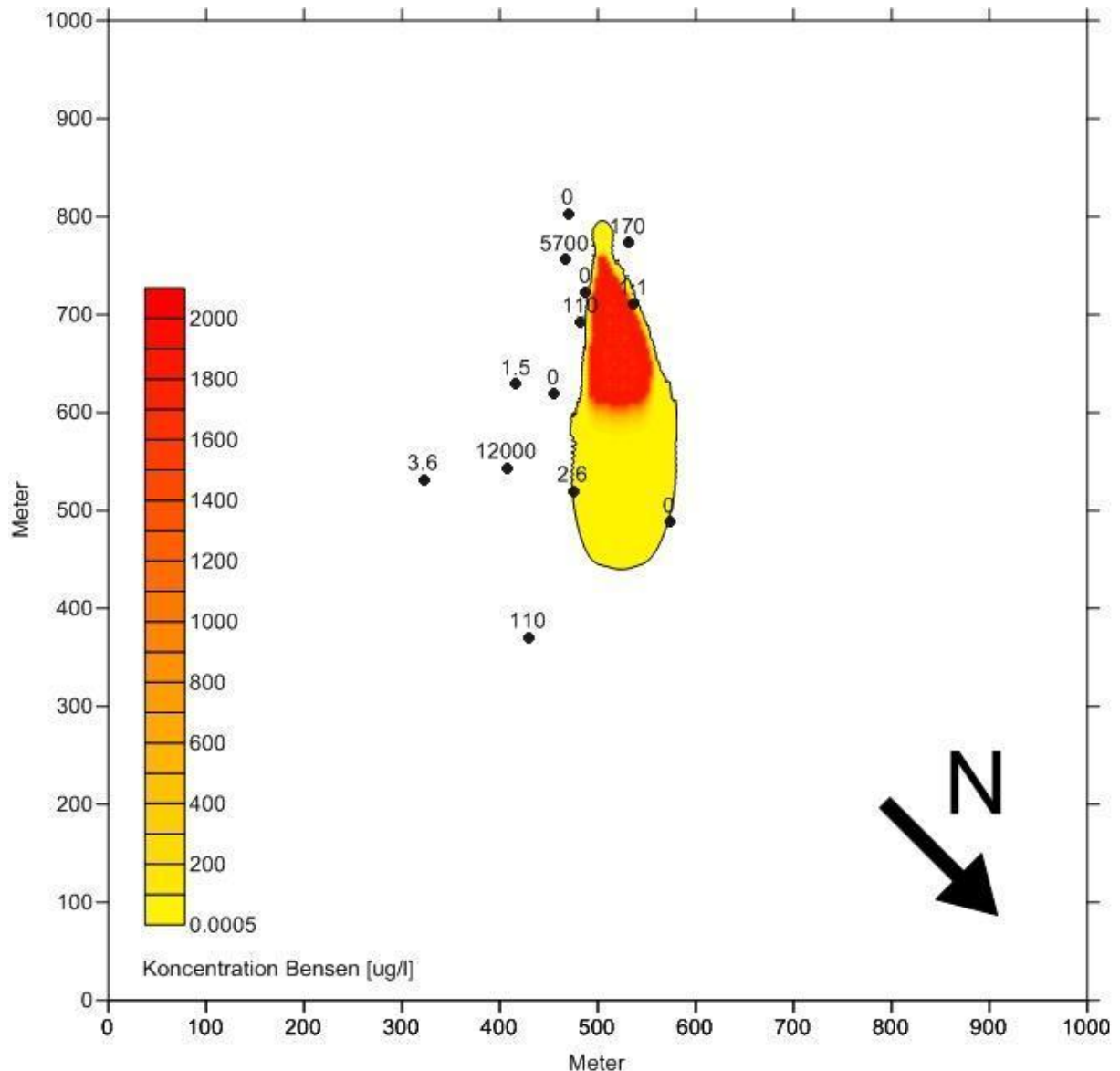


Figur 41. Estländaren, spridningen av bensen efter 40 år utan dränering och infiltration, observera nordpilens riktning.

Tabell 15. Estländaren, plymens utbredning i meter med och utan dränering (D) och infiltration (I), ESM är körd i 40 år.

| Steg | 1 D+I | 1 | 2 D+I | 2 | Uppskattad längd | NVV |
|------------------------|-------|-----|-------|-----|------------------|-----|
| Plymens utbredning [m] | 142 | 162 | - | 140 | 400 | 900 |

Då resultatet var långt ifrån de uppmätta värdena, om än bättre än Naturvårdsverkets, testades även att implementera föroreningen som en plym för att försöka att efterlikna den fria fasens rörelse och påverkan. Den fria fasen uppskattades ha en spridning på 150 meter (se avsnitt 4.1.2) Med en föroreningskälla i grundvattnet över hela den sträckan blev resultatet att bensenplymen spreds 320 meter från källan (se figur 42). Detta tar däremot inte hänsyn till att den fria fasen har rört sig vidare under åren som gått efter 1972 då den fria fasen bedömdes. Det visar dock att med en bättre implementering av föroreningskällan kan resultatet förbättras markant.



Figur 42. Estländaren, spridningen av bensen efter 40 år utan dränering och infiltration. Föroreningskällan implementerades som en 150 meters plym, se Figur 9 i avsnitt 4.1.2. Observera norrpilens riktning.

6 Diskussion

Det finns många olika aspekter att diskutera och fundera på gällande resultaten. De viktigaste delarna är val av konceptualiseringen, valet av parametervärden och deras inverkan på modellen. Vidare är resultaten av jämförelsen mellan ESM och den analytiska modellen, Naturvårdsverkets riktvärdesmodell och de utvalda uppdragen viktiga att analysera och att slutligen titta på användbarheten för ESM.

6.1 Konceptualiseringen

Det finns vissa fördelar men även vissa problem med valet av konceptualiseringen. Valet att göra ESM så pass stor som $1 \cdot 1 \text{ km}^2$ gör att det realistiskt sett är svårt att finna en plats med en sluttning av modellens längd (1 kilometer) och med en konstant grundvattengradient på 2 %, vilket i sin tur gör att modellen är aningen oralistisk. Samtidigt är den hydrauliska gradienten den viktiga och sluttningen är skapad för att få den önskade gradienten och sluttningen i sig

själv är inte målet. Tanken är att tolka konceptualiseringen genom att ta det intressanta området och sedan dra ut kanterna samt behålla de egenskaper som finns i det mindre området så att hela modellen har samma egenskaper som det området som är av intresse.

Randen i ESM är inte placerad på en grundvattendelare utan modellen ligger snarare ”mitt i” ett avrinningsområde. Tanken är att modellen är så pass långt ifrån kanten på avrinningsområdet att det kommer in en avsevärd mängd grundvatten i modellen. Genom att sätta konstant tryckpotential i både övre och undre kanten i ESM tvingas modellen artificiellt att generera en hydraulisk gradient på 2 %. Samtidigt använder Naturvårdsverkets modell samma antagande, med en konstant gradient. Naturvårdsverket varnar för att deras modell har svårt att hantera förorenings-spridning på ett längre avstånd både för saknad av nedbrytning, sorption och den konstanta gradienten (Naturvårdsverket, 2009). Motsvarande får troligen antas om ESM, att vid lång förorenings-spridning bör resultatet tolkas med extra försiktighet på grund av den konstanta hydrauliska gradienten.

På samma sätt måste en generell dränering adderas för att ta hand om överflödet av vattnet som blir på grund av den höga grundvattenbildningen. Ett annat sätt vore att kalibrera in grundvattenbildningen för att på så sätt inte behöva använda den generella dräneringen. Det är dock enklare att använda dränering för lösa problemet med överskottsvatten. Det går att argumentera för att dränering och infiltration är överflödiga då de för det första tar ut varandra i vattenbalansen och för det andra inte tillför modellen något då det går att få en konstant gradient på 2 % enbart med de två andra randvillkoren. Det som däremot gör det relevant att använda dräneringen är att det nästan alltid förekommer någon typ av dränering i ett område, såväl i urban miljö som i skogsmarker.

En stor fördel med att ändå använda både infiltration och dränering är vid modifikation av ESM-modellen. Om ett grundvattenuttag adderas till modellen, t.ex. en dricksvattentäkt, kommer brunnens uttag att ge en sänkning av grundvattenytan. Denna sänkning kommer att överskattas om infiltrationen är satt till ett lågt värde vid avsaknaden av dränering. Då brunnen börjar pumpas ur sjunker grundvattennivån och infiltration ökar, bland annat genom att tidigare ytavrinning nu infiltrerar. Genom att låta dräneringen justera infiltrationen kommer mer vatten kunna infiltrera då grundvattennivån sjunker under dräneringsnivån och infiltrationen i modellen kan sättas till ett värde som motsvarar grundvattenbildningen i området. På detta sätt kommer dräneringen och den stora infiltrationen hantera de nya förutsättningarna utan att infiltrationen behöver kalibreras om.

Ett alternativ är att försöka återskapa en mer naturlig konceptualisering genom att låta övre kanten i ESM vara en grundvattendelare och låta infiltrationen styra grundvattenflödet och således bestämma gradienten. Problemet med detta är att det blir mycket svårare att analysera resultatet. Det kommer då vara mycket avgörande var i modellen föroreningen implementeras då gradienten varierar i y-led. Olika resultat erhålls om föroreningen läggs högt upp eller långt ner i modellen. Detta försvårar för användaren som då måste avgöra vilken hydraulisk gradient det finns just i det studerade området och sedan placera in föroreningen vid en lämplig punkt i modellen. Sedan måste förändringen av gradienten återspegla verkligheten och många gånger finns det inte tillräckligt med data för att få en bra bild över förändringen.

Med en konstant gradient behövs bara en uppfattning av den generella gradienten i området. Modellen anpassas efter detta och sedan blir placeringen av föroreningen i rummet nästan oväsentlig, så länge ett visst avstånd från randen hålls.

Effekten av att använda dränering och infiltration varierar beroende på hur viktig advektionen är som process. I de sammanhang där advektionen är en dominant faktor ses en mer tydlig skillnad mellan att använda dränering och infiltration eller att bara låta övre/nedre randvillkor styra gradienten. Detta kan framför allt ses i jämförelserna med de två analytiska metoderna (se figur 34 & 35) Vid liten advektion blir då påverkan av dräneringen och infiltrationen mindre, vilket kan ses vid utvärderingen av randvillkoren (se figur 22) och den analytiska metoden med sorption (se figur 37). Generellt ter det sig som att dräneringen och infiltrationen har en utspädningseffekt på resultatet, mer vatten kommer in i modellen och sedan tas en större mängd ut, men det har inte gått att fastslå att det är vad som händer. Flödes hastigheten ökar inte vilket gör att advektionen inte borde öka, men samtidigt ses en förändring. Även om effekten kan konstateras och dess storlek kan avgöras i olika fall är orsaken till det hela inte utredd och därmed en källa till osäkerhet. Samtidigt är målet med arbetet en generell modell som kan täcka in många olika fall och vissa avgränsningar har varit nödvändiga att göra.

Sättet att använda maximal infiltration och dränera bort allt överflödigt vatten är inte en optimal lösning, men det är en lösning som i många fall används i branschen. Modellerare är medvetna om dräneringsmodulens brister men är i många fall tvungna att använda den ändå. Det finns i dagsläget inget bättre sätt att lösa problemet effektivt.

Valet gällande lagerföljden får ses som en kombination av vad som ofta förekommer och vad som är smidigt att använda. Vid enbart en öppen akvifer går det snabbt för användaren att förändra underliggande lager till berg och på så sätt enbart använda en akvifer. Samtidigt kan en användare snabbt förändra överliggande lager då den slutna akviferen är av intresse. Vidare är två lager berg praktiskt om en användare önskar att förbättra upplösningen av något annat lager. Resultatet får ses som en bra balansgång mellan verklighet och användarvänlighet, då det är viktigt att det är smidigt att förändra modellen.

Antagandet att sätta föroreningsplymens rand till de riktvärden som är satta för förorenat grundvatten av Naturvårdsverket får anses vara en bra metod. För det första är det konsekvent så att det alltid är samma värden som används. Vid halter under dessa riktvärden anses vattnet vara tjänligt och således inte förorenat. Gränsen går vid olika halter beroende på förorening och det är därför lämpligt att sätta olika gränser på plymens rand för olika ämnen. Men det bör noteras att randen för arsenik och bensen inte är direkt jämförbara överförbart i halt. Skulle arsenikranden sättas till samma värde som bensen skulle även arsenik ha spridits längre, vilket den egentligen även har gjort. Men den utökade spridningen som då ses är samtidigt under riktvärdet och anse därför inte vara en risk.

Slutligen går det att konstatera att även om många kraftiga förenklingar har gjorts är stora förenklingar vanligt förekommande inom branschen. Att ett helt område antas vara homogent är inte ovanligt då det sällan finns tillräckligt med data, kunskap och erfarenhet hos de som gör denna typ av modeller i Sverige (Brömssen, m.fl., 2006). Det är sällan en transient modell

byggs upp och oftast körs modellerna utefter ”worst-case” scenarion i steady-state. Enligt Brömssen m.fl. (2006) förs det sällan en diskussion eller görs en analys av de förenklingar som gjorts, förutom inom forskarvärlden.

6.2 Uppdragens inverkan

Det är en svår balansgång mellan att använda data från uppdragen för mycket i utformandet av ESM och att använda dem för lite. Målet har hela tiden varit en användbar modell som är användbar i fall som är återkommande och för att komma fram till detta har uppdragen används. Å andra sidan om för mycket data tas från dessa uppdrag blir modellen allt för platsspecifik och kan inte användas för andra projekt.

Uppdragen är använda som konkreta objekt för tankar runt konceptualiseringen, val av parametervärden och vad som faktiskt är problemet. Dessa har varit en bra bild på ett mål som annars är mycket abstrakt, exempelvis för att få en uppfattning om vad som egentligen är en ”standardmodell”. Så långt som möjligt har andra källor än uppdragen använts vid val av parametervärden och konceptualiseringen för att hålla modellen så generell som möjligt. När underlaget brister har det samtidigt varit mycket användbart att använda data från dessa uppdrag. Konkret visade det sig att det är svårt att finna en god generell beskrivning av jordlagerföljden, framför allt mäktigheten, vilket förvisso är väntat då denna är mycket heterogen och kan skilja sig kraftigt på korta sträckor. Valet att använda två akviferer anses vara en ganska bra anpassning och det förekommer oftast det ena eller det andra. Däremot är mäktigheterna mycket osäkra och det även om krävs många mätpunkter för att återge markens struktur, även på stor skala, ansågs ändå lösningen att använda uppdragens data vara en förhållandevis acceptabel lösning.

6.3 Val av parametervärden

Utgångspunkten har hela tiden varit att få modellen så generell som möjligt och detta har återspeglats i valet av parametrar och parametervärden. Mycket arbete har lagts på att finna lämpliga parametervärden som både är representativa för svenska förhållanden men även för mer generella förhållanden. Det är diskutabelt om vissa parametrar överhuvudtaget ska standardiseras eller generaliseras. De flesta parametrarna påverkas av ett antal olika faktorer, t.ex. påverkas arseniks sorptionsförmåga av arsenikhalten, pH samt tillgång på oxider att binda till. Att enbart ansätta ett värde taget från litteraturen utan att fundera på effekterna kan få mycket missvisande resultat. Samtidigt är denna metod standard då vissa parametrar kan mätas och undersökas i ett enskilt fall men generellt är det sällan som något stora tag tas och alla viktiga parametrar undersöks (Brömssen, m.fl., 2006). Även i platsspecifika modeller sätts en stor del av parametrarna till generella värden. Nästan hela Naturvårdsverkets riktlinjesmodell bygger på generella värden, som i sig går att ändra, men vilket sällan görs. Det är tyvärr orealistiskt att tänka sig att många intressenter idag skulle vara beredda att betala för en fullskalig utredning och en platsspecifik modell.

Det finns fördelar att använda samma parametervärden som Naturvårdsverkets riktvärdesmodell. Först och främst finns det en omfattande sammanställning av parametrar och det är lätt att finna värden. Dessutom har dessa generella parametervärden tagits fram

genom en sammanställning av uppgifter från experter och trovärdigheten på värdena är därmed höga och det får anses öka trovärdigheten av ESM.

Tyvärr har inte värdet på alla använda parametrar funnits att tillgå på detta smidiga sätt och sökandet på annat håll har varit nödvändigt. I första hand har välanvända källor så som *Dynamics of fluids in porous media* av Bear (1972) och *Physical and chemical hydrogeology* av Domenico och Schwartz (1990) använts. Även dessa värden schablonvärden och definitivt inte anpassade för svenska förhållanden och det kan vara en stor fara att ta ett parametervärde direkt. En så enkel sak som morän, vilket vi i Sverige tycker är en självklar jordart, finns inte med i sammanställningen av hydrauliska konduktiviteter. Detta gör att det blir nödvändigt att även finna svensk källor.

Valet att sätta **konduktiviteten** av berg till ett mycket lågt värde får några konsekvenser. För det första återspeglar detta val ett homogent och solitt berg utan sprickor som kan öka flödet. Generellt är bergkroppen nästintill impermeabel medan sprickorna står för nästan all vattentransport. Valet att sätta hela berget till detta låga värde säger att det inte finns några sprickor och att berget kan ses som en rand med ”no-flow”. Ett alternativ är att sätta bergets konduktivitet till något mellan ett lågt och ett högt värde för att simulera att det finns sprickor, vars placering dock blir okända. Om det är känt var sprickorna finns går det att lägga in dem, men då har steget gått från en generell modell till en platsspecifik som inte representeras i ESM. Så beroende på vilken konduktivitet som väljs anses berget vara impermeabelt eller inte, med en flytande skala där i mellan. Som grund i ESM har det valts att se berget som en rand och med den då mycket låga konduktiviteten.

Ofta anges parametervärden med en övre och undre gräns, däremot anges inte om värdena är normalfördelad eller inte. Att använda ett medelvärde rakt av kan bli mycket missvisande. I fallet med porositet faller det sig troligt att fördelning är någorlunda normalfördelad, men det är inte självklart. Lagertjockleken visar sig däremot vara långt ifrån en normalfördelning. Skillnaden mellan ett geometriskt och ett vanligt medelvärde är i detta fall stort. Det finns mätpunkter som sticker ut kraftigt och ett vanligt medelvärde återspeglar verkligheten dåligt och det får anses mer representativt att använda ett geometriskt medelvärde om många datapunkter finns att tillgå.

Dispersivitet är en svårbestämd parameter då den snarare beror på skalan som studeras och inte ämnet eller andra fysikaliska parametrar. Skalan varierar något beroende på vilket förorening som studeras och vilken tidsaspekt som studeras, samtidigt finns det en relation mellan dispersiviteten och cellstorleken. Normalt måste dispersiviteten kalibreras fram för att finna ett bra värde, samtidigt görs detta sällan vilket Brömssen m.fl. (2006) påpekat. Dispersionen har stor effekt på utfallet och modellen är känslig för valet av denna parameter. Användaren bör t.ex. vid stor spridning i motsatt riktning av grundvattenflödet vara skeptisk till resultatet och fundera över om ett lägre värde på dispersionen kan vara mer lämpligt. Samtidigt är dispersionen en viktig faktor för finfördelningen och spridningen av föroreningen. Utan denna faktor tar inte resultatet eller modellen hänsyn till markens heterogenitet överhuvudtaget.

Känslighetsanalyser för dispersiviteten i ESM, som är tagen ur ekvation Figur 17, visar att det finns en puckel kring 4-5 meters skalan och att då små skalor studeras bör värdet på L_s , väljas med omsorg. En liten förändring i den parametern ger en stor skillnad i dispersiviteten, som i sin tur vid små värden ger stor skillnad i föroreningsplymens spridning. Bästa alternativet är att kalibrera in dispersiviteten, men då detta oftast inte är möjligt bör användaren åtminstone vara medveten om effekterna.

Värdet på den **hydrauliska gradienten** är i standardfallet annorlunda än i Naturvårdsverkets riktvärdesmodell. I ESM har uppdragen fått större påverkan. De verkligt beräknade gradienterna i de tre uppdragen var klart lägre än det värde Naturvårdsverket har ansatt. Deras värde är satt för att skapa ett "worst case" scenario. Här kan det vara mer realistiskt att använda ett mer verkligt värde som är taget ur de tre uppdragen men samtidigt uppmanas användare att anpassa den hydrauliska gradienten i ESM till ett platsspecifikt värde. Samtidigt har advektionen visat sig vara en mindre viktig komponent i vissa fall och då påverkar inte valet av gradient lika mycket.

Vid en första anblick av användandet av **infiltrationen** framstår framtagandet av denna parameter som aningen ambitiöst och överdrivet noggrant. Så länge dräneringen används kommer allt överflödigt vatten försvinna den vägen. Detta gör att även om infiltrationen ökas till t.ex. 500 mm/år kommer grundvattenflödet bli detsamma. Å andra sidan vid fall där det finns ett märkbart uttag och sänkning av grundvattennivån, som ett grundvattenuttag, blir det viktigt att ha rätt infiltration. Så även om värdet i det initiala fallet är nästan oberoende får det ändå anses bra att kunna ha god kontroll över parametern. Valet att ansätta infiltrationen som skillnaden mellan nederbörd och avdunstning under en längre tid där andra faktorer bortses ifrån ansågs som en god förenkling. Men på samma sätt som Rodhe m.fl. (2006) konstaterar vid användandet av denna förenkling, bör resultatet tas med försiktighet.

Slutligen kan det konstateras att ESM bygger på en sammanställning av parametrar från olika källor med olika stora fel. Vissa parametervärden är tagna från "worst case" scenarion, vissa är tagna från sammanställningen av uppdragen och andra från ännu mer generella källor. Användaren bör ha detta i åtanke och fundera över känsligheten i kombination med parametervärdets källa vid användning av ESM och är viktigt att reflektera över dessa frågor vid användandet.

Diskretiseringen av cellerna, alltså storleken på cellerna i MODFLOW i horisontalplanet, är varierande i modellen för att spara datorkapacitet men ändå ge en bra upplösning nära händelsecentrum. Det är ganska vanligt att göra på detta vis, att ha stora celler där inget av intresse händer och mindre celler där fokus ligger. I standardutförandet är de största cellerna $25 \cdot 25$ meter och de minsta $3,125 \cdot 3,125$ meter, vilket motsvarar en förminskning med en faktor 3. Om föroreningen inte sprids så långt, alternativt att det är ett visst område som är intressant, bör användaren förbättra upplösningen. Detta görs bland annat som ett steg i förbättringen av ESM vid körningarna av de tre uppdragen. Att ha mindre celler ger bättre resultat men en avvägning måste göras i varje fall om resultatet blir bättre med den ökade diskretiseringen eller om det är onödigt och enbart tar mer datorkraft. Under arbetet med ESM kom det fram att nuvarande diskretisering är tillräckligt bra som utgångspunkt. Vid körningar

där cellernas storlekar minskades med såväl en faktor ett som två noterades knappt en märkbar förändring i resultaten.

Att använda en för stor diskretisering ger till följd att resultatet blir grovt och modellen tappar finkänsligheten. Det är för att behålla finkänsligheten och få en bra upplösning som cellerna minskas i storlek runt föroreningen. Det är däremot onödigt att ha mycket små celler långt ifrån föroreningen då detta både tar onödigt minne och datorprestanda. En modern dator har egentligen inga problem att hantera många celler så det får anses bättre att ha för små celler än för stora, framför allt i körning av steady-state. Det blir däremot en avsevärd skillnad vid körning av transienta modeller där exekveringstiden kan öka kraftigt. Samtidigt finns det ett maximalt antal celler som Visual MODFLOW kan hantera så vid stora modeller är det lämpligt att använda det begränsade antalet celler på ett lämpligt sätt. Maximalt kan Visual MODFLOW hantera $499 \cdot 499 \cdot 200$ celler (Schlumberger Water Services, 2011).

6.4 Modellens känslighet för olika parametrar

Modellens känslighet för olika parametrar varierar ganska stort, framför allt eftersom variationen av vissa parametrar är mycket större än andra. Samtidigt är vissa parametrars känslighet beroende på valen som är gjorda för andra parametrar. Modellens känslighet (plymens utbredning) för konduktivitet, porositet eller hydraulisk konduktivitet är beroende på modellens känslighet för advektion. Om sorptionen är den dominanta processen, som är fallet med arsenik, blir modellens känslighet för advektion och där med de andra tre parametrarna som styr grundvattenflödet nästan obefintlig. På samma sätt minskar modellens känslighet för andra parametrar om kraftig nedbrytning används.

För att få en fullskalig uppfattning av känsligheten för parametrarna skulle en mycket större uppsättning utgångsvärden behöva testas, t.ex. genom att undersöka modellens känslighet för sorption samtidigt som advektionen förändras. Men att göra en sådan undersökning är både tidskrävande och får ses som onödigt med tanke på de generellt bristande resultaten. Ett alternativ är att göra en Monte-Carlo-simulering och testa miljontals parameter uppsättningar för att få bättre bild, men även detta anses falla utanför projektets ramar.

Vid avsaknad av oxider i en mark sorberas arsenik dåligt medan vid tillgång till järn-oxider sorberas ämnet mycket starkt (Gustavsson m.fl., 2007). Skillnaden mellan de olika fallen är stor (se avsnitt 4.4.3) och det är mycket viktigt att detta värde är korrekt då sorptionen är den dominerande processen för spridning av arsenik. Vid låg sorption tar advektionen över och blir den dominanta processen och därför är bedömning av hur stark sorptionen är helt avgörande för resultatet. Det intressanta här är att vid modellering av arsenik är sorptionen en mycket känslig faktor, men vid låga värden blir plötsligt advektionen den viktiga och konduktivitet och hydraulisk gradient blir de känsliga parametrarna.

Det kan konstateras att modellens känslighet för **dispersionen** verkar vara mycket stor och denna bör undersökas vid användning av ESM, framför allt vid modellering av konservativa ämnen där dispersionen blir en viktig process. Dispersionen ger upphov till anormaliteter i resultatet, genom att föroreningen även transporteras i motsatt riktning av vattenflödet till en grad som är orealistisk. En viss spridning kommer ske motsatt flödesriktningen på grund av

diffusionen, men den är ofta försumbar (Gustafsson & Refsgaard, 2007) och den mekaniska dispersionen kan inte sprida ämnen i motsatt riktning mot grundvattenströmningen. Men då den mekaniska dispersionen är implementerad i modellen som diffusion får detta effekten att föroeningen kan röra sig en avsevärd sträcka motsatt flödesriktningen, något som alltså inte är fysikaliskt möjligt.

Slutligen kan det konstateras att parameterkänsligheten är viktig. En liten förändring i vissa parametrarvärden kan ge stora förändringar, beroende på vilken annan uppsättning parametrar som används. En användare bör först fundera på vilka processer och parametrar som är dominerande för att sedan titta på känsligheten för just dessa parametrar.

6.5 Jämförelse med analytisk lösning

De stora skillnaderna mellan de tre analytiska testerna (se avsnitt 5.4) kan tyda på ett par olika saker. Den första jämförelsen (se figur 34) visar stora skillnader mellan den analytiska och numeriska lösningen men vid addering av sorption (se figur 37) sammanfaller de två olika lösningarna mycket väl. Vid användandet av en lägre dispersion (se figur 35) blir resultatet aningen annorlunda: med dränering och infiltration underskattas resultatet och utan dränering/infiltration överskattas resultatet. Samtidigt är det stor skillnad att jämföra en endimensionell modell med en tredimensionell modell men det ger framför allt en bra kontroll att Visual MODFLOW gör som det är tänkt i den konceptuella modellen.

Totalt sett blev inte resultatet bättre med en sänkt dispersion vilket tyder på att det inte är val av dispersion som ger det dåliga resultatet. Det kan istället tyda på att ESM återspeglar grundvattenflödet och således advektion felaktigt. Vid addering av sorption tar effekten av sorption över från advektionen och blir den dominanta. Även vid låga värden på sorption påverkas resultatet kraftigt av den fördröjande processen vilket kan vara en anledning till det förbättrade resultatet. Ett lågt värde på sorption ger stor skillnad i den analytiska lösningen och anpassningen mellan den och ESM blir mycket bra, vilket tyder på att sorption är en viktig parameter.

Det intressanta är att vid den första jämförelsen har den numeriska lösningen inte ens samma form som ESM utan halten sjunker på en gång. Denna effekt fås oberoende av om infiltration används eller inte. Det går även att utläsa att användandet av dräneringsmodul påverkar resultatet. Dräneringen påverkar advektionen men effekten blir knappt märkbar vid addering till sorption, vilket igen tyder på att sorptionen är en starkare process. Däremot ger den endimensionella modellen i MODFLOW, med i övrigt samma förutsättningar som ESM, ett mycket bra resultat vid jämförelsen med den analytiska lösningen (se figur 36). Detta tyder på att det inte är randvillkoren som är felaktiga utan att det är att jämföra en 3D-modell med en 1D analytisk lösning som ger det dåliga resultatet i de andra jämförelserna. Detta problem minskar kraftigt då sorption adderas eftersom advektionen blir mindre viktig för spridningen än tidigare.

ESM-modellen, de analytiska lösningarna och Naturvårdsverkets riktvärdesmodell har aningen olika antaganden och förutsättningar. Både NVV och de analytiska lösningen är endimensionella medan ESM är tredimensionell. Däremot är flödet i ESM till stor del riktat

enbart i en dimension och vid avlägsnandet av dispersion i transversell och vertikal riktning blir transporten av föroeningen nästan uteslutande i en dimension. Genom att jämföra ESM med den analytiska metoden för sträckan från källans framkant till en viss koncentration får det ändå anses att metoderna jämförs under så pass lika förhållanden att det är användbart.

Att jämföra Naturvårdsverkets riktvärdesmodell gentemot ESM och den analytiska lösningen är däremot ganska vanskligt. För det första hanterar inte Naturvårdsverkets modell dispersion. Den tar dock hänsyn till utspädning, vilket på ett sätt kan ses ha samma effekt som dispersion. Vidare finns inget specificerat tidsperspektiv i NVV i och med att modellen är oberoende av vilken tidshorisont som studeras. Vid framtagandet av riktvärdesmodellen har det troligen funnits en tanke på tidshorisonten men det har inte framgått från litteraturen. Genom möjligheten att förändra tidsaspekten i den analytiska lösningen och i ESM går det troligen att finna en tid där lösningarna nästan sammanfaller.

Det som slutligen kan konstateras efter dessa tester är att ESM ger förhållandevis bra resultat vid användning av fördröjningsprocesserna, samtidigt som det verkar finnas osäkerheter i konceptualiseringen i grundvattenmodellen och troligen i valet av modellgränser. Vid fall där fördröjningsprocesser är viktiga och där advektionen inte är den dominerade processen ger ESM resultat som är mycket snarlika de analytiska. Resultatet tyder dessutom på att dränerings- och infiltrationsmodulerna har någon typ av utspädningseffekt på föroeningen, vilket skulle stärka valet att använda dem, trots bristerna och osäkerheterna som finns i dräneringsmodulen.

6.6 Naturvårdsverkets riktvärdesmodell

Det är ganska stor skillnad i förutsättningarna för Naturvårdsverkets riktvärdesmodell (NVV) och ESM. NVV tar enbart hänsyn till utspädning och advektion och inte till sorption, dispersion eller nedbrytning. Samtidigt finns det ingen direkt tidsaspekt utan modellen är troligen framtagen i steady-state och för värsta möjliga tänkbara scenario. Som konstaterats tidigare är det troligt att NVV modellen överdriver och överskattar föroeningen både i halt och i spridning. Samtidigt visar de analytiska 1D-transportuträkningarna att NVV även kan ge en lägre halt än både ESM och den analytiska 1D metoden. Men det bör observeras att de är körda med olika antaganden, så modellerna är inte direkt jämförbara.

Hur Naturvårdsverkets modell har tagits fram har inte gått att fastslå men samtidigt är det i sig inte av större vikt för jämförelserna eller användandet. Den stora fördelen med ESM jämfört med Naturvårdsverkets riktvärdesmodell är att ESM tar hänsyn till de tidigare nämnda faktorerna (dispersion, sorption, nedbrytning) och även har ett tidsperspektiv. Det går dessutom att i ESM få en uppfattning om vilken spridningshastighet som kan förväntas och även om det finns stor osäkerhet i resultatet går det ändå att få en känsla för spridningen.

Det går således inte att jämföra ESM och NVV rakt av utan jämförelsen får snarare göras i frågeställningarna. ESM kan besvara fler frågeställningar än NVV, samtidigt besvarar ESM inte på samma sätt frågeställningen angående worst-case vilket NVV gör. Det skulle vara möjligt att med vissa förändringar använda ESM för worst-case scenarion men detta har inte studerats närmre. Det bör noteras att NVV-modellen har en hög trovärdighet, är starkt

uppsbackad och anses som standard, detta oberoende om modellens antaganden är korrekta eller inte. För samma användningsområde kan ESM därmed inte konkurrera med NVV. Samtidigt är detta inte nödvändigt och är inte målet. ESM kan dock med viss tillförlitlighet ge en bild av förorenings-spridningen i rummet och i tiden vilket NVV inte kan.

6.7 De tre utvalda uppdragen

Generellt blev resultatet av jämförelsen mellan ESM och de utvalda uppdragen att ESM-simuleringarna inte överensstämmer med uppmätta föroreningskoncentrationer. Detta beror troligen på begränsningar i modellen, där verkligheten är för komplex för att kunna efterliknas med en standardmodell. Samtidigt tyder resultaten på att det är ett stort problem att implementera föroreningen på ett bra sätt. Begränsningar i modelleringsverktyget och brist på data gör att det är svårt att på ett bra sätt efterlikna föroreningskällan.

Arbetet att kalibrera ESM-modellen visade sig vara svårt mot dessa uppdrag, både för själva ESM-modellen men även för de enskilda uppdragen. Som konstaterats av Gustafsson och Rafsgaard (2007) är det ofta svårt att validera och kalibrera en modell eftersom det mycket sällan finns tillräckligt med data för att göra detta. Detta visade sig vara fallet även för dessa uppdrag. Trots god datamängd var det alldeles för lite data för att göra en god kalibrering och validering. På så vis kan det vara diskutabelt om det faktiskt var en ”god datamängd” eller inte.

Däremot har ESM-modellen utvärderats genom de analytiska jämförelserna, mot de tre uppdragen och varje utvald parameter har analyserats var för sig för att finna ett så bra värde som möjligt. Det hade varit intressant att försöka kalibrera ESM mot ett större antal platser och även mer ingående, men det låg långt utanför projektets ramar.

6.7.1 Boxholm

Det har visat sig att spridningen av arsenik i grundvattnet vid Boxholms sågverk verkar vara ytterst begränsad. Det förekommer dock halter både i grundvattnet och även i dräneringsvattnet. Arseniken tycks binda kraftigt till marken i Boxholm och inte lösa sig i någon större utsträckning i vattnet, vilket skulle tyda på förekomst av oxider i marken. Arsenik binder som tidigare nämnts mycket starkt till marken vid närvaro av järn- eller aluminiumoxider och det är en anledning till att arsenik inte lakas ut vid närvaron av dessa oxider (Gustavsson, m.fl., 2007).

Undersökningarna som genomfördes i Boxholm visade stor skillnad på arsenikförekomsten i olika prover beroende på om de filtrerades eller inte. Det tyder åter igen på att arseniken binder mycket starkt till marken och att det snarare är fysisk transport av jord (maskiner, människor) som spridit arseniken och inte arsenik löst i grundvattnet. I rapporten har ett värde för K_d på 300 L/kg ansatts men för att få en bättre uppfattning om värdet borde ett laktest genomföras, framför allt då sorptionen är den dominerande processen här. Gustavsson m.fl. (2007) konstaterar just detta, att K_d -värden är det mest centrala vid riskbedömning av metallföroreningar och bör tas fram platsspecifikt. Samtidigt visar modellering med ett lägre värde på K_d att även vid en tiondel så stor sorption blir resultatet detsamma, vilket även

återspeglas i känslighetsanalysen för sorption. Även vid ganska små värden på sorptionen blir effekten stor jämfört med att inte ha någon sorption alls.

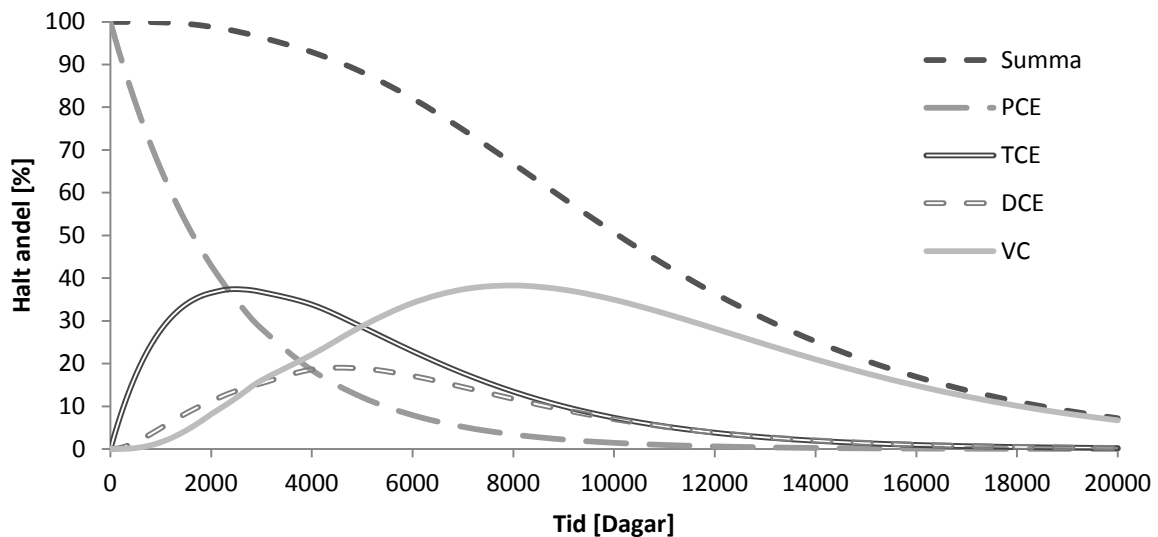
Både modelleringen av Boxholm och de undersökningar som gjorts inom uppdragen tyder på en mycket liten spridning av arsenik och att de omtalade dricksvattenbrunnarna mer eller mindre omöjligt kan vara förorenande av spridning från sågverket. Däremot har ESM inte kunnat beskriva föroreningens utbredning, men detta tros bero på brister i implementeringen av föroreningen. Om det stämmer att arseniken i Boxholm binder mycket kraftigt till marken är grundvattensspridningen av arseniken inte den viktiga faktorn för föroreningstransporten. Det är snarare spridning av själva impregneringskemikalien runt området vid hantering av både kemikalien och det trä som impregneras. Det impregnerade träet har lagrats runt om platsen för impregnering och det är troligare att detta är källan till den spridning som ses idag än att arseniken i sig själv har spridits i marken. Vidare har arseniken troligen även spridits med jord vid brukande av området.

Slutligen kan det konstateras att även om ESM inte beskriver föroreningsspridningen speciellt bra är det troligen implementeringen av föroreningen som är den begränsande faktorn. Väl i marken förutser ESM att arseniken inte sprids i någon större utsträckning vilket motsvarar de undersökningar som har gjorts.

6.7.2 Holms

Den bedömda utbredning av föroreningen vid Holms tvätt är beskriven som totalhalt klorerade kolväten och det har påvisats att det är en hög dekloreringsgrad väster ut. Detta tyder på att en stor andel PCE har brutits ner till TCE och vidare till DCE, vilket fortfarande är en förorening och en del av plymen. Detta tar ESM inte hänsyn till utan längst fram i plymen där PCE bryts ner försvinner föroreningen från modellen. Detta bör användaren ha i åtanke vid tolkning av resultatet, då det ger en viss underskattning av den totala halten klorerat kolväten. Den från uppdragen presenterade föroreningutbredningen vid Holms tvätt är summan av PCE och dess sönderfallsprodukter, medan ESM bara visar PCE-utbredningen.

Om föroreninghalten beskrivs som summan av PCE, TCE, DCE och VC fås en högre halt än vad ESM-modellen kommer ge då den enbart ger PCE koncentrationen (se figur 43). Detta är en av anledningarna att ESM-modellen avviker en del från de uppmätta värdena men samtidigt är förhållandevis nära vid första steget av platsanpassningen. Om den totala halten av klorerade kolväten i grundvattnet är den intressanta kan det vara lämpligt att avlägsna nedbrytningen, framför allt om tidhorisonten är kort. Det tar en avsevärd tid för en större mängd av PCE att brytas ner hela vägen till eten, därför kan det antas att det på kort sikt inte sker någon nedbrytning. Med detta antagande kan ESM köras utan nedbrytning av PCE, där halten av PCE får representera alla de olika komponenterna. Detta fungerar naturligtvis inte på längre sikt då mängden PCE som brutits ner till eten blir allt större och större.



Figur 43. Nedbrytning av första ordningen av PCE, halveringstider från Wiedemeier m.fl. (1998). Se appendix.

Med samma antaganden som tidigare angående nedbrytning av PCE och dess komponenter tar det ca 10 000 dagar för att den totala halten klorerat kolväten att halveras. Det innebär att 50 % av den initiala mängden PCE har brutits ner hela vägen till eten, vilket motsvarar ca 27 år. Med denna kännedom går det att utvärdera ett resultat från en körning utan nedbrytning om tidsaspekten är kort. Utbredningshastigheten är beroende på halten vilket gör att ju längre tid som går desto mer missvisande blir resultatet. Utan nedbrytningen överskattas halten och således även utbredningshastigheten. Denna metod är dock användbar i ett kortare perspektiv och för att titta på worst-case scenarier. Det bör observeras att detta resonemang bygger på att hela kroppen av PCE bryts ner i samma hastighet och att hela kroppen är utsatt för nedbrytning, vilket troligen inte är fallet.

Det intressanta är att vid övergången från steg 1 till steg 2 (det vill säga till en mer platsspecifik beskrivning av jordlagren) drar föroreningsplymen iväg kraftigt och överensstämmelsen med uppmätta halter blir sämre. Samtidigt består en stor del av plymen av en låg halt. Som tidigare konstaterats kan PCE teoretiskt spridas långa avstånd. Detta gör att det egentligen inte behöver betyda att körning två är sämre än körning ett (plymens rand är längre ifrån uppmätta värden än i körning 1), eftersom den riktiga föroreningsplymen har inte fastslagits helt och hållet. Det går även att se en liten skillnad mellan att köra modellen med eller utan dränering och infiltration i den första körningen. Resultatet är dock inte speciellt känsligt för dessa två parametrar utan det är andra faktorer som påverkar resultatet mer.

Det är dock en markant skillnad mellan att köra modellen med och utan dränering och infiltration vid steg 2 där advektionen blir den dominerande faktorn. Med en halveringstid på 4,5 år för PCE blir effekten av nedbrytningen ganska marginell. Omräknad blir nedbrytningen $0,0004 \text{ dag}^{-1}$ vilket, som tidigare konstaterats i känslighetsanalysen, är ett lågt värde som inte ger så stora förändringar i utbredningen. Däremot sjunker plymens halt snabbare närmare källan än vad den annars skulle ha gjort. Skillnaden i partikelhastigheten för grundvattnet mellan steg 1 och 2 är en tiopotens, på grund av att förändringen av konduktiviteten från

fyllnadsmassa till sand ökar konduktiviteten med en tiopotens vilket ger motsvarande hastighetsökning. Detta i sig gör att advektionen blir en viktigare process.

Vilken av de två körningarna som beskriver den verkliga föroreningsutbredningen bättre är svårt att avgöra. Uppenbarligen är resultaten från körning ett närmare den från befintliga mätningar uppskattade plymen, men det skulle behövas fler grundvattenrör på ett längre avstånd för att försäkra sig om att plymen inte spridit sig längre. Den ökade hydrauliska gradienten som lades in i steg 2 ökar grundvattenflödet och även advektionen. Då advektionen är den dominerande processen för PCE-spridning, vid sidan av nedbrytningen, kommer detta ge en längre plym, vilket också sågs i modellen.

Slutligen kan det konstateras att körningen mot Holms gav ett ganska bra resultat. Det fanns en klar och förhållandevis säker källa med god data på halten. Vidare rör sig inte den lösta fasen av PCE märkbart, förutom i höjddled. Möjligheten att implementera föroreningen på ett bra och realistiskt sätt bidrog med stor sannolikhet till det bättre resultatet jämfört med de andra uppdragen där föroreningskällans implementering var svårare.

6.7.3 Estländaren

Det stora problemet med att modellera bensenspridningen i Estländaren visade sig att vara föroreningsimplementeringen. Då MT3DMS inte hanterar den fria fasen och föroreningskällan till grundvattnet ansattes till densamma som källan till den fria fasen, blev resultatet generellt ganska dåligt. Bensen spreds knappt 40 % av den uppskattade sträckan från mätningar i uppdragen. Resultatet blev till och med sämre då den mer platspecifika jordlagerföljden och gradienten lades in i ESM. Naturvårdverkets riktlinjesmodell ger med samma förutsättningar en överskattning på över 200 %, trots anpassning till området.

Det har uppmärksammats att den fria fasen hade rört sig framåt en avsevärd sträcka, ca 150 meter redan på 70-talet, däremot tycks den ha stannat upp på senare tid. Källan till föroreningen i vattnet har alltså rört sig och även förstörats. Då detta inte går att modellera direkt i nuvarande modell men är en mycket viktig process för spridningen, påverkar detta överensstämmelsen mellan modellerade och uppmätta koncentrationer negativt. Genom att implementera hela plymen av fri fas som en källa i modellen återfås ett mycket bättre resultat, som ligger mycket närmare det uppskattade. Egentligen borde denna plyms utbredning i tiden beskrivas för att få en bra implementering av källan, men då detta inte gick att genomföra ansågs denna lösning ge den mest representativa beskrivningen av källzonen givet befintlig data. Vidare har troligen en för hög initialhalt används då det var okänt vilken molfraktion av bensen som bestod av bensen. Detta behöver i sig inte vara ett problem då modellens känslighet för initialhalt inte är speciellt stor.

Den stora skillnaden mellan resultaten i de två olika implementeringarna av föroreningen visar en mycket viktig aspekt av ESM-modellen. Föroreningsimplementeringen är en mycket central del och kanske den viktigaste uppgifterna för en användare. Det är mycket viktigt att beskrivningen av källan görs på ett så bra sätt som möjligt och att användaren är fullt medveten om vilka begränsningar och antaganden som görs. I fallet med Estländaren går resultatet från att överensstämma ganska dåligt till att efterlikna mätdata mycket bättre med

avseende på plymens spridning. ESM kan fortfarande inte återspegla halterna i brunnarna men detta beror återigen troligen mer på bristen i beskrivningen av den fria fasens rörelse än själva modellen i sig.

I de två olika försöken har det inte tagits hänsyn till grundvattenströmningens karaktär. Även om den generella grundvattenströmningen i området går i nordostlig riktning förekommer avvikelser (se figur A.1 i appendix), troligen beroende på den bergskam som finns i området. Även om plymens längd blir mer eller mindre densamma skulle riktningen bli aningen annorlunda och skulle eventuellt kunna efterlikna den beräknade plymen bättre.

Slutligen kan det konstateras att implementeringen av föroreningen är central och resultatet påverkas kraftigt av hur detta görs. Även om verkligheten inte går att beskriva alla gånger kan antaganden och förenklingar göras för att komma närmre sanningen med implementeringen och på så vis få ett bättre resultat. Naturvårdsverkets riktvärdesmodell kan vara lämplig att använda för att besvara frågan om bensen kan ta sig hela vägen till åsen. För att beskriva vilket område som kan vara lämpligt att avgränsa för grundvattenuttag kan ESM däremot vara ett bra första steg.

6.8 Användbarhet

Ett av målen som återfinns i avsnitt 1.2, är att modellen ska vara användbar. ESM ger generellt en dålig beskrivning av verkligheten, samtidigt bör det hållas i åtanke att föroreningsspridning är en mycket komplex process som heller inte är helt utredd. Resultaten från denna studie tyder ändå på att ESM kan ge en ganska god bild av situationen. Även om felen är förhållandevis stora återspeglar ESM föroreningens spridning i stora drag. Modellen har i inget fall varit i närheten att återspegla de uppmätta halterna, däremot lyckas den återspegla plymens och föroreningens utbredning ganska väl.

Att anpassa modellen har inte diskuterats tidigare men tidsåtgången att göra de beskrivna stegen 1 och 2 (se avsnitt 2.4) är generellt mycket låg om användaren är van vid att använda Visual MODFLOW. Att genomföra steg 3 är mer tidskrävande och framför allt mycket mer krävande i datamängd. Även om implementeringen i ESM går fort är det snarare att förbereda rådata som tar tid. Målet att modellen inom en rimlig tidsåtgång ska gå att anpassa får ändå ses som uppfyllt.

Något som är viktigt att tänka på är att även om ESM och denna rapport hanterar PCE, bensen och arsenik finns det inga hinder mot att simulera andra ämnen. Vill användaren simulera koppar istället för arsenik ändras enbart de ämnesspecifika parametrarna, på samma sätt för de andra föroreningarna. På många sätt får valet av dessa tre föroreningar snarare representera tre grupper. Bensen representerar en nedbrytbar förorening som flyter ovanpå grundvattenytan med dess problematik. PCE representerar en förorening som också är nedbrytbar om än i lägre utsträckning, men vars produkter fortfarande är farliga. Ämnet är även tyngre än vatten och sjunker ner under grundvattenytan. Arseniken får representera metallföroreningar. Just arsenik har en tendens att absorberas hårt, men det skulle gå lika bra (eller dåligt) att simulera en annan metallförorening som inte bryts ner eller sorberas så hårt.

Utvärderingen av modellen kan ses på olika sätt. Om modellen enbart används för enklare uppskattningar och för att ge en generell bild av en spridning, har ändå en utvärdering genomförts i och med användandet av de tre uppdragen. ESM tycks beskriva de generella processerna och utbredningen ganska väl men har inte några som helst möjligheter att beskriva föroreningen i detalj. Beroende på ur vilket perspektiv ESM används kan det ändå konstateras att en viss utvärdering har genomförts, även om det hade varit önskvärd med en riktig kalibrering och validering.

Med tanke på resultaten får det även sägas att ESM bör vara användbar vid god kännedom om föroreningskällan. Implementeringen av föroreningen har mycket stor effekt på resultatet. När en föroreningskälla är välkänd kan ESM användas men modellen är mindre lämplig att använda vid mer diffusa och osäkra källor. Källor så som den i Holms där det nästan är en punktkälla som inte rör sig går bra att implementera medan rörliga källor, som vid Estländaren, kan vara svåra att implementera på ett bra sätt.

ESM kan användas för att få en första bild över spridningen och en uppfattning om vilka faktorer som kan vara viktiga. Körs modellen med t.ex. olika värden på sorptionsparametrar och det ger stora skillnader i resultatet kan det vara lämpligt att ta fram ett platsspecifikt K_d -värde, vilket sedan kan användas för att bedöma riskerna. På detta sätt kan modellen användas för att bedöma vilka faktorer som kan ha störst påverkan på spridningen. Resultatet måste alltid analyseras och betänkas med erfarenhet och kännedom om föroreningsproblematiken.

ESM kan även användas som grund för en mer platsspecifik modell genom att lägga in topografi och även försöka kalibrera in grundvattenmodellen. Om det är möjligt kan ESM vid god implementering av föroreningen potentiellt ge ett mycket bra resultat. Användbarheten varierar också mycket beroende på frågeställning och det kan vara en god idé att först fundera på vad som är frågeställningen innan ESM används. Vissa frågeställningar kan ESM svara på medan andra inte kan täckas in av modellen.

Slutligen går det att konstatera ett par saker angående användbarheten. ESM kan i dagsläget inte konkurrera med Naturvårdsverkets riktlinjesmodell, även om den hypotetiskt skulle kunna ge bättre resultat. Samtidigt konkurrerar inte NVV och ESM och det ska hållas i åtanke att det heller aldrig var målet. Målet var att göra något som är bättre än NVV, men inte nödvändigtvis svara bättre på samma frågeställningar, utan snarare kan svara på andra och mer komplexa frågeställningar.

7 Slutsatser

Föroreningsspridning i mark och grundvatten är ett mycket komplext problem, både på grund av dess komplexa natur och avsaknaden av kännedom om de parametrar som styr den. Det är generellt alldeles för svårt att göra en modell som är både enkel och tillförlitlig, vilket både ESM och NVV återspeglar.

Det går däremot att skapa en modell som ger en bild över situationen men det är nödvändigt att tolka resultatet med kännedom om både problematiken kring föroreningsspridning, modellens uppbyggnad och den plats som i modellen avser att återskapa.

Två stora problem åligger användaren av ESM. Det första är att skapa en bra grundvattenflödesmodell som grund för ämne-transporten. Det andra är att på ett bra sätt implementera källan av föroreningen. Dessa två aspekter får ses som de absolut viktigaste för ett bra resultat. Hur väl det går att återskapa föroreningskällan i modellen har direkt påverkan på hur väl det går att tillämpa modellen för ett område.

I sitt standardutförande ger ESM en mycket grov och förenklad uppskattning av föroreningsspridningen. Om användaren är van att arbeta i Visual MODFLOW kan ESM-modellen dock snabbt omarbetas och göras mer platsspecifik. Graden av anpassning bör återspegla frågeställningen i det specifika fallet och kan även komma att begränsas av tillgången på data.

I de fall som undersöktes denna rapport gav ESM en generell bild över föroreningssituationen som överensstämde bättre med resultaten från platsundersökningarna än NVVs modell, men hade trots detta svårigheter att efterlikna uppmätta halter av föroreningarna.

8 Litteraturförteckning

Bear, J., 1972. *Dynamics of fluids in porous media*. American Elsevier publishing company inc.

Bedient, P., Rifai, H. & Newell, C., 1999. *Ground water contamination - Transport and remediation*. 2nd red. Prentice Hall.

Berglund, S., Landin, O. & Mogensen, A., 2003. *Undersökning av grundvattenförorening vid fd bensinstation*, Stockholm, WSP.

Brömssen, M. v., Gunnemyr, L., Lindstrand, O. & Jonasson, S., 2006. *Modeller för transport och spridning av föroreningar - Fas 1*, Stockholm, Naturvårdsverket.

Davidsson, L., 2013. *Holms tvätt, Harplinge huvudstudie - Klorerade alifater*, WSP.

Domenico, P. A. & Schwartz, F. W., 1990. *Physical and chemical hydrogeology*, John Wiley & sons.

Englöv, P. o.a., 2007. *Klorerade lösningsmedel*, Naturvårdsverket.

Espeby, B. & Gustavsson, J. p., 1998. *Vatten och ämnestransport i den omättade zonen*, KTH.

Gustafsson, L.-G. & Refsgaard, A., 2007. *Datormodeller för förorenings-spridning fas 2*, Stockholm, Naturvårdsverket.

Gustavsson, J. P., Elert, M., Berggren, D. & Jarvis, N., 2007. *Modeller för spridning av metaller från mark till vatten*, Naturvårdsverket.

Harbaugh, A. W., 2005. *MODFLOW-2005, The U.S. Geological Survey Modular Ground-Water Model—the Ground-Water Flow Process*, U.S. Geological Survey Techniques and methods 6-A16.

Jonasson, S., Brömssen, M. v., Gunnemyr, L. & Lindstrand, O., 2007. *Modeller för transport och spridning av föroreningar - Fas 2*, Stockholm, Naturvårdsverket.

Naturvårdsverket; Institutet Svenka Petroleum, 1998. *Förslag till riktvärden för förorenade bensinstationer*, Stockholm, Naturvårdsverket.

Naturvårdsverket, 2009. *Riktvärden för förorenad mark - Modellbeskrivning och vägledning*, Stockholm, Naturvårdsverket.

Nordbäck, J. & Tiberg, C., 2004. *Naturlig självrening av oljeprodukter i mark och grundvatten - Pilotstudie i Sollentuna, Stockholm*, Linköping: Statens Geotekniska institut, SGI.

Rodhe, A., Lindström, G., Rosberg, J. & Pers, C., 2006. *Grundvattenbildning i svenska typjordar - översiktlig beräkning med en vattenbalansmodell*, Hydrologi, Series A no 66 Institutionen för geovetenskaper, Uppsala Universitet.

Schlumberger Water Services, 2011. *Visual MODFLOW Help*

SMHI, 2009. [Online]

www.smhi.se

[Använd 3 April 2013].

Sterner, O., 2003. *Förgiftningar och miljöhot*. Lund: Studentlitteratur.

Walger, E., 2006. *Klorerade lösningsmedel i jord och grundvatten: Undersökningsmetodik samt analys av utförda undersökningar*, Uppsala Universitet - Examensarbete i miljö- och vattenteknik.

Wiedemeier, T. o.a., 1998. *Technical Protocol for evaluation natural attenuation of chlorinated solvents in ground water*, Washington DC: Environmental Protection, United States.

Xu, Moujin & Eckstein, 1995. Use of weighted least-squares method in evaluation of the relationship between dispersivity and field scale. *Environmental Sciences & Pollution Management*, Volym 33, pp. 905-908.

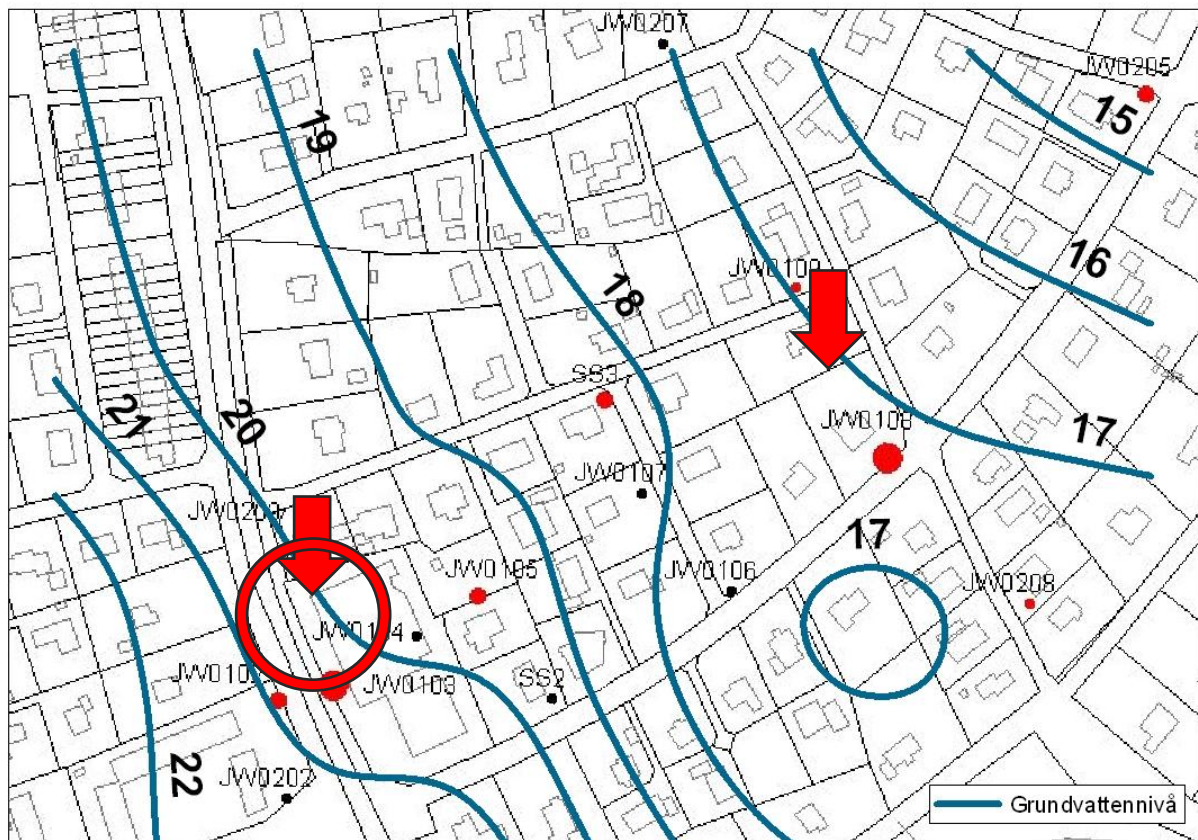
Zheng, C., 1990. *MT3D*

Zheng, C. & Wang, P., 1999. *MT3DMS: A Modular Three-Dimensional Multispecies Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion, and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems; Documentation and User's Guide*, US army corps of engineers.

Österås, A. H., 2013. *F.d impregneringsområde vid Boxholms sågverk, inom del av Bredgård 1:92, Boxholms kommun, WSP*.

Appendix A

A.1 Estländaren



Figur A.1. Interpolerade grundvattennivåer utefter utmärkta grundvattenrör, föroreningskällan är markerad med en röd cirkel i nedre vänstra hörnet. Mycket förhöjda halter av bensen i grundvattenrören JW0108 och JW0103 vilka är markerade med pilar.

A.2 Beräkningar

Nedbrytning Bensen

Rapporterad maximal nedbrytningshastighet, λ [dag⁻¹]: 0,095

Rapporterad lägsta nedbrytningshastighet, λ [dag⁻¹]: 0,0009

Medelvärde ansatt till $10^{(\log(0,095)+\log(0,0009))/2} = 0,009245 \approx 0,009$ [dag⁻¹]

Nedbrytning PCE

Rapporterad halveringstid (Wiedemeier, m.fl., 1998) 4,52 år

Nedbrytningshastighet, $\lambda = \ln(2) / (4,52 \cdot 365) = 0,000419213 \approx 0,0004$ [dag⁻¹]

Sorption

$K_d^{\text{Bensen}} = K_{oc}^{\text{Bensen}} \cdot f_{oc} = 135 \cdot 0,02 = 1,48 \approx 1,5$

$K_d^{\text{PCE}} = K_{oc}^{\text{PCE}} \cdot f_{oc} = 263 \cdot 0,02 = 5,26 \approx 5$

Där K_{oc} - och f_{oc} -värden tas ifrån Naturvårdsverkets riktvärde (2007).

Felfunktionen och komplementära felfunktionen

Ekvation A.1. Felfunktionen, löses ej direkt utan tabellerade värden finns (Bedient, m.fl., 1999).

$$\text{erf}(x) = 1 - \text{erfc}(x) = \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\right) \int_0^x e^{-u^2} du$$

A.3 Tabeller

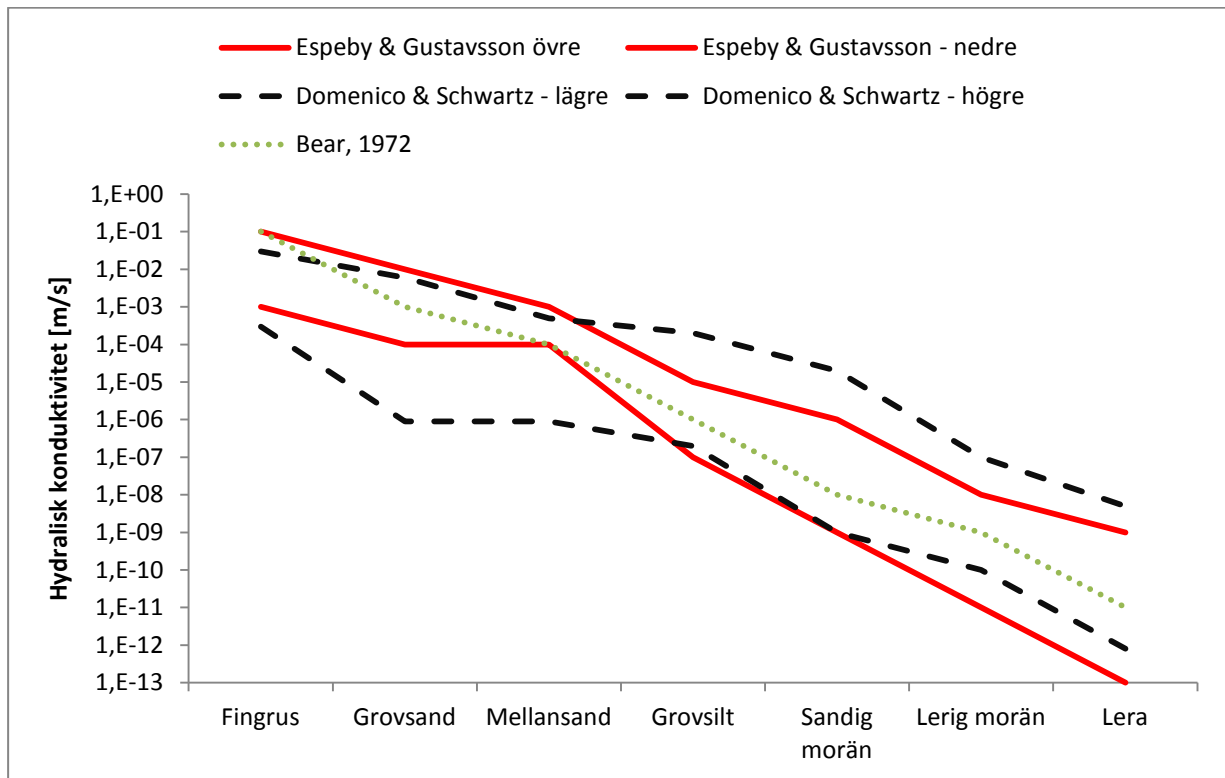
Tabell A.1. Data för plymens utbredning för olika dispersioner, se figur 24.

| Dispersion [m] | Utbredning framför [m] | Utbredning bakom [m] | Utbredning sidled [m] |
|----------------|------------------------|----------------------|-----------------------|
| 0 | 79,5 | 4,3 | 4,8 |
| 0,1 | 80 | 10,7 | 7,6 |
| 1 | 82,6 | 19,4 | 10,8 |
| 10 | 112,8 | 64 | 24,6 |
| 50 | 166,6 | 139,6 | 46 |
| 100 | 203 | 197 | 59,4 |

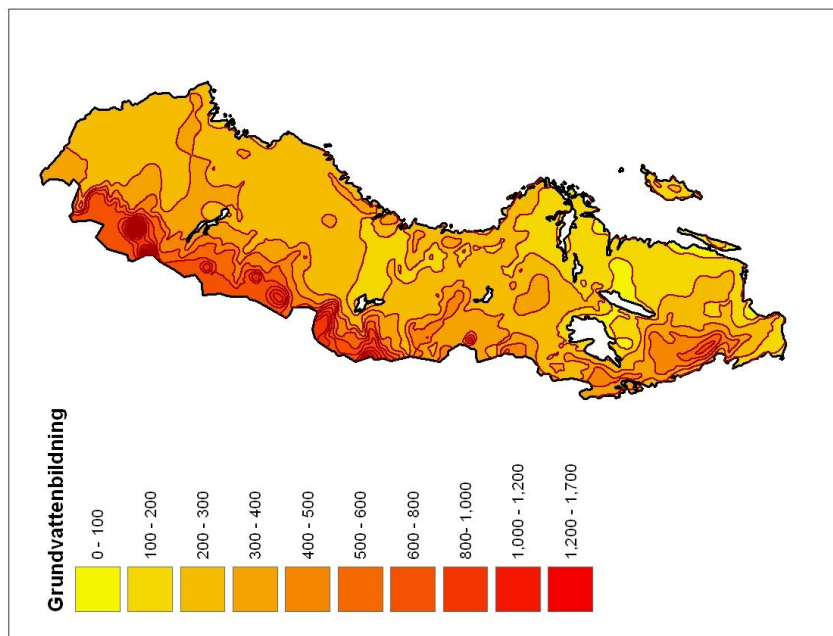
Tabell A.2. Halveringstider för PCE och dess nedbrytningskomponenter, data från (Wiedemeier, m.fl., 1998).

| Ämne | Halveringstid [år] |
|------|--------------------|
| PCE | 4,53 |
| TCE | 4,52 |
| DCE | 2 |
| VC | 7,9 |

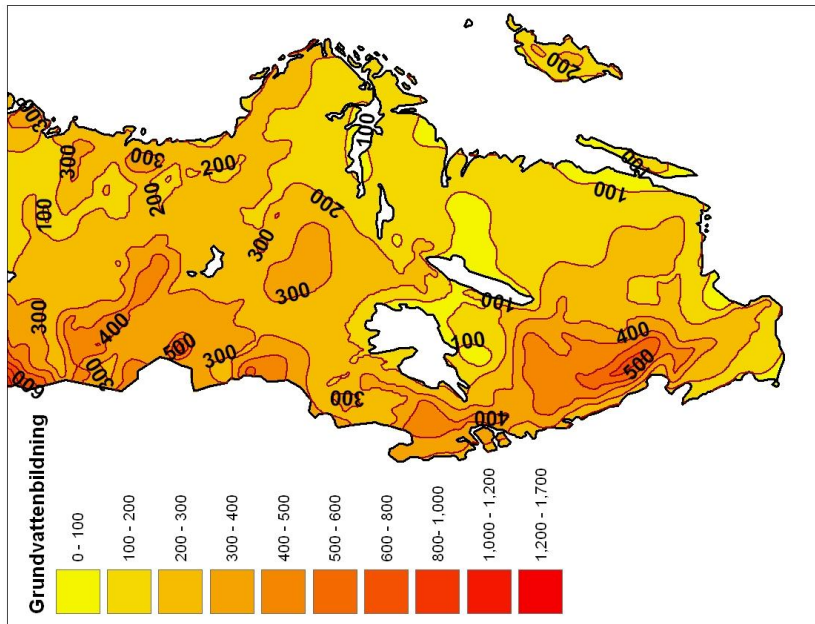
A.4 Figurer



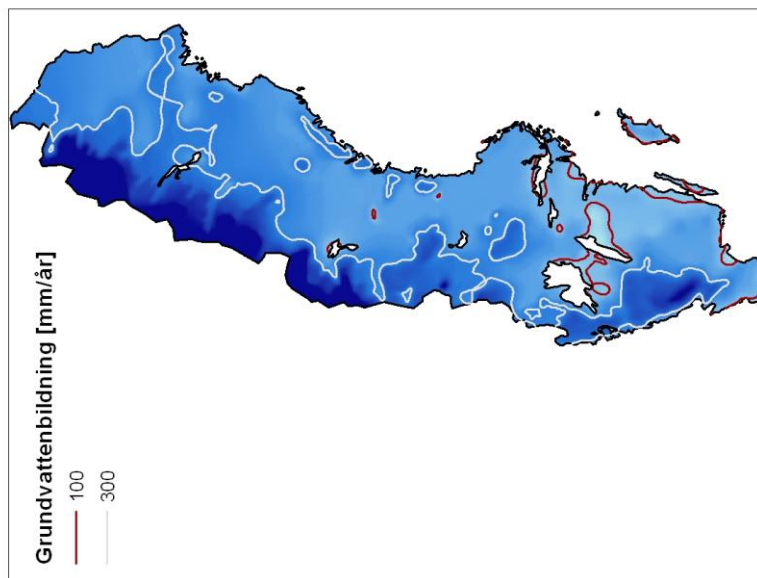
Figur A.2. Olika litteraturvärden på konduktivitet.



Figur A.3. Beräknad grundvattenbildning i Sverige i [mm/år].



Figur A.4. Beräknad grundvattenbildning i södra och mellersta delarna av Sverige i mm/år



Figur A.5. Gränsen mellan 100 mm/år (lägre), samt gränsen på 300 mm/år (högre), däremellan är grundvattenbildningen således 100-300 mm/år.

A.5 ESM sammanfattning av parametrar

| Lageregenskaper | | | | | | | |
|---------------------------|------------|---------------------------|---|---------------------------------|--|----------------------|---------------------------------------|
| | Lager | Material | | K [m/s] | | Mäktighet | |
| | 1 | Fyllning/sand | | 10^{-5} | | 2,50 | |
| | 2 | Iera | | 10^{-10} | | 1,50 | |
| | 3 | Morän (sand + Iera) | | $3 \cdot 10^{-8}$ | | 6,00 | |
| | 4 | Berg | | 10^{-12} | | 15,00 | |
| | 5 | Berg | | 10^{-12} | | 15,00 | |
| Generella | | | | | | | |
| | | Hydraulisk gradient [%] | 2 | <i>Skapad - ej en parameter</i> | | | |
| | | Kinematisk porositet | 0,20 | | | | |
| | | Total porositet | 0,40 | | | | |
| | | Infiltration [mm/år] | 200 | | | | |
| Kemiska parametrar | | | | | | | |
| | Dispersion | Longitudinell [m] | Transversell KVOT | Vertikal KVOT | Nedbrytning [dag^{-1}] | Sorption (Kd) [L/kg] | Riktvärde, vatten [$\mu\text{g/L}$] |
| Arsenik | | 2 | 0,1 | 0,01 | 0 | 300 | 5 |
| Bensen | | 2 | 0,1 | 0,01 | 0,009 | 1,48 | 0,5 |
| PCE | | 2 | 0,1 | 0,01 | 0,0004 | 5,26 | 5 |
| Dränering | | | | | | | |
| | | Average drain Conductance | $\$BOT+\$DZ-0.5$ 130 [dag^{-1}] | | <i>Motsvarar 0,5 meter under ytan</i> | | |
| Höjdpunkter | | | | | | | |
| | | Y [m] | X [m] | Z [m] | | | |
| | | 0 | 0 | 40 | | | |
| | | 0 | 1000 | 40 | | | |
| | | 1000 | 0 | 60 | | | |
| | | 1000 | 1000 | 60 | | | |
| Randvillkor | | | | | | | |
| | | General head | Head [m] | Sträcka [m] | | | |
| | | Norr | 62 | 100 | <i>Kan enklast ersättas med konstant potential</i> | | |
| | | Söder | 38 | 100 | <i>vid förändring av hydraulisk gradient</i> | | |