



UPPSALA
UNIVERSITET

UPTEC W 17 013

Examensarbete 30 hp
Augusti 2017

Framtagande av platsspecifik grundvattenmodell
samt modellering av klorerade lösningsmedels
spridning i grundvatten kring industritomt

– Utvärdering av nuvarande samt framtida
föroreningsituation

Julia Inkapööl

REFERAT

Framtagande av platsspecifik grundvattenmodell samt modellering av klorerade lösningsmedels spridning i grundvatten kring industritomt – Utvärdering av nuvarande samt framtida föroreningsituation

Julia Inkapööl

Ett av Regeringens miljö kvalitetsmål är att uppnå en giftfri miljö vilket innebär att förekomst av antropogena ämnen i miljön ej bör utgöra ett hot mot människors hälsa eller den biologiska mångfalden. Ett sådant ämne är klorerade alifatiska kolväten vilka har använts historiskt inom kemtvätt samt som avfettningsmedel inom industrin. Under senare år har negativ inverkan på människors hälsa kunnat påvisas såsom hög toxicitet samt cancerframkallande egenskaper vilket medfört att flertalet klorerade lösningsmedel idag ej får brukas.

Vid den före detta Whirlpoolindustrin i Himmelstalund, Norrköping, har de klorerade lösningsmedlen perkloreten (PCE) och trikloreten (TCE) hanterats historiskt vilket medfört att halter av dessa samt deras nedbrytningsprodukter cis-1,2-dikloreten (cis-1,2-DCE) och vinylklorid (VC) har detekterats i grundvatten. Detta examensarbete syftade till att ta fram en platsspecifik grundvattenmodell samt en masstransportmodell för att simulera spridningen av dessa föreningar genom den mättade zonen efter 10, 30 respektive 75 år. Grundvattenmodellen togs fram i MODFLOW och kalibrerades baserat på kända hydrologiska och geologiska förhållanden varefter en känslighetsanalys genomfördes med avseende på hydraulisk konduktivitet respektive effektiv porositet. Det kunde konstateras att flödesmodellen genererade flöden vilka överensstämde med uppmätta invid Whirlpool då hydraulisk konduktivitet ansattes inom intervallet 10^{-5} – 10^{-2} m/s samt effektiv porositet inom intervallet 5–25%.

Det kunde konstateras att PCE, TCE samt cis-1,2-DCE ej nådde ytvattenrecipienten Motala ström inom 75 år då de som längst rörde sig omkring 500 meter väster om källzonen. Däremot nådde VC Motala ström redan inom tio år beroende av vilken initial koncentration som ansattes. Föroreningsplymen av VC förblev kvar i akviferen efter 75 år med en utbredd plym innehållande koncentrationer vilka överskrider riktvärdena. Halterna inom plymerna överskred riktvärdena över tillåtna halter i grundvatten. Detta är att betrakta som allvarligt då den mark spridningen sker till används för rekreation och då klorerade lösningsmedel har toxisk och cancerogen inverkan på människor.

Känslighetsanalys med avseende på adsorptions- samt reaktionsparametrar genomfördes där det kunde konstateras att ansats av adsorption påverkade spridningen stort och var mer avgörande än hur reaktionssparametrarna ansattes. Då adsorption ansattes maximalt förblev PCE, TCE och cis-1,2-DCE invid källzonen medan VC rörde sig ca 500 meter från källzonen. Vid ansats av minimal adsorption kunde ses att de mobila egenskaperna blev avsevärt större. Hydraulisk konduktivitet hade stor påverkan på transporttiderna där högre hydraulisk konduktivitet medförde hastigare transport genom akviferen.

Då spridningen genom akviferen berodde stort av hur parametrar ansattes bedöms det som relevant att mäta upp hydraulisk konduktivitet, adsorptionskonstanter samt uppmätta grundvattennivåer i fler punkter utspritt i modellområdet i syfte att förbättra masstransportmodellens tillförlitlighet.

Nyckelord: Förorenad mark, Grundvattenmodellering, Föroreningstransport, MODFLOW, RT3D, Sekventiell nedbrytning, Klorerade lösningsmedel

Institutionen för geovetenskaper; luft-, vatten- och landskapslära. Uppsala Universitet
Villavägen 16, SE-752 36 UPPSALA

ABSTRACT

Development of site-specific groundwater model and modeling of chlorinated solvent dispersion into groundwater around industrial site –Evaluation of current and future contamination spread

Julia Inkapööl

One of the Government's environmental quality objectives is to achieve a poison free environment, meaning that the presence of anthropogenic substances in the environment should not pose a threat to human health or biodiversity. Such a substance is chlorinated aliphatic hydrocarbons which have been used historically in dry cleaning and as degreasing agents within industrial processes. In recent years, negative effects on human health have been found since exposure to chlorinated solvents is associated with toxic and carcinogen effects, which has resulted in constrictions against such substances today.

At the former Whirlpool industry in Himmelstalund, in Norrköping, the chlorinated solvents perchlorethylene (PCE) and trichlorethylene (TCE) have been used historically during production. Concentrations of PCE and TCE and their degradation products cis-1,2-dichloroethylene (cis-1,2-DCE) and vinyl chloride (VC) have been detected in groundwater at the site. This Master's thesis aimed to develop a site-specific groundwater flow model and a mass transport model to simulate the spread of these compounds through the saturated zone after 10, 30 and 75 years. The groundwater model was developed in MODFLOW and calibrated based on known hydrological and geological conditions after which a sensitivity analysis was performed regarding hydraulic conductivity and effective porosity. It was found that the flow model generated flows which corresponded to measured ones when hydraulic conductivity was employed within the range 10^{-5} – 10^{-2} m/s and effective porosity in the range 5–25%.

It was found that PCE, TCE and cis-1,2-DCE did not reach the surface water recipient Motala river within 75 years, the compounds traveled 500 meters west of the source zone as furthest. However, VC reached Motala river within ten years, depending on which initial concentration were applied. The plume of VC remained in the aquifer after 75 years containing concentrations exceeding the guideline values in groundwater. This is considered severe since chlorinated solvents are toxic and cancerogenic to humans.

A sensitivity analysis with regard to adsorption and reaction parameters was performed where it was found that the adsorption greatly affected the spread of the plumes and was more influencing than how the reaction parameters were applied. When maximum adsorption was employed, PCE, TCE and cis-1,2-DCE remained adjacent to the source zone while VC moved about 500 meters. It was seen that the mobile properties of the compounds were considerably larger for all components when minimal adsorption was applied. Hydraulic conductivity had a major impact on transport times where higher hydraulic conductivity resulted in faster transportation through the aquifer.

As the spread through the aquifer was largely affected by which parameters were chosen, it was assessed relevant to measure hydraulic conductivity, adsorption constants and measure groundwater levels in more points spread in the model area in order to improve the reliability of the mass transport model.

Keywords: Contaminated soil, groundwater modelling, contaminant transport, MODFLOW, RT3D, sequential decay, chlorinated solvents

Department of Earth Sciences, Program for Air, Water and Landscape Sciences. Uppsala University, Villavägen 16, SE-752 36 UPPSALA

Förord

Detta examensarbete omfattar 30 högskolepoäng och är ett avslutande moment på civilingenjörsprogrammet inom Miljö- och vattenteknik vid Uppsala universitet och Sveriges Lantbruksuniversitet. Ämnesgranskare vara Auli Niemi och examinator var Björn Claremar, båda från Institutionen för Geovetenskaper vid Uppsala Universitet.

Arbetet har utförts med uppdrag från WSP Halmstad och ska tjäna som underlag inför framtida riskbedömning av industritomten. Jag vill rikta ett stort tack till min handledare Susanna Renmarker för att hon gjort mitt deltagande i projektet möjligt. Dessutom riktas ett tack till Karin Assarsson från WSP Halmstad som försett mig med data och hjälpt mig komma in i projektet. Det har varit mycket intressant att arbeta med projektet samt få en inblick i hur WSP arbetar. Tack riktas även till Martin Larsson från WSP.

Jag vill även rikta ett stort tack till min ämnesgranskare Auli Niemi för hennes värdefulla expertis inom området. Jag vill dessutom rikta ett särskilt tack till Saba Jodaki från Institutionen för geovetenskaper vid Uppsala Universitet för all rådgivning och för det stöd hon gett mig under projektets gång.

Jag vill även tacka nära och kära för den stöttning jag fått under den här tiden, utan er hade det aldrig gått. Ni vet vilka ni är. Det har varit väldigt kul och lärorikt och jag hoppas att jag nu kliver ut i den riktiga världen väl förberedd!

Copyright © Julia Inkapööl och Institutionen för geovetenskaper; luft-, vatten- och landskapslära, Uppsala Universitet.

UPTEC W 17 013, ISSN 1401–5765

Publicerad digitalt vid Institutionen för geovetenskaper, Uppsala universitet, Uppsala, 2017

Populärvetenskaplig sammanfattning

Julia Inkapööl

Ett av Regeringens miljökvalitetsmål är att uppnå en giftfri miljö. Detta innebär att förekomsten av ämnen i miljön som skapats eller utvunnits av samhället ej bör utgöra ett hot mot människors hälsa eller den biologiska mångfalden samt att halterna av sådana förekommande ämnen bör vara nära noll med försumbar påverkan på människors hälsa och ekosystemet.

Ett sådant ämne är klorerade alifatiska kolväten, eller klorerade lösningsmedel, vilka har använts historiskt inom kemtvätt samt som avfettningsmedel inom industriella processer. Under senare år har negativ inverkan på människors hälsa kunnat påvisas då klorerade lösningsmedel påvisats vara toxiska samt att vissa former av klorerade lösningsmedel uppges orsaka olika former av cancer. Dessa egenskaper har medfört att flertalet klorerade lösningsmedel idag ej får brukas industriellt. Klorerade lösningsmedel har egenskaper vilka medför att ett mindre spill kan ge upphov till omfattande spridning genom mark, därav återfinnes klorerade lösningsmedel i marker underliggande lokaler där dessa lösningsmedel hanterats. Detta medför att det finns ett stort behov av att kartlägga utsträckningen av föroreningarnas utbredning genom mark inför riskbedömning.

I Himmelstalund, i Norrköping, har de klorerade lösningsmedlen perkloreten (PCE) samt trikloreten (TCE) hanterats då dessa använts i samband med produktion av elektronisk utrustning såsom tv- och radioapparater. Vid provtagning har halter av PCE och TCE samt deras nedbrytningsprodukter cis-1,2-dikloreten (cis-1,2-DCE) och vinylklorid (VC) detekterats i underliggande grundvattnet. Området är utpekade som riksintresse för kulturmiljö då ett hällristningsområde är beläget där, dessutom används området för rekreation vilket medför att människor vistas på området. Detta examensarbete syftade till att undersöka spridningens omfattning genom grundvattnet. För att genomföra detta gjordes initialt en litteraturstudie med avseende på grundvattenmodellering, transportmodellering samt av klorerade lösningsmedel för att skapa förståelse kring deras beteende i mark samt deras inverkan på människors hälsa.

Baserat på litteraturstudien och rådande geologiska och hydrologiska förhållanden i området togs sedan en grundvattenmodell i programmet MODFLOW fram, med vilken grundvattenflödet i området kunde modelleras. I MODFLOW finns flertalet tillvalsmoduler som kan användas baserat på vilken process som ska undersökas.

För att grundvattenmodellen ska vara platsspecifik måste den kalibreras. Detta innebar i det här fallet att grundvattennivåer erhållna från MODFLOW jämfördes med grundvattennivåer vilka uppmätts vid Whirlpool för att se huruvida de överensstämde med varandra. En grundvattenmodell beror av flertalet parametrar och för att undersöka hur några av dessa inverkar på den skapade grundvattenmodellen genomfördes en känslighetsanalys. I känslighetsanalysen undersöktes modellens beroende av en parameter genom att variera en parameter medan resterande hölls konstanta. De parametrar som undersöktes var för grundvattenmodellen hydraulisk konduktivitet, vilken beskriver en jords förmåga att släppa igenom eller leda en vätska, samt effektiv porositet, vilken beskriver den andel av hålrummen i marken genom vilka det kan ske strömning. Efter kalibrering och känslighetsanalys kunde det konstateras inom vilka intervall som modellen genererade grundvattennivåer vilka överensstämde med uppmätta nivåer vid Whirlpool.

I MODFLOW finns flertalet olika tillvalsmoduler som kan användas för att simulera olika händelseförlopp. För att simulera spridning och nedbrytning av klorerade lösningsmedel kan tillvalsmodulen RT3D användas, varefter föroreningsituationen efter 10, 30 samt efter 75 år kunde modelleras. Det kunde konstateras att varken PCE, TCE eller cis-1,2-DCE nådde det närliggande vattendraget Motala ström då de rörde sig maximalt 500 meter från industritomten. Det kunde ses att spridningen av VC var mer omfattande då föroreningen inom tio år nådde det närliggande vattendraget Motala ström med halter vilka översteg riktvärdena.

För att undersöka transportmodellens känslighet genomfördes en känslighetsanalys med avseende på de ämnesspecifika parametrarna adsorption, vilken beskriver ett ämnes förmåga att binda till jord, samt reaktionsparametrarna, vilka påverkar hur snabbt nedbrytningen sker. Dessa ämnesspecifika parametrar är olika för PCE, TCE, cis-1,2-DCE samt för VC och resultaten påvisade att spridningen skiljde sig åt mycket beroende av hur parametrarna ansattes. Det kunde ses att högre adsorption medförde att föroreningarna förblev kvar invid källzonen, vid Whirlpool, samt att lägre adsorption medförde att de blev mer rörliga genom grundvattnet och transporterades längre. Reaktionsparametrarna påverkade inte spridningen i någon större utsträckning.

För att undersöka tänkbara värsta scenarion undersöktes spridningen vid ansats av minimal adsorption, minimal nedbrytning samt maximal hydraulisk konduktivitet. Det kunde konstateras att spridningen skedde snabbare under dessa förhållanden, redan inom två år hade samtliga föreningar nått Motala ström. Det skulle göra att de kan spridas vidare med ytvattnet och förvärra föroreningsituationen avsevärt i närliggande område. Detta bedömdes som allvarligt då klorerade lösningsmedel är toxiska och har cancerogena egenskaper. Detta sammantaget med att marken brukas för rekreation innebär att situationen är allvarlig.

Då en så stor skillnad i transporttid kunde påvisas beroende av vilken hydraulisk konduktivitet samt vilka adsorptionsparametrar som ansattes, skulle det vara av stort intresse att mäta upp dessa parametrar i området i syfte att förbättra modellens tillförlitlighet. Det skulle även vara relevant att mäta upp grundvattennivåer i flertalet punkter i modellen i syfte att kalibrera modellen efter och förbättra dess tillförlitlighet.

Begrepp

CAH	Klorerade alifatiska kolväten
DCE	Dikloreten, nedbrytningsprodukt från TCE
DNAPL	Dense Non–Aqueous Phase Liquid, vätska vars densitet överskrider vattnets
GMS	Groundwater Modelling System, programvara innehållande olika gränssnitt för att modellera exempelvis grundvattenflöde
IRIS	U.S.EPA:s integrerade riskinformationssystem
KM	Känslig markanvändning, exempelvis om området används för bostäder
MIP	Membrane Interface Probe, metod för att provta jord, grundvatten och porgas med avseende på klorerade alifatiska kolväten
MKM	Mindre känslig markanvändning, exempelvis industri
NAPL	Non–Aqueous Phase Liquid
PCE	Tetrakloreten, klorerat lösningsmedel
RT3D	Reactive Transport in 3D, tillvalsmodul i MODFLOW för att simulera bland annat masstransport och sekventiell nedbrytning
SGF	Sveriges Geotekniska Förening
SGU	Sveriges Geologiska Undersökning
SMHI	Sveriges Metrologiska och Hydrologiska Institut
SVAR	Svenskt Vattenarkiv
TCE	Triklöreten, nedbrytningsprodukt från PCE
U.S.EPA	United States Environmental Protection Agency
U.S.G.S	United States Geological Survey
VC	Vinylklorid, nedbrytningsprodukt från DCE
VOC	Volatile Organic Compounds, flyktiga organiska föreningar
VISS	Vatteninformationssystem för Sverige

INNEHÅLLSFÖRTECKNING

1. INLEDNING	1
1.1 BAKGRUND OCH PROBLEMATIK	1
1.2 SYFTE, MÅL OCH FRÅGESTÄLLNINGAR	2
1.3 AVGRÄNSNINGAR	3
1.4 LITTERATURSTUDIE	3
2. TEORI	3
2.1 PRINCIPER FÖR GRUNDVATTENMODELLERING	3
2.1.1 Akviferparametrar	3
2.1.2 Darcys lag	7
2.1.3 Kontinuitetsprincipen	8
2.1.4 Ämnestransport	8
2.2 KLORERADE LÖSNINGSMEDEL	10
2.2.1 Användningsområdet	11
2.2.2 Nedbrytning	11
2.2.3 Fysikaliska och kemiska parametrar	12
2.2.4 Spridning och förekomstfaser	14
2.2.5 Toxicitet och hälsorisker	15
2.2.6 Riktvärden	16
3. METOD	17
3.1 INLEDNING	17
3.1.1 Områdesbeskrivning	17
3.1.2 Skapande av flödesmodell	17
3.1.3 Skapande av transportmodell	18
3.2 OMRÅDESBESKRIVNING	18
3.2.1 Platsbeskrivning	18
3.2.2 Historisk användning	19
3.2.3 Markanvändning	20
3.2.4 Avrinningsområde	21
3.2.5 Geologi	22
3.2.6 FÖRORENINGSSITUATION	25
3.3 MODELLER	26
3.3.1 MODFLOW	26
3.3.2 RT3D	29
4. RESULTAT	30
4.1 KONCEPTUELL GRUNDVATTENMODELL	30
4.1.1 Val av modelldomän	31
4.1.2 Randvillkor	32

4.1.3 Lager.....	33
4.1.4 Grundvattenbildning.....	35
4.2 KONCEPTUELL TRANSPORTMODELL	36
4.2.1 Föroreningssituation	36
4.2.2 Ansats av koncentration	38
4.2.3 Ansats av transport- och nedbrytningsparametrar	38
4.3 NUMERISK GRUNDVATTENMODELL.....	38
4.3.1 Randvillkor.....	39
4.3.2 Rutnät	39
4.4 KALIBRERING OCH KÄNSLIGHETSANALYS	41
4.4.1 Kalibrering	41
4.4.2 Känslighetsanalys av grundvattenmodell.....	41
4.4.3 Känslighetsanalys av transportmodell.....	42
4.4.4 Värsta scenario	43
4.5 GRUNDVATTENMODELLERING	43
4.5.1 Kalibrering	43
4.5.2 Känslighetsanalys.....	44
4.6 TRANSPORTMODELLERING	45
4.6.1 Känslighetsanalys.....	46
4.6.2 Föroreningsspridning efter 10, 30 samt 75 år	47
4.6.3 Värsta scenario	50
5. DISKUSSION	54
5.1 GRUNDVATTENMODELL.....	54
5.1.1 Osäkerheter.....	54
5.1.2 Känslighetsanalys.....	57
5.2 TRANSPORTMODELL.....	58
5.2.1 Osäkerheter.....	58
5.2.2 Känslighetsanalys.....	59
5.2.3 Spridning efter 10, 30 samt 75 år	60
5.2.4 Värsta scenario	62
6. SLUTSATSER	64
6.1 FORTSATT STUDIER.....	65
REFERENSER	66
APPENDIX	71
A. PROVPUNKTER.....	71
A.1 Grundvattennivåer.....	71
A.2 MIP-sondering	72
A.3 Brunnar och dricksvattentäkter	72

A.4 Halter i grundvatten peristaltisk pump	73
B. GRUNDVATTENNIVÅER.....	75
C. FÖRORENINGSHALTER	76
D. DEFORMATIONSZON	77
E. GRUNDVATTENMAGASIN	77
F. ÅRSAVDUNSTNING	78
G. POROSITET	78
H. K_{oc}	79
I. JORDDJUP.....	79
J. KÄNSLIGHETSANALYS GRUNDVATTENMODELL	80
K. KÄNSLIGHETSANALYS TRANSPORTMODELL	80
L. VÄRSTA SCENARIO	82

1. INLEDNING

1.1 BAKGRUND OCH PROBLEMATIK

Ett av Regeringens miljö kvalitetsmål är att uppnå en giftfri miljö. Detta innebär att förekomsten av ämnen i miljön som skapats eller utvunnits av samhället ej bör utgöra ett hot mot människors hälsa eller den biologiska mångfalden samt att halterna av sådana förekommande ämnen bör vara nära noll med försumbar påverkan på människors hälsa och ekosystem.

Dessutom ökar vattenbehovet i takt med urbanisering och ökning av population vilket leder till att förvaltning av vatten blivit en allt större utmaning, även i Sverige. Grundvatten är en viktig naturlig och ändlig resurs, en resurs vilken inte kan tas för given. I Sverige kan idag låga grundvattennivåer uppmätas i flertalet delar av landet vilket orsakar svårigheter vid vattenförsörjning både för hushåll med egen brunn samt för kommunala vattentäkter. Grundvatten är en värdefull resurs och det är av stor vikt att förvalta befintliga grundvattenakviferer samt skydda dessa från potentiella föroreningar.

Förekomst av föroreningar i grundvatten är ofta förknippat med inverkan på hälsa, ekonomi och miljö. En viktig aspekt av vattenförvaltning är kartläggning av föroreningars utbredning i den mättade zonen samt hantering av de grundvattenakviferer som förorenats. Svårigheter finns i att kartlägga en förorenings utbredning då den kan förekomma djupt i en markprofil och kräver således relativt omfattande mätserier för att påvisa utbredningen genom profilen. Dessutom är ofta förorenat grundvatten både lukt- och färglöst vilket försvårar detektion. Föroreningsplymer från klorerade lösningsmedel är särskilt svåra att avgränsa då de kan förekomma i flera faser såsom lösta i grundvatten, bundna till jord, som fri fas samt i porgas (Aral & Warren, 2011).

En sådan förorening är klorerade alifatiska kolväten eller klorerade lösningsmedel. Klorerade lösningsmedel är en grupp organiska föroreningar som uppmärksammas mycket på senare år på grund av deras toxiska och flyktiga egenskaper. Användningsområdet för klorerade lösningsmedel har främst varit inom industrin såsom lösnings- eller extraktionsmedel inom verkstadsindustri, inom elektronikindustri samt inom kemtvätt. Då klorerade lösningsmedlet når en markprofil kan de transporteras som fri fas genom jord ned till grundvatten och spridas ned djupt i profilen varifrån de kan transporteras vidare med grundvattnet och ge upphov till en föroreningsplym. Denna transport kan ske olika snabbt beroende av markens hydrauliska egenskaper. Nedbrytning av dessa ämnen sker långsamt vilket medför att toxiska föreningar och nedbrytningsprodukter ackumuleras i marken där de i samband med exponering, såsom inandning av gas eller intag av dricksvatten, kan vara hälsofarliga. Då föreningarna är spridningsbenägna medför det svårigheter i att avgränsa källzoner, spridningsplymer och spridningsvägar (Gustafsson & Refsgaard, 2007).

För att förstå spridningen av klorerade lösningsmedel genom grundvatten är det viktigt att dels ha kunskap kring transportprocesserna för grundvattenflöde, dels att ha förståelse för de processer vilka påverkar ämnestransporten. Matematiska modeller kan sedan användas för att visualisera och användas som underlag inför riskbedömning (Aral & Warren, 2011). En sådan modell är MODFLOW, en tredimensionell modell som togs fram 1984 av U.S.G.S och kan användas för att modellera grundvattenflöde genom en

akvifer genom att lösa flödesekvationen för grundvatten. Fördelen med MODFLOW är att det är en användarvänlig numerisk modell vilken kan användas för att anpassa utefter platsspecifika akviferförhållanden då den tar hänsyn till flertalet hydrauliska parametrar (Harbaugh, 2005).

I syfte att undersöka spridning och naturlig nedbrytning av klorerade lösningsmedel har tillvalsmodulen *Reactive Transport with GMS*, RT3D, använts framgångsrikt i flertalet projekt (Clement, 1997). Framtagandet av en transportmodell kräver att en flödesmodell tagits fram varefter ämnesspecifika egenskaper för de klorerade lösningsmedlen samt källzoner kan definieras i RT3D för att simulera transport och nedbrytning genom den mättade zonen (Bailey et al., 2012).

I kvarteret Strömbrytaren i Norrköping har industriell produktion bedrivits sedan tidigt 1940-tal med tillverkning av bland annat mikrovågsugnar, tv- samt radioapparater. I samband med produktion har bland annat de klorerade lösningsmedlen tetrakloreten (PCE) och trikloreten (TCE) hanterats i lokalen (Nordström, 2014) och det har vid provtagning detekterats halter av dessa samt deras nedbrytningsprodukter cis-1,2-dikloreten (cis-1,2-DCE) samt vinylklorid (VC) i jord, grundvatten samt porluft. Med anledning av detta är uppdraget med detta examensarbete att kartlägga utbredning av klorerade lösningsmedel i grundvatten i framtiden inför riskbedömning, vilket gjordes i samarbete med WSP Environmental.

1.2 SYFTE, MÅL OCH FRÅGESTÄLLNINGAR

Detta examensarbete hade som syfte att kartlägga framtida föroreningsituationen i grundvattnet kring en industritomt i Norrköping. På industritomten, Whirlpool, har halter av klorerade alifatiska kolväten detekterats och utbredningen av föroreningsplymen i grundvatten skulle kartläggas genom att framta en platsspecifik grundvattenmodell varefter transportmodellering utfördes. Målet var att genom modellering kunna skapa större förståelse kring de klorerade lösningsmedlens utbredning i grundvatten om 10, 30 respektive om 75 år samt tjäna som underlag för framtida riskbedömning.

I samband med framtagande av en platsspecifik grundvattenmodell samt simulering av föroreningstransport i området kommer förslag till fortsatta studier, vilka skulle öka modellens tillförlitlighet, tas fram.

Relevanta frågeställningar innefattar:

- I. Hur ser grundvattenströmningen ut i området och hur kan det visualiseras?
- II. Hur ser föroreningsituationen ut i grundvattnet idag?
- III. Hur omfattande kommer utbredningen att vara om 10, 30 respektive om 75 år?
- IV. Hur förhåller sig uppmätta halter av klorerade lösningsmedel till riktvärden, nu och i simulerade scenarier?
- V. Hur skulle en framtagen grundvattenmodell kunna göras mer platsspecifik och tillförlitlig?

1.3 AVGRÄNSNINGAR

För att besvara relevanta frågeställningar inom den utsatta tiden gjordes avgränsningar. Då klorerade lösningsmedel är föreningar som kan finnas i olika medier såsom bunden till jord, löst i markvatten samt i gasfas innebär detta att spridningen är komplex. Övergång sker mellan de olika faserna vilket innebär att förorening bunden till jord eller i gasfas i den mättade zonen kan lösas i grundvatten successivt och därigenom öka halterna i grundvattnet. För att ta hänsyn till detta kan en flerfasmodell användas. Vilket skulle öka tillförlitligheten och ta hänsyn till fler parametrar vilka påverkar spridningen genom grundvattnet. Användandet med sådan modellering är att det är mer avancerat och tidskrävande och det bedömdes efter övervägande att den utsatta tiden inte var tillräcklig för att ta fram en sådan flerfasmodell. Fokus lades istället på att ta fram en tvåfasmodell i MODFLOW vilken modellerar spridning endast genom den mättade zonen.

Ytterligare en avgränsning som gjordes var att endast undersöka spridning av de klorerade lösningsmedlen PCE, TCE, cis-1,2-DCE samt VC. Det finns fler former av klorerade lösningsmedel men dessa fyra bedömdes som intressanta att undersöka då de är vanligt förekommande samt att högre halter av dessa detekterats vid provtagning.

1.4 LITTERATURSTUDIE

För att skapa en tillförlitlig grundvattenmodell genomfördes initialt en litteraturstudie kring konceptuell grundvattenmodellering, kring programvaran *Ground Water Modelling System*, GMS, MODFLOW samt transportmodulen RT3D. Information insamlades kring klorerade lösningsmedel för att erhålla större kännedom kring deras kemiska och fysikaliska egenskaper, deras spridningsegenskaper, hur de bryts ned samt deras humantoxiska inverkan. Detta undersöktes i syfte att öka förståelsen kring klorerade lösningsmedels påverkan på människors hälsa och markmiljö, samt utgjorde indata i transportmodellen.

2. TEORI

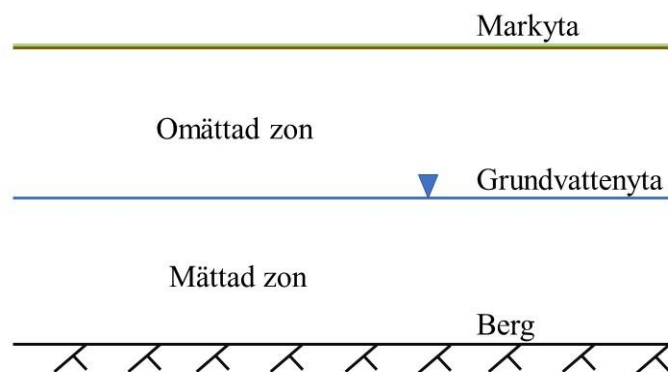
För att kartlägga utbredning av en förorening i den mättade zonen krävs förståelse kring hur grundvattenflödet sker i området. Dessutom krävs kunskap kring klorerade lösningsmedel och deras egenskaper, vilket beskrivs i följande avsnitt.

2.1 PRINCIPER FÖR GRUNDVATTENMODELLERING

För att förstå bakgrunden till hur grundvattenflöde kan visualiseras presenteras i följande avsnitt de principer utefter vilka flöde sker samt vilka parametrar som påverkar mättad transport.

2.1.1 Akviferparametrar

Med en akvifer avses en geologisk formation som innehåller vatten och tillåter ett genomgående vattenflöde. Markprofilen kan delas in i en mättad zon, där porerna är fyllda med vatten, och en omättad zon, där porerna är fyllda med både vatten och gas (Bear, 1972). I figur 1 ses en markprofil indelad i mättad och omättad zon. Vid framtagandet av en grundvattenmodell är det relevant att beakta de hydrauliska parametrar som inverkar på grundvattnets flöde genom den mättade zonen. (Gustafsson et al., 2007).



Figur 1 Illustration över den mättade och den omättade zonen i en markprofil.

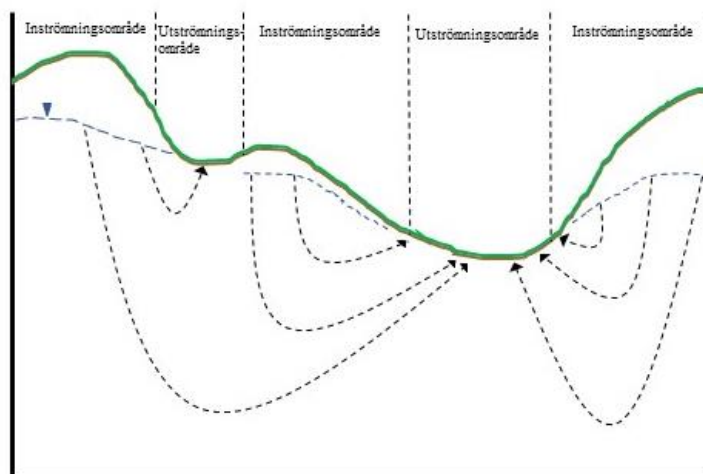
Topografi

Landskapet är indelat i avrinningsområden vilka avgränsas av vattendelare. Då nederbörd faller innanför vattendelaren bidrar denna till ackumulation av avrinningsområdets vattenmagasin. Ett områdes topografi är av stor vikt vid framtagande av grundvattenmodell då topografin delger information kring i vilken riktning grundvatten strömmar samt hur stor infiltrationen till den mättade zonen är (Knutsson & Morfeldt, 1995).

Det finns både ytvattendelare och grundvattendelare. Ytvattendelare är synliga i terrängen medan grundvattendelaren ofta är belägen under markytan. I Sverige överensstämmer yt- och grundvattendelaren ofta med varandra vilket innebär att hänsyn inte behöver tas till skillnaden enligt Rodhe & Grip. (2016).

Grundvattenbildning

Tillskott av grundvatten till den mättade zonen sker genom infiltration och perkolation (Wiedemeier et al., 1998). De delar av ett landskap där grundvattenbildning sker kallas för ett inströmningsområde, till skillnad från ett utströmningsområde där grundvatten istället strömmar från den mättade zonen mot markytan. Inströmningsområden är ofta belägna högt topografiskt sett medan utströmningsområden är lågt belägna. Flödets strömlinjer, vilka ses konceptuellt i figur 2, tenderar att divergera från inströmningsområdena mot utströmningsområdena (Fetter, 1980).



Figur 2 Konceptuell illustration över in- samt utströmningsområden.

Det finns svårigheter i att bestämma grundvattenbildning då den beror av flertalet olika parametrar (Rodhe et al., 2006), såsom jordens vattenhållande förmåga, nederbörds mängd och temperatur (Naturvårdsverket, 2009). Ytterligare en faktor som påverkar grundvattenbildningen är markanvändningen i området. I områden med bar mark är perkolationen stor vilket medför lågt skydd mot föroreningar, om marken är hårdgjord eller om berget är ytligt kan grundvattnet skyddas från föroreningar beroende av kemiska och fysikaliska egenskaper hos föroreningen i fråga (Peng et al., 2004).

I Naturvårdsverkets rapport 5976 *Riktvärden för förorenad mark* presenteras den genomsnittliga grundvattenbildningen 100 mm/år vilken tar hänsyn till ytavrinning. Genom att använda erhållna data över nederbörd och avdunstning kan grundvattenbildning i ett område beräknas (Naturvårdsverket, 2009), vilka presenteras senare i rapporten.

Jordart och jordlagerföljd

Vilka jordarter som finns i en markprofil påverkar grundvattnets strömningsskapacitet genom den mättade zonen (Salomonsson, 2015). Vanliga jordarter innefattar lera, silt och sand. Lera består av små kornfraktioner vilka har god vattenhållande förmåga vilket medför att vattnets transport sker långsamt. Siltjordar innehåller större kornfraktioner än ler, men även de kan hålla vatten väl. Sand är avsevärt mer genomsläpplig jordart genom vilken vatten kan strömma hastigt (Larsson, 2008).

För att förstå hur geologin i ett område uppkommit är det viktigt att beakta de processer genom vilka jordarten eller formationen uppkommit för att dra slutsatser om jordlayersammansättningen. Ett exempel på en sådan process är avsättningen av isälvsediment där grövre material avsätts tidigare än finare material. Avsättningarna kan ses som terrasser i landskapet där de grövre partiklarna ansamlats i åsarnas kärnor, medan finare material, såsom silt och lera befinner sig på större avstånd från åsen (Nilsson, 2003).

För att undersöka vilka jordarter som förekommer djupare i en markprofil är kartläggning av jordlagerföljd viktigt. Information kring jordlagerföljd är även väsentligt vid tilldelning av hydrauliska gränser och ansättandet av randvillkor i modellen (Ahlgren et al., 2016). Jordlagerföljden kan baseras på sonderingar och i de fall där sondering saknas kan en geologisk karta användas där det ytligaste lagrets egenskaper kan antas vara konstanta genom profilen (Salomonsson, 2015).

Hydraulisk konduktivitet

Hydraulisk konduktivitet beskriver en jords förmåga att släppa igenom eller leda en vätska. Den hydrauliska konduktiviteten beror av egenskaper hos det porösa mediet såsom effektiv porositet, markstruktur, jordlagerföljd samt hur mycket innesluten luft systemet håller (Knutsson & Morfeldt, 1995). Den hydrauliska konduktiviteten är den parameter som är av störst vikt då flöde genom den mättade zonen ska beskrivas (Wiedemeier et al., 1998).

Den hydrauliska konduktiviteten kan variera rumsligt, i x -, y - eller z -planet, beroende av markprofilens egenskaper. Den hydrauliska konduktiviteten kan antingen vara beroende av riktning, då anisotrop, eller vara oberoende av riktningen, då isotrop (Bear, 1972). Om akviferens bottenyta är svår att definiera, vilket kan vara fallet då terrängen är

oregelbunden, får en anisotropifaktor antas. Värdet för anisotropi baseras vanligen på en bedömning av kontraster i hydraulisk konduktivitet i olika lager (Johnson et al., 2006).

Hydraulisk konduktivitet varierar som nämnt beroende av jordart, i tabell 1 redovisas intervall över minimal och maximal hydraulisk konduktivitet.

Tabell 1 Hydraulisk konduktivitet för olika relevanta jordarter.

Material	K [m/s] ¹	K [m/s] ²	K [m/s] ³	K [m/s] ⁴
Fingrus	10 ⁻¹ –10 ⁻³	–	–	10 ⁻¹ –10 ⁻³
Grovsand	10 ⁻² –10 ⁻⁴	9·10 ⁻³ – 6·10 ⁻⁶	10 ⁻³ – 10 ⁻⁶	10 ⁻² –10 ⁻⁴
Mellansand	10 ⁻³ –10 ⁻⁵	9·10 ⁻⁴ – 5·10 ⁻⁵	10 ⁻³ – 10 ⁻⁶	10 ⁻³ –10 ⁻⁵
Finsand	10 ⁻⁴ –10 ⁻⁶	2·10 ⁻⁴ – 2·10 ⁻²	10 ⁻³ – 10 ⁻⁶	10 ⁻⁴ –10 ⁻⁶
Silt	10 ⁻⁵ –10 ⁻⁹	10 ⁻⁵ – 2·10 ⁻⁹	10 ⁻⁵ – 10 ⁻⁹	10 ⁻⁵ –10 ⁻⁷
Morän	10 ⁻⁶ –10 ⁻⁹	–	–	–
Grusig morän	–	–	–	10 ⁻⁵ –10 ⁻⁷
Sandig morän	–	–	–	10 ⁻⁶ –10 ⁻⁸
Siltig morän	–	–	–	10 ⁻⁷ –10 ⁻⁹
Lera	10 ⁻⁸ –10 ⁻¹⁰	10 ⁻⁹ – 4,7·10 ⁻¹¹	10 ⁻⁸ – 10 ⁻¹²	<10 ⁻⁹

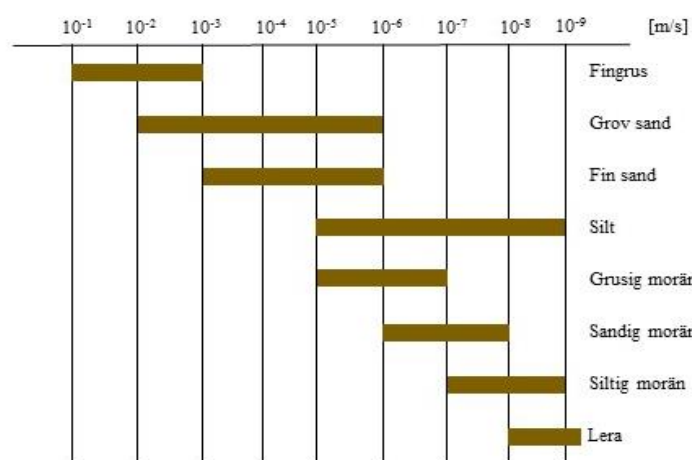
¹(Espeby et al., 1998) (Knutsson & Morfeldt, 1995)

²(Domenico&Schwartz, 1998)

³(Andersson–Sköld et al., 2005)

⁴(Larsson, 2008)

I figur 3 ses intervall för hydraulisk konduktivitet baserad på tabell 1.



Figur 3 Hydraulisk konduktivitet för några olika jordarter enligt tabell 1.

Hydraulisk konduktivitet i en mark kan mätas genom att utföra slugtester eller andra pumptester. Tolkning av de uppmätta halterna bör betraktas med viss osäkerhet då det uppmätta värdet i en punkt oftast inte är representativt för samtliga punkter inom den numeriska modelldomänen. Då hydraulisk konduktivitet inte finns uppmätt kan litteraturvärden ansättas för motsvarande jordarter (Johnson et al., 2006).

Porositet

Den totala porositeten anger hur stor andel av markens totala volym som består av håligheter, genom vilka markvatten kan flöda, porositeten påverkar därigenom grundvattnets strömning genom den mättade zonen. Porositeten varierar beroende av

jordart och ökar generellt med minskad kornstorlek (Knutsson & Morfeldt, 1995). I appendix G, tabell G1, ses en sammanställning av porositet för olika jordarter.

Baserat på den totala porositeten kan den effektiva porositeten beräknas, vilken beskriver den andel av hålrummen genom vilka det sker strömning. Generellt är den effektiva porositeten mindre än den totala porositeten då det vatten som finns bundet till partikel- och sprickytor eller i porer inte deltar i flödet (Knutsson & Morfeldt, 1995). I grövre jordar upptar det kapillära lagret på porernas insida en liten andel av det totala porutrymmet vilket medför att vatten inte binds lika lätt, därav kan ett större genomflöde ske och den effektiva porositeten är vanligtvis lik den totala porositeten i storlek (Horton et al., 1988). I tabell 2 ses en sammanställning över effektiv porositet för grövre material.

Tabell 2 Effektiv porositet för grus och sand samt för morän.

Material	Effektiv porositet [%] ¹	Effektiv porositet [%] ²	Effektiv porositet [%] ³
Grus – Sand	5–20	25	–
Morän	1 – 10		4

¹(Gustafsson et al., 2007)

²(Horton & Bense, 2014)

³(Horton et al., 1988)

Ett högre värde på hydraulisk konduktivitet kan även medföra att infiltrationen till grundvattenzonen blir större (Wiedemeier et al., 1998), vilket innebär att en mark med hög effektiv porositet tillåter att föroreningstransport generellt kan ske snabbare (Horton & Bense, 2014). Porositet kan bestämmas i fält genom att utföra tracer-tester och i de fall där värden för porositet saknas kan litteraturvärden för olika jordarter ansättas (Johnson et al., 2006).

2.1.2 Darcys lag

För att beskriva grundvattnets transport genom porer, sprickor och håligheter i den mättade zonen används Darcys lag (Fetter, 1980). Från Darcys lag kan vattnets medelströmningshastigheten beräknas då grundvattenflödet är känt (Clement, 1997). Hastighetsvektorn, q , kan variera i x -, y - och z -led och för att beskriva grundvattenströmning i naturen antas ofta att marken är homogen samt att den hydrauliska konduktiviteten och grundvattenflödet är konstant i samtliga dimensioner. Det beräknade flödet är negativt vilket anger att markvattnet strömmar i negativ riktning, från högre mot lägre potential. I ekvation (1) ses Darcys lag baserad på teori från Knutsson & Morfeldt. (1995).

$$q = -\frac{Q}{A} = -k \frac{dh}{dL} \quad (1)$$

Där	$q =$	Darcy-hastighet	[m/s]
	$Q =$	vätskans flöde	[m ³ /s]
	$A =$	area genomströmning i porer, sprickor, fast material	[m ²]
	$k =$	hydraulisk konduktivitet	[m/s]
	$h =$	potential	[m]
	$L =$	sträcka	[m]
	$dh/dL =$	hydraulisk gradient	[–]

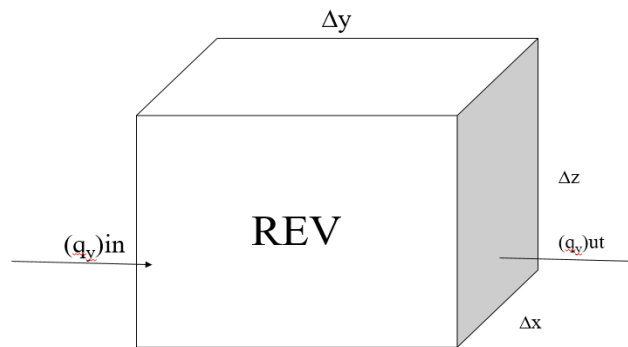
Den horisontella hydrauliska gradienten, dh/dL , påverkar hastigheten med vilken grundvattnet strömmar och kan beräknas enligt ekvation (2) nedan.

$$\frac{dh}{dL} = \frac{h_2 - h_1}{L} \quad (2)$$

Grundvattennivån fluktuerar under året beroende av jordens fuktighet, mängden dränerbart vatten, nederbörd, porvattentryck samt infiltrationsförmåga (Knutsson & Morfeldt, 1995) vilket påverkar den hydrauliska gradienten. Det är därför viktigt att ha täckande underlag kring grundvattennivåer under året för att bestämma en representativ hydraulisk gradient (Wiedemeier et al., 1998).

2.1.3 Kontinuitetsprincipen

Under stationära förhållanden antas dels att den hydrauliska potentialen är konstant över tid samt att volymen vatten som strömmar in är lika stor som den som strömmar ut. För att beskriva detta används kontinuitetsprincipen (Knutsson & Morfeldt, 1995). Två förenklingar som vanligen görs är att vattnet är inkompressibelt samt att inget vatten avlägsnas från enhetsvolymen, REV. I figur 4 ses en enhetsvolym där kubens sidor är Δx , Δy och Δz och q_y motsvarar flödet in respektive ut. Massbalans kan beräknas genom att addera bidragen från samtliga flödeskomponenter. Nettoskillnaden mellan inflöde och utflöde motsvarar den volym vatten som magasineras.



Figur 4 Massflöde genom en enhetsvolym.

2.1.4 Ämnestransport

En förorening kan transporteras genom ett grundvattensystem som lösta joner, som komplex, partikulärt bundna eller som fri fas. Transporten drivs av tryckpotentialskillnader eller koncentrationsgradienter i systemet där spridning sker från högre mot lägre tryck eller koncentration (Gunnemyr, 2007). Masstransporten sker på olika vis genom markprofilen beroende av om den sker genom den mättade eller omättade zonen (Gustafsson et al., 2007), då fokus ligger på grundvattenmodellering fokuseras här på spridning genom den mättade zonen.

Föroreningstransporten i den mättade zonen sker generellt långsammare än grundvattnets flödes hastighet då processer såsom utspädning, fastläggning till partiklar och organiskt material samt biologisk nedbrytning reducerar hastigheten hos masstransporten (Andersson-Sköld et al., 2005).

Föroreningstransport i en dimension kan beskrivas matematiskt med ekvation (3) efter Johnson et al. (2006) där hänsyn tas till dispersion, diffusion, advektion, omblandning samt kemiska reaktioner såsom nedbrytning.

koncentrationsförändring + adsorption = dispersion – advektion + omblandning + kemiska reaktioner

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial C_k}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C_k}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial (v_i C_k)}{\partial x_i} + \frac{q_s}{\theta} C_{s,k} + \frac{1}{\theta} \sum r_k \quad (3)$$

Där	$C_k =$	koncentration av komponent k	[mol/m ³]
	$t =$	tid	[s]
	$D_{ij} =$	hydrodynamisk dispersionskoefficient	[m ² /s]
	$x_i =$	avstånd längs med axel	[m]
	$v_i =$	porvattenhastighet	[m/s]
	$q_s =$	volymetrisk flödes hastighet	[m ³ /s]
	$C_{s,k} =$	koncentration vid omblandning	[mol/m ³]
	$\theta =$	effektiv porositet	[-]
	$\rho =$	bulkdensitet	[mol/m ³]
	$C_k =$	koncentration i fast fas	[mol/m ³]
	$r_k =$	reaktionstermer	[mol/m ³ s]

Advektion

Förflyttning av föreningar i grundvatten med grundvattnets hastighet beskrivs av advektion (Fetter, 1980). Den advektiva transporten beror av grundvattenhastigheten mellan jordpartiklar och påverkar hur snabbt en förorening transporteras till grundvattenzonen (Wiedemeier et al., 1998). Genom att bestämma advektion kan en förorenings transporttid bestämmas (Bedient et al., 1994). Advektion påverkas av rådande tryckgradienter, hydraulisk konduktivitet samt effektiv porositet (Gustafsson et al., 2007) och beskrivs av ekvation (4) av Bedient et al. (1994).

$$\bar{v} = \frac{K}{n_e} \frac{dh}{dL} \quad (4)$$

Där	\bar{v}	medelhastighet för partikel	[m/s]
	K	hydraulisk konduktivitet	[m/s]
	n_e	effektiv porositet	[-]
	dh/dl	hydraulisk gradient	[-]

Hydrodynamisk dispersion

Spridning av lösta ämnen horisontellt och vertikalt kan beskrivas med hydrodynamisk dispersion. Hydrodynamisk dispersion påverkas av markens tortuositet, tillgängliga flödesvägar för de lösta ämnena (Fetter, 1980), den vätska genom vilken flödet sker, markens temperatur, de lösta ämnets egenskaper (Bedient, 1994) samt av markens hydrauliska konduktivitet (Andersen, 1984). Hydrodynamisk dispersion används som ett gemensamt namn för mekanisk dispersion och molekylär diffusion (Wiedemeier et al., 1998) då processerna ofta är svåra att särskilja.

Molekylär diffusion orsakas av att en koncentrationsgradient uppkommit där transport sker från högre mot lägre koncentration (Bedient, 1994). Molekylär diffusion orsakar utspädning i samtliga riktningar och är ofta en faktor i ett system då grundvattnets hastighet är låg (Wiedemeier et al. 1998) såsom i lerlager.

Mekanisk dispersion beskriver hur en förening sprids i ett poröst medium genom omblandning i longitudinell (x) samt i transversell (y) riktning. Den longitudinella spridningen är oftast större än den transversella (Bedient, 1994).

Adsorption

Adsorption är en annan process som påverkar massreduktion av organiska föroreningar, då mängden löst förorening minskar i samband med att mer förorening fastläggs till jord (Wiedemeier et al., 1998). Adsorption är en samlingsbeteckning vilken beror av jonbyte, ytkomplexbildning samt hydrofob adsorption. Vid tillsats av ett opolärt ämne till en markprofil, löses de i låg utsträckning i markvattnet utan tenderar istället binda till jordpartiklar (Espeby & Gustafsson, 1998).

Adsorption kan beskrivas med ett ämnes K_d -värde vilket beskriver fördelningen mellan jord och vatten (Wiedemeier et al., 1998). K_d påverkar hur stor massa av en förorening som kan lagras i en markprofil (Lu et al., 2011) där ett högre K_d -värde indikerar större potential för adsorption och därigenom lägre spridningskapacitet (Espeby & Gustafsson, 1998). Adsorption kan beskrivas med Freundlich sorptionsmodell enligt ekvation (5) om antalet sorptionsytor är stort relativt mängden förorening enligt (Lu et al. 2011).

$$K_d = \frac{C_a}{C_l} \quad (5)$$

Där	$K_d =$	fördelningskoefficienten jord och vatten [ml/g]
	$C_a =$	totalhalt förorening [mg/g]
	$C_l =$	löst totalkoncentration [mg/ml]

Ett ämnes K_d -värde kan således bestämmas om totalhalten förorening är känd samt den lösta totalkoncentrationen.

Nedbrytning

Reducering av föroreningar sker även genom nedbrytning. Nedbrytning av föroreningar i en dimension kan beskrivas genom att använda ekvationen för ämnestransport, ekvation (3) samt ta hänsyn till nedbrytning, adsorption och retardation. I ekvation (6) beskrivs denna nedbrytning efter Wiedemeier et al. (1998).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{D_x}{R} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{v_x}{R} \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C \quad (6)$$

Där	$\lambda =$	första ordningen nedbrytningshastighet [s ⁻¹]
	$C =$	föroreningskoncentration [mol]
	$R =$	retardationskoefficient [-]
	$t =$	tid [s]
	$D_x =$	hydrodynamisk dispersion [m ² s ⁻²]
	$v_x =$	transporthastighet i x-riktning [m ³ s ⁻¹]
	$x =$	flödesväg [m]

2.2 KLORERADE LÖSNINGSMEDEL

Inför transportmodelleringen krävs information kring klorerade lösningsmedel kemiska och fysikaliska egenskaper. Det är även relevant för att förstå mer om klorerade lösningsmedels beteende i mark samt vilken inverkan de har på människors hälsa i samband med exponering. I detta avsnitt presenteras denna information mer ingående.

2.2.1 Användningsområdet

Klorerade lösningsmedel, eller klorerade alifatiska kolväten (CAH), har egenskaper vilka gör dem lämpliga att använda som avfettningsmedel, som lösningsmedel, som kemtvättvätska samt för andra industriella ändamål. (Kemikalieinspektionen, 2016a). Sedan 1920-talet har klorerade lösningsmedel brukats industriellt och de former av klorerade lösningsmedel som brukats är främst PCE och TCE.

PCE har historiskt använts inom textiltvätt, industriell avfettning samt inom elektronikindustrin (Englöv et al., 2007). 1933 initierades konsumtionen av PCE inom kemtvätt vilket dominerade industrin då det betraktades som ett gynnsamt alternativ med bra tvättande egenskaper såsom att det var stabilt, relativt billigt samt ansågs ha låg toxicitet (Morrison, 2013).

TCE är dels en nedbrytningsprodukt av PCE men det har även använts som primär kemikalie inom stål- och verkstadsindustrin, avfettning av metall samt inom kemtvätsindustrin (SGF, 2012).

2.2.2 Nedbrytning

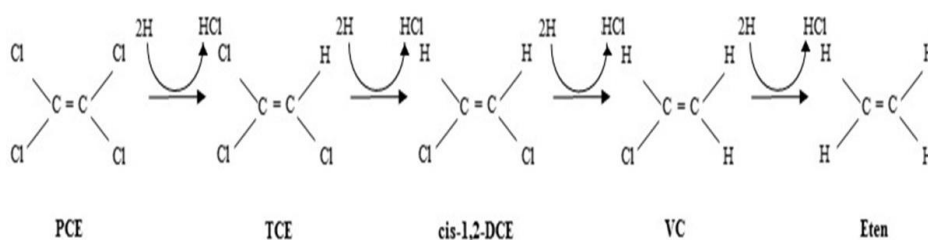
Klorerade lösningsmedel bryts ned långsamt i miljön vilket innebär att de förblir kvar i markmiljön långt efter att kontamination skett (Johnson, 1992). Nedbrytningen kan ske biologiskt, genom reduktion eller oxidation, eller abiotiskt. Vanligtvis är abiotiska processer mer relevanta vid nedbrytning av kloreter, ej för kloreter såsom PCE och dess nedbrytningsprodukter, därav beskrivs inte denna process närmare (Englöv et al., 2007).

Mikrobiell biologisk nedbrytning

Anaerob reduktiv deklorering

Under anaeroba förhållanden bryts PCE och TCE ned till olika isomerer av dikloreten (DCE) som bryts ned till vinylklorid (VC) och slutligen till eten. Detta innebär att även dessa ämnen kan återfinnas i mark och grundvatten där klorerade lösningsmedel hanterats (Johnson & Truex, 2006).

Nedbrytning sker främst under anaeroba förhållanden och flertalet av de reaktioner som sker är reducerande. För att uppnå reducerande förhållanden krävs att elektrondonatorer samt bakterier finns tillgängliga (Ferguson & Pietari, 2000). Direkt reduktiv deklorering är den dominerande nedbrytningsprocessen för klorerade lösningsmedel och innebär att kloratomer i kolvätenas struktur ersätts med väteatomer (Englöv et al., 2007). Nedbrytningen ses i figur 5.



Figur 5 Nedbrytning av PCE till TCE, cis-1,2-DCE, VC och slutligen till eten vilket sker genom anaerob reduktiv deklorering (Johnson & Truex, 2006).

DCE kan uppstå i tre olika isomerer, 1,1-DCE, cis-1,2-DCE samt i trans-1,2-DCE, beroende på rådande förhållanden. Den vanligaste förekommande isomeren är dock cis-1,2-DCE (Sims et al., 1991). Därmed kommer fokus ligga på denna isomer. Vid mikrobiell nedbrytning av klorerade alifatiska kolväten kan mikrober utvinna energi ur redoxreaktioner (Sims et al., 1991). Nedbrytningen kan sedan fortgå så länge det finns tillgängliga elektronondonatorer att tillgå. I varje nedbrytningssteg skapas en mer reducerad nedbrytningsprodukt vilket innebär att nedbrytningen går långsammare allt eftersom antalet kloratomer minskar. Processen är dominerande för högklorerade CAH:er som PCE och TCE eftersom de är de högst oxiderade föreningarna och därav mest gynnsamma för mikroberna att reducera (Azadpour-Keeley et. al, 1999).

Faktorer som påverkar mikroberna i en population vid naturlig nedbrytning är pH, temperatur samt osmopotential. Beroende av dessa förhållanden kan alifatiska kolväten agera antingen elektronondonator eller elektronacceptor för mikroberna (Azadpour-Keeley et. al, 1999).

Aerob och anaerob oxidation

Generellt sett är högre klorerade etener, såsom PCE och TCE, inte troliga att agera elektronondonator eller substrat i mikrobiella nedbrytningsreaktioner då de högre klorerade etenerna tenderar vara mer oxiderade än många föreningar som finns naturligt i grundvattensystem. Lägre klorerade etener som DCE och VC kan dock enligt studier brytas ned genom aerob oxidation (Wiedemeier et al., 1998).

Anaerob oxidation är en annan nedbrytningsprocess som vanligtvis inte dominerar i ett grundvattensystem vid nedbrytning av högklorerade alifatiska kolväten. Denna typ av nedbrytning har dock visat sig fungera vid nedbrytning av DCE och VC (Wiedemeier et al., 1998; Englöv et al., 2007).

2.2.3 Fysikaliska och kemiska parametrar

Klorerade lösningsmedel är föreningar med en eller flera kloratomer i sin struktur där en eller flera väteatomer är utbytta mot kloratomer. Klorerade lösningsmedel är Dense Non-Aqueous Phase Liquids (DNAPL) vilket innebär att de har en densitet vilken överstiger vattnets (Johnson & Truex, 2006). Ämnesspecifika egenskaper för PCE, TCE, den vanligaste isomeren av DCE, cis-1,2-DCE, samt VC ses i tabell 3.

Tabell 3 Fysikaliska och kemiska egenskaper för klorerade lösningsmedel (Johnson & Truex, 2006).

Ämne	Fullständigt namn	Kemisk formel	CAS-nummer	Molekylvikt [g/mol]	Densitet [g/ml]
PCE	tetrakloreten	$\text{CCl}_2=\text{CCl}_2$	127-18-4	165,83	1,62
TCE	trikloreten	$\text{CHCl}=\text{CCl}_2$	79-01-6	131,39	1,46
cis-1,2-DCE	dikloreten	$\text{CHCl}=\text{CHCl}$	156-59-2	96,94	1,28
VC	vinylklorid	$\text{CH}_2=\text{CHCl}$	75-01-4	62,50	gas

Löslighet

Klorerade lösningsmedel är vanligtvis svårösliga i vatten där de hydrofoba egenskaperna är korrelerade till antalet halogener i ämnets struktur (Englöv et al., 2007). Lösligheten varierar beroende av faktorer som temperatur och salinitet, där en ökad koncentration av

salt minskar lösligheten (Cwierty & Scherer, 2010). I tabell 4 ses en sammanställning över löslighet för aktuella klorerade lösningsmedel.

Tabell 4 Löslighet för PCE, TCE, cis-1,2-DCE samt VC (Englöv et al., 2007).

Ämne	PCE	TCE	Cis-1,2-DCE	VC
Löslighet [mg/l]	150	1100	3500	1100

K_d

Klorerade lösningsmedel är som nämnt hydrofoba och opolära ämnen (Lu et al., 2011) vilket medför att de kan bindas till jord (SGF, 2012). Fördelningskoefficienten eller adsorptionsfaktorn, K_d , beskriver ett ämnes benägenhet att binda till jord eller vatten där ett högre K_d -värde indikerar att ämnet binder starkare till marken vilket medför att utlakningen blir lägre. I tabell 5 ses en sammanställning av K_d -värden för aktuella föreningar.

Tabell 5 K_d -värden för PCE, TCE, cis-1,2-DCE respektive VC.

Förening	K_d [m ³ /kg] ¹	K_d [m ³ /kg] ²	K_d [m ³ /kg] ³
PCE	$8,4 \cdot 10^{-4} - 24,5 \cdot 10^{-4}$	$1,4 \cdot 10^{-7}$	$4,18 \cdot 10^{-9}$
TCE	$6,2 \cdot 10^{-4} - 9,6 \cdot 10^{-4}$	$5,8 \cdot 10^{-5}$	$2,14 \cdot 10^{-9}$
cis-1,2-DCE	$1,7 \cdot 10^{-4} - 8,2 \cdot 10^{-4}$	$5,2 \cdot 10^{-5}$	$1,3 \cdot 10^{-9}$
VC	$1,2 \cdot 10^{-4} - 2,4 \cdot 10^{-4}$	–	$8 \cdot 10^{-12}$

¹(Lu et al., 2011)

²(Quiot et al., 2014)

³(Wiedemeier et al., 1996).

* K_d beräknad utifrån K_{oc} och f_{oc} vilka ses i appendix H, tabell H1.

Flyktighet

Kännetecknande för klorerade lösningsmedel är deras flyktighet. De tillhör gruppen *volatile organic compounds*, VOC, vilket innebär att de är lättflyktiga ämnen som lätt kan evaporera från den mättade till den omättade zonen (Englöv et al., 2007). Ett ämnes flyktighet kan undersökas genom att betrakta dess ångtryck, där ett högre ångtryck indikerar högre flyktighet. Den höga flyktigheten medför svårigheter vid provtagning då VOC gärna avgår till luft i samband med provtagning.

Reaktionsparametrar

För att beskriva nedbrytning av klorerade lösningsmedel används reaktionsparametrar, vilka är ämnesspecifika för PCE, TCE, cis-1,2-DCE respektive VC. Reaktionsparametrarna beror av förhållanden såsom antal halogener hos föreningen och pH vilket medför att de kommer variera beroende av vilken komponent som beaktas samt rådande förhållanden i modellområdet (Wiedemeier, 1996). I tabell 6 presenteras en sammanställning över reaktionsparametrar, λ , för PCE, TCE, cis-1,2-DCE samt VC.

Tabell 6 Värderna över nedbrytningshastighet, λ , enligt Shaerlaeken et al. (1999) och Wiedemeier et al. (1996).

λ PCE [dag^{-1}]	λ TCE [dag^{-1}]	λ cis-1,2-DCE [dag^{-1}]	λ VC [dag^{-1}]
0,0007	0,0028	0,0049	0,0004
0,0200	0,0005	0,0005	–
0,0540	0,0040	0,0029	–
–	0,0016	0,0024	–
–	0,0036	0,0173	0,0009
–	0,0008	0,0015	–
–	0,0019	0,0049	–
–	0,0100	–	–
0,0020	0,0030	0,0017	0,0005
0,0073	0,0020	0,0040	0,0020
0,0046	0,0025	0,0029	0,0013

2.2.4 Spridning och förekomstfaser

Klorerade lösningsmedel kan i samband med läckage från lösningsmedelscisterner, avloppsledningar, dagvattennät eller genom evaporation från ventilationsutkast spridas till markmiljön. Deras fysikaliska och kemiska egenskaper möjliggör att de kan tränga ned vertikalt genom golvplattor eller betong (SGF, 2012) vilket innebär att klorerade lösningsmedel ofta påträffas i marker under lokaler där klorerade lösningsmedel hanterats.

Klorerade lösningsmedel har kemiska och fysikaliska egenskaper vilka medför att de kan förekomma i olika faser såsom bundna till jord, löst i vatten, i gasfas eller som fri fas. Jämvikt mellan de olika faserna styrs av jämviktskonstanter såsom ångtryck, löslighet, fördelningskoefficienter samt Henrys lags konstant, beroende av vilken jämvikt som är av intresse (Englöv et al., 2007).

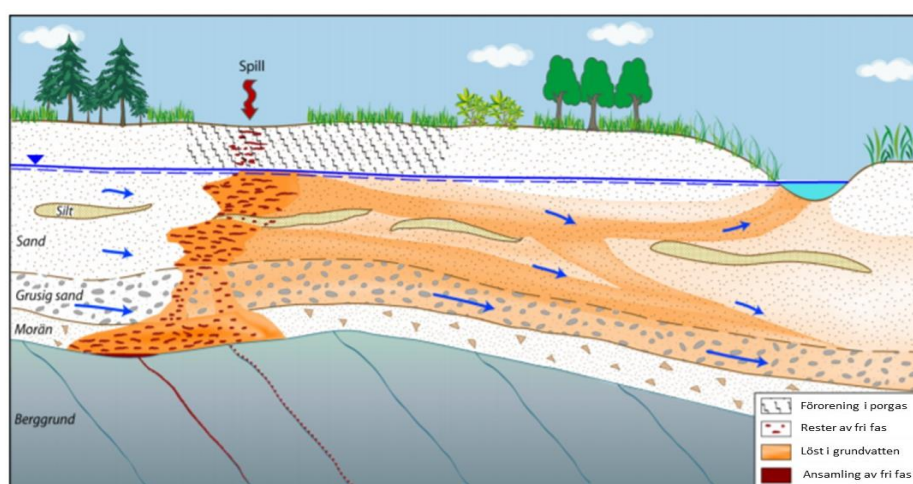
Föroreningen färdas initialt som fri fas ned i markprofilen och den zon i ett förorenat område där fri fas påträffas benämns som källzon (Englöv et al., 2007). Efter att fri fas passerat genom ett område kommer andelar av den fria fasen fastläggas genom att den binder in till fast material eller till markvatten, den andel som blir kvar som rester av fri fas benämns som residual (Lu et al., 2011).

Då mobila DNAPL migrerar vertikalt nedåt genom högpermeabel jord, såsom sand, kommer andelar av föroreningen binda in till jord eller lösas i grundvatten, på så vis uppstår en föroreningsplym. Förorening i gasfas kan även lösas i markvatten vilket medför att halterna i föroreningsplymen ökar (Newell & Ross, 1992). När klorerade lösningsmedel löses i grundvatten kan de transporteras långa sträckor och ge upphov till stora föroreningsplymer (Lu et al., 2011). Inom plymen kan halterna förorening variera kraftigt beroende av markens egenskaper samt vilken form lösningsmedlet förekommer i. Detta medför svårigheter vid provtagning då det kan vara svårt att avgränsa plymen med de varierande koncentrationerna (Englöv et al., 2007).

Spridningen av klorerade lösningsmedel genom jord, grundvatten och bergssprickor kan gå mycket snabbt och plymens utsträckning styrs av rådande markegenskaper samt av grundvattnets riktning (Haglund, 2010). De faktorer som enligt Newell & Ross (1992) har störst inverkan på spridningens omfattning är:

- Volym utsläppt DNAPL
- Infiltrationsyta vid utsläpp
- Varaktighet utsläpp
- Fysikaliska egenskaper hos DNAPL
- Jordens och akviferens egenskaper
- Jordlagerföljd

I figur 6 ses de konceptuella spridningsvägar samt de faser vilka klorerade lösningsmedel förekommer i samband med ett större spill vid markytan.



Figur 6 Konceptuell spridning genom en markprofil samt illustration över de faser klorerade lösningsmedel förekommer i (Englöv et al., 2007). Publicerad med tillstånd.

2.2.5 Toxicitet och hälsorisker

Under senare år har användning av klorerade lösningsmedel avtagit avsevärt genom förändrade krav då toxiska och cancerogena effekter kunnat påvisas. I Sverige får klorerade lösningsmedel, däribland tetrakloreten, inte saluhållas eller överlåtas till konsumenter för enskilt bruk enligt förordning 1998:944 utfärdad 2016 (SFS 2016:829).

Toxiciteten varierar beroende av vilket klorerat lösningsmedel som är aktuellt, dock är flertalet toxiska och cancerogena i samband med långtidsexponering vilket medför att det utgör ett hot mot människors hälsa, markdjur samt mot grundvatten och vattendrag (Lu et al., 2011).

Exponeringsvägar

Vid bedömning av klorerade lösningsmedels påverkan på människor och deras hälsa beaktas möjliga exponeringsvägar. Då klorerade lösningsmedel är flyktiga föreningar är en viktig exponeringsväg inandning av gas. Utöver det är även intag av jord, intag av dricksvatten eller hudkontakt möjliga exponeringsvägar. Då CAH tagits upp absorberas de i blodomloppet där de metaboliseras till mer eller mindre toxiska nedbrytningsprodukter. De hydrofoba partierna av föroreningarna fördelas i kroppens fettvävnad (Englöv et al., 2007).

Humantoxiska effekter

Humantoxiska risker kan indelas i tre kategorier vilka är akuta effekter, kroniska effekter samt cancerogena effekter. Humantoxiska effekter varierar mellan PCE, TCE, cis-1,2-DCE och VC och presenteras här baserat på information huvudsakligen från U.S.EPA:s integrerade riskinformationssystem, IRIS.

PCE

Vad beträffar akuta risker vid exponering för PCE varierar de beroende av den föroreningshalt personen i fråga utsatts för. Då halten av PCE är tillräckligt hög i luft uppges irritation i ögon samt yrsel uppstå, medan exponering för högre halter kan orsaka medvetlöshet. Vad beträffar de kroniska hälsoeffekterna kan långtidsexponering i dricksvatten orsaka skada på lever, njurar och nervsystem. Gällande cancerogenitet uppges PCE kunna orsaka cancer i samband med långtidsexponering och klassificeras som möjligt cancerogen av U.S. EPA (Galizia & Thompson, 2012).

TCE

Vid akut exponering för TCE i gasfas kan akuta effekter såsom yrsel, dåsighet och huvudvärk uppstå. Det kan även leda till medvetlöshet samt irritera andningssystemet, hud och ögon. Under extrema omständigheter kan TCE vara dödlig i samband med exponering. Kronisk exponering kan orsaka skador på lever, njurar och nervsystem. U.S.EPA klassificerar TCE som cancerogen då ett tydligt samband mellan exponering för TCE och en förhöjd risk för cancer i lever och njure påvisats i flertalet oberoende epidemiologiska studier (U.S.EPA, 2011).

cis-1,2-DCE

Cis-1,2-DCE är en nedbrytningsprodukt från TCE. U.S.EPA bedömer att det finns bristfälligt med data för att bedöma huruvida exponering för cis-1,2-DCE är cancerframkallande, dock kan det inte uteslutas. Det saknas epidemiologiska undersökningar på människor och endast ett fåtal försök har genomförts på djur (Galizia & Thompson, 2010).

VC

VC är en nedbrytningsprodukt av cis-1,2-DCE. Vid exponering för VC metaboliseras och konverteras VC i kroppen till vattenlösliga produkter som kan utsöndras genom utandning eller urin. Genomförda undersökningar påvisar att VC samt dess metaboliter inte ackumuleras i kroppen. Vid akut exponering kan symptom såsom yrsel, dåsighet och huvudvärk uppstå. Det orsakar även irritation i ögon, andningssystem, njurar samt uppges orsaka medvetlöshet. Kroniska effekter vid inandning eller oralt intag kan resultera i skador på lever. Inverkan på reproduktionsförmåga samt fosterdefekter har dessutom kunnat påvisas samt inverkan på mäns fertilitet. VC klassificeras som cancerogen då den orsakar en ovanlig form av levercancer (Pepelko, 2000).

2.2.6 Riktvärden

Riktvärden syftar till att ange acceptabla halter av ett ämne som inte ska utgöra risk ur ett human- eller ekotoxikologiskt perspektiv. Riktvärden kan anges antingen platsspecifikt, baserat på rådande förhållanden, alternativt kan generella riktvärden framtas baserat på antaganden om generella förhållanden vad beträffar geologi, hydrologi, exponering samt känslighet. De generella riktvärdena varierar beroende av vilket klorerat lösningsmedel som beaktas då deras egenskaper varierar (Englöv et al., 2007). Riktvärden för klorerade

lösningsmedel i grund- och ytvatten regleras av EU:s vattendirektiv (2000/60/EC). Det är riktvärdena för grundvatten som är av intresse för detta arbete.

Mycket små mängder av klorerade lösningsmedel kan ge upphov till att stora områden blir förorenade. Ett mindre spill av ett klorerat lösningsmedel kan medföra att ett område upp till 200 000 m³ förorenas under vissa omständigheter. Detta sammantaget med klorerade lösningsmedels toxiska egenskaper medför att riktvärden för tillåtna halter av klorerade lösningsmedel är låg (SGF, 2012).

Humantoxiska riktvärden

Vid framtagande av humantoxikologiska riktvärden beaktas exponeringsvägarna inandning av ånga och damm, hudkontakt, intag av dricksvatten, intag av jord samt intag av föda såsom grödor eller fisk från närliggande ytvatten. Riktvärdet beror även av fysikaliska och kemiska parametrar samt baseras på toxikologiska parametrar såsom accepterat dagligt intag (Englöv et al., 2007). Riktvärden för PCE, TCE, DCE samt VC ses i tabell 7.

Tabell 7 Riktvärden för halter PCE, TCE, DCE samt VC vilka ej får överskridas i grund- och dricksvatten.

Ämne	enhet	SGU-FS 2008:2 Grundvatten ¹	SLVFS 2001:30 dricksvatten ²	Danska riktvärden grundvatten ³	Holländska aktionsvärden grundvatten ³	U.S.EPA grundvatten ⁴
PCE	µg/l	10	10	1	40	5
TCE	µg/l	10	10	1	500	5
DCE	µg/l	–	–	1	20	70
VC	µg/l	–	0,5	0,2	5	2

1) Sveriges geologiska undersöknings föreskrifter om miljö kvalitetsnormer och statusklassificering för grundvatten (2013) (ISSN 1653-7300)

2) Livsmedelsverkets föreskrifter om dricksvatten (SLVFS 2001:30)

3) (Jonsson, 2014)

4) (U.S.EPA, 2017)

3. METOD

3.1 INLEDNING

3.1.1 Områdesbeskrivning

För att skapa förståelse kring modellområdet gjordes en områdesbeskrivning med avseende på de parametrar som konstaterats relevanta i litteraturstudien. Detta innefattade information om historisk och framtida markanvändning, information om hydrologiska och geologiska förhållanden samt om den rådande föroreningssituationen vilka utgjorde underlag vid framtagandet av flödes- och transportmodellen.

3.1.2 Skapande av flödesmodell

I MODFLOW framtoogs en flödesmodell för att simulera grundvattenströmningen genom området. Grundvattenmodellen togs fram genom att utgå från rådande geologi och hydrologi, samt genom att ansätta platsspecifika parametrar. I de fall då platsspecifika värden saknades ansattes litteraturvärden baserade på resultat från litteraturstudien varefter kalibrering utfördes där genererade grundvattennivåer från MODFLOW

jämfördes med uppmätta grundvattennivåer. På så vis kunde en representativ flödesmodell tas fram.

För att undersöka flödesmodellens robusthet genomfördes en känslighetsanalys med avseende på hydraulisk konduktivitet och effektiv porositet, där en parameter hölls konstant medan den andra varierades.

3.1.3 Skapande av transportmodell

Med den framtagna flödesmodellen kunde föroreningstransport och spridning genom akviferen modelleras med programvaran RT3D. Detta gjordes genom att ansätta lämpliga parametrar såsom nedbrytningskonstanter samt adsorptionskonstanter för PCE, TCE, cis-1,2-DCE respektive VC. Litteraturvärden ansattes då parametrarna ej fanns uppmätta, varefter en känslighetsanalys genomfördes med avseende på adsorption och nedbrytning för att undersöka hur parameterval inverkade på spridningen.

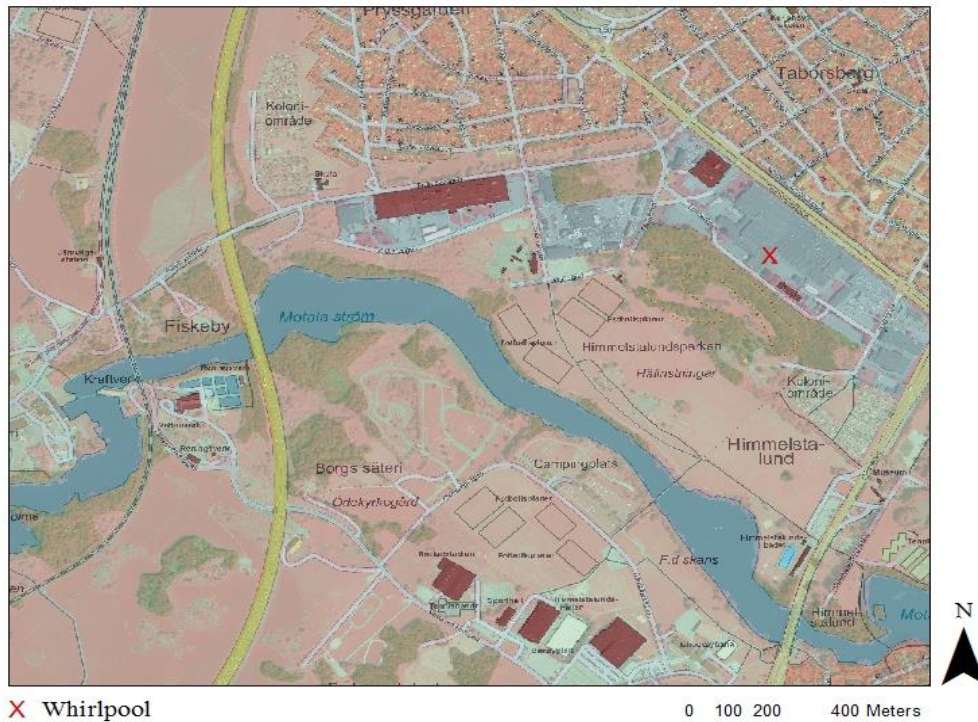
Föroreningsspridning efter 10, 30 respektive 75 år genomfördes sedan där medelvärdena över adsorptions- samt reaktionsparametrar ansattes. Värdena inom de generade föroreningssplymerna jämfördes med riktvärdena över halter vilka ej får överskridas i grundvatten.

Dessutom modellerades det misstänkta värsta spridningsscenarioet, då minimal fastläggning och nedbrytning sker, för att undersöka spridningen under dessa förhållanden. Den hydrauliska konduktiviteten ansattes först till medelvärdet och sedan till det maximala för att undersöka dess inverkan på masstransporten.

3.2 OMRÅDESBESKRIVNING

3.2.1 Platsbeskrivning

Den aktuella byggnad, invid vilken förorening föreligger, är belägen inom industriområdet Strömbrytaren i centrala Norrköping, i Östergötland. Industriområdet angränsas i nordöstlig riktning av Finspångsvägen bortom vilken ett bostadsområde är beläget. Söder om lokalen avgränsas industrilokalen av ett skogsområde som är beläget på ett krön. Bortom krönet finns Himmelstalundsparken som används för rekreation där bland annat fotbollsplaner och minigolfplaner finns anlagda. I Himmelstalundsparken finns även ett hållristningsområde (Eklund & Mases, 2010). Ungefär 550 meter från industriområdet, bortom Himmelstalundsparken, finns Motala ström som närmsta ytvattenrecipient, vilket ses i figur 7.



Figur 7 Tätortskarta över området baserad på Lantmäteriets GSD- Tätort, raster. © Lantmäteriet

Marken kring kvarteret Strömbrytaren är bebyggd och hårdjord medan området kring Himmelstalundsparken ned till Motala ström består av grönområden såsom skog och äng, vilket ses tydligt i figur 8.



Figur 8 GSD-Ortofotobild och GSD-Ortofotobild25 där Whirlpool är markerad med ett kryss. © Lantmäteriet

3.2.2 Historisk användning

Industriell produktion har pågått invid Finspångsvägen sedan tidigt 1940-tal (Nordström, 2014). Den industri som bedrivits omfattar produktion av elektronisk utrustning där bland annat klorerade lösningsmedel använts som avfettnings- samt lösningsmedel.

1940 initierades industriell produktion vid Finspångsvägen där radioapparater producerades (Nordström, 2014) av företaget Norrköpings elektrotekniska fabriker AB, *Nefa*. Under 1956 expanderades produktion till att omfatta produktion av tv-apparater (Stenström, 2014), som senare under 1962 utökades till att även inkludera produktion av mikrovågsugnar. I processerna användes tri- och perkloreten enligt inventering utförd av Länsstyrelsen i Östergötland. I figur 9 ses en bild från lokalen under den tid då produktion bedrevs.



Figur 9 Bild från Norrköpings Tidningar, tagen under juni 1940. Publicerad med tillstånd.

Nefa bytte 1972 namn till *Philips Norrköpings industrier AB* vilket 1989 övergick till *Iremda*, som 1993 slutligen blev *Whirlpool Sweden AB* (Nilsson, 2014). Vid mitten av 1990-talet avtog produktion och idag sker ingen produktion vid Whirlpool (Stockholm TT, 2014).

3.2.3 Markanvändning

Verksamheten som bedrivits på Whirlpool bedöms som mindre känslig verksamhet (MKM) enligt Naturvårdsverkets generella riktlinjer (Naturvårdsverket, 2009), då lokalen använts för industriellt bruk. Detta innebär att folk endast befinner sig på platsen då de är yrkesverksamma. Det antas dessutom att äldre och barn inte kommer befinna sig i området i större utsträckning, vilket medför att marken betraktas som mindre känslig.

Enligt detaljplan från Norrköpings kommun planeras kvarteret Strömbrytaren användas för industriellt ändamål även i framtiden. Detta innebär att marken kommer definieras som mindre känslig mark även i framtiden.

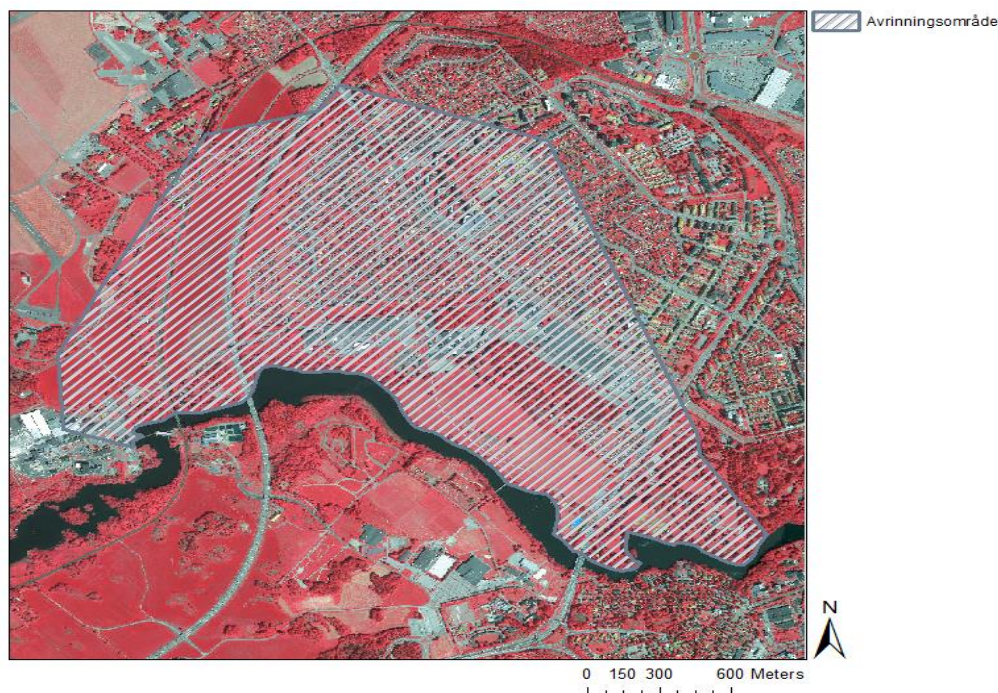
Norr om lokalen finns ett bostadsområde vilket innebär att marken i detta område betraktas som känslig mark enligt Naturvårdsverkets generella riktlinjer (Naturvårdsverket, 2009). Enligt Sveriges Geologiska Undersöknings brunnarsarkiv kan det dessutom ses att det på 700 meters avstånd samt på 900 meters avstånd väster om lokalen finns två enskilda vattentäkter för hushåll, fritidshus eller mindre lantbruk. Brunnarnas placering i området kan ses i appendix A.3 figur A3.

I Himmelstalundsparken finns fornlämningar i form av hällristningar från bronsåldern samt andra skyddsvärda objekt såsom Himmelstalunds herrgård, området är därför utpekad som riksintresse för kulturmiljö (Eklund & Mases, 2010). Enligt Miljöbalken 3–4 kap (SFS 1998:808) skall dessa områden skyddas mot åtgärder som påtagligt kan skada objektets värde.

3.2.4 Avrinningsområde

SVAR delavrinningsområde

SVAR är en databas som innehåller information kring avrinningsområden i Sverige baserade på ytvattendelare som bestämts utifrån topografiska kartor (Mårtensson et al., 2011). Ytvattendelare överensstämmer ofta med grundvattendelare (Grip & Rodhe, 2016) därför ger delavrinningsområdet en representativ illustration över grundvattendelares utsträckning kring området, vilket ses i figur 10.



Figur 10 SVAR delavrinningsområde med underliggande GSD–Ortofoto och GSD–Ortofoto25. © Länsstyrelsen, Lantmäteriet, ESRI Inc, RAÅ, Sjöfartsverket, SMHI, SVO, SCB, SJV, FM, Bergsstaten, SLU.

Längs med avrinningsområdet löper Motala ström, från sjön Glan till Bråviken, genom vilken vattenståndet avläses till 18,79 möh nedanför industriområdet enligt Lantmäteriets höjddata 1:25 000–100 0000, GSD, 2+. Vattenståndet genom Motala ström är relativt jämt på den delsträcka vilken löper nedanför industrilokalen.

Ekologisk status och skyddsobjekt

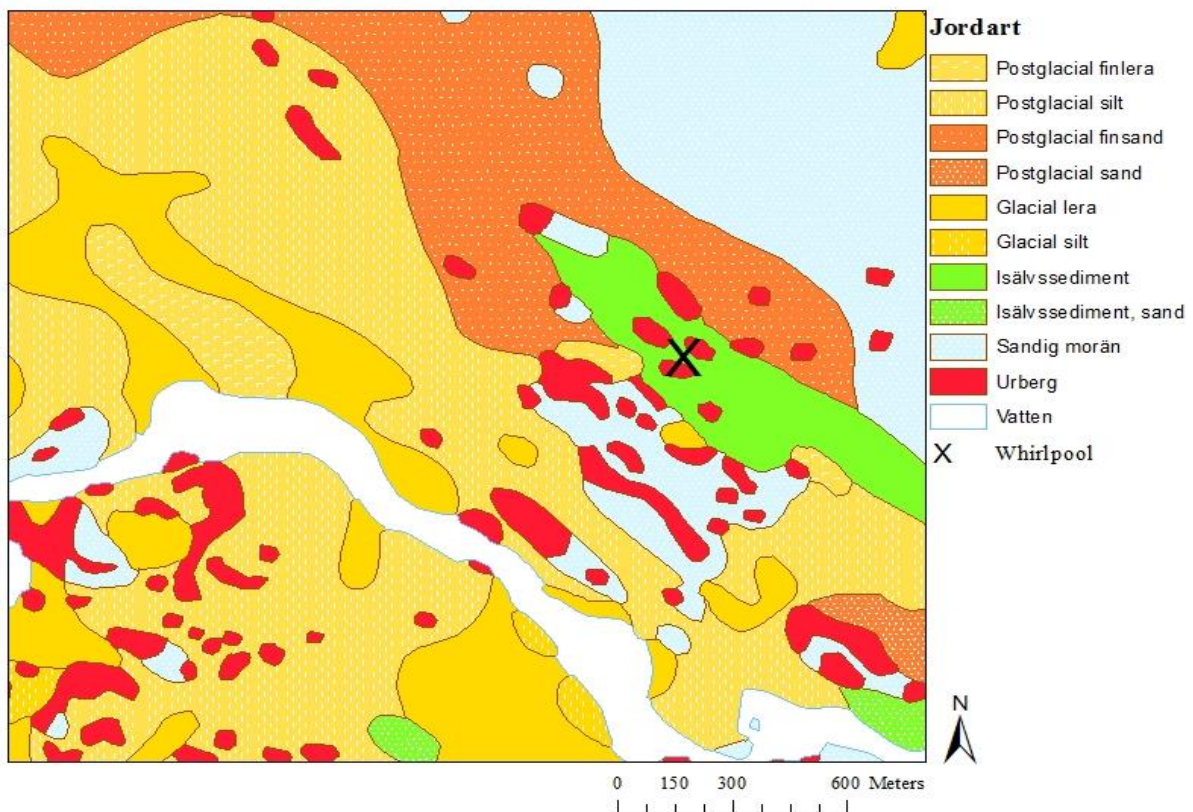
Från det europeiska Ramdirektivet för vatten (2000/60/EG) och dess införande i svensk lagstiftning följer att alla yt- och grundvatten i landet ska ha en god kemisk och ekologisk status. Den delsträcka vilken går från sjön Glan till Bråviken bedöms enligt Vatteninformation Sverige, VISS, som otillfredsställande med avseende på ekologisk potential. Dessutom uppnår vattendraget ej god kemisk status då den bedöms som övergödd samt utsatt för miljögifter. I området har även förändring av habitat orsakat av fysisk påverkan kunnat påvisas (VISS, 2017).

Området ingår ej i ett vattenskyddsområde enligt Norrköping Vatten och Avfall (2017), vilket även kunde ses ur Naturvårdsverkets verktyg *Skyddad natur*, dock angränsar det till ytvattentäkten Glan. Då Glan befinner sig uppströms det aktuella industriområdet påverkas det dock inte av verksamhet som bedrivs vid Whirlpool.

3.2.5 Geologi

Jordarter

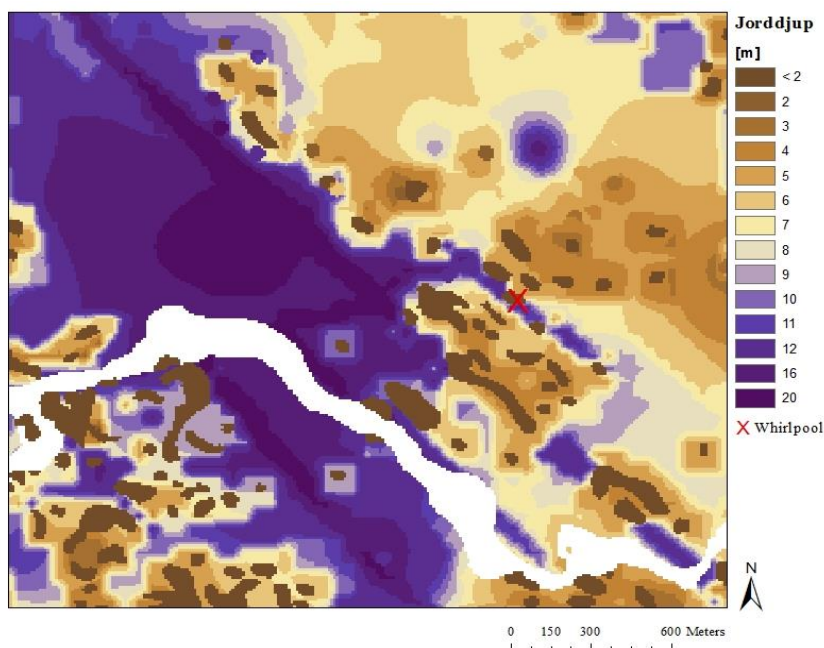
Från Sveriges Geologiska Undersöknings, SGU:s, jordartskarta 1:25 000–100 000 kan jordartssammansättningen i området ses. Från jordartskartan, figur 11, kan ses att den huvudsakliga jordarten inunder Whirlpool är isälvssediment med inslag av sand. Norr om Whirlpool ses att det ytliga jordlagret består av postglacial sand efterföljt av sandig morän, vilket markerar utsträckningen av en ås. Söder om lokalen ses att den huvudsakliga jordarten är sandig morän efterföljt av glacial silt och till viss del lera närmst Motala ström. Genom profilen kan ses att berg i dagen är frekvent förekommande då urberget är ytligt.



Figur 11 Jordartskarta över området kring Whirlpool enligt SGU:s Jordarter 1:25 000 – 1:100 000". © Sveriges Geologiska Undersökning

Jorddjup

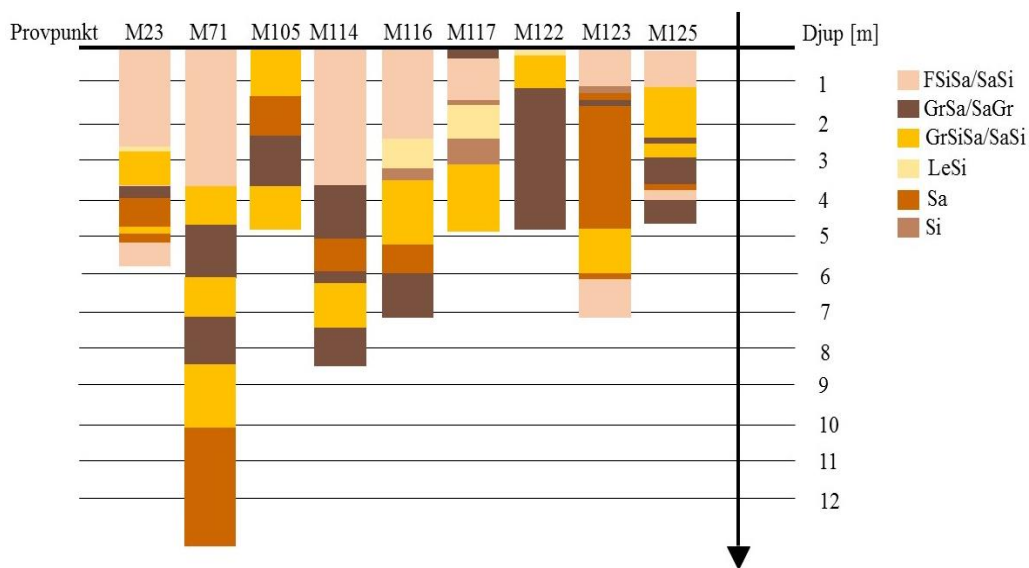
SGU och Lantmäteriet har uppskattat djup ned till berg genom området i sin jorrdjupskarta 1:50 000 baserat på vilken figur 12 tagits fram. I figur 12 ses genomsnittligt djup till berg i området där det kan ses att jorrdjupet varierar relativt stort i området.



Figur 12 Jorddjup baserad på Sveriges geologiska undersöknings och Lantmäteriets Jorddjupskarta skala 1:50 000. © Sveriges geologiska undersökning och Lantmäteriet

Jordlagerföljd

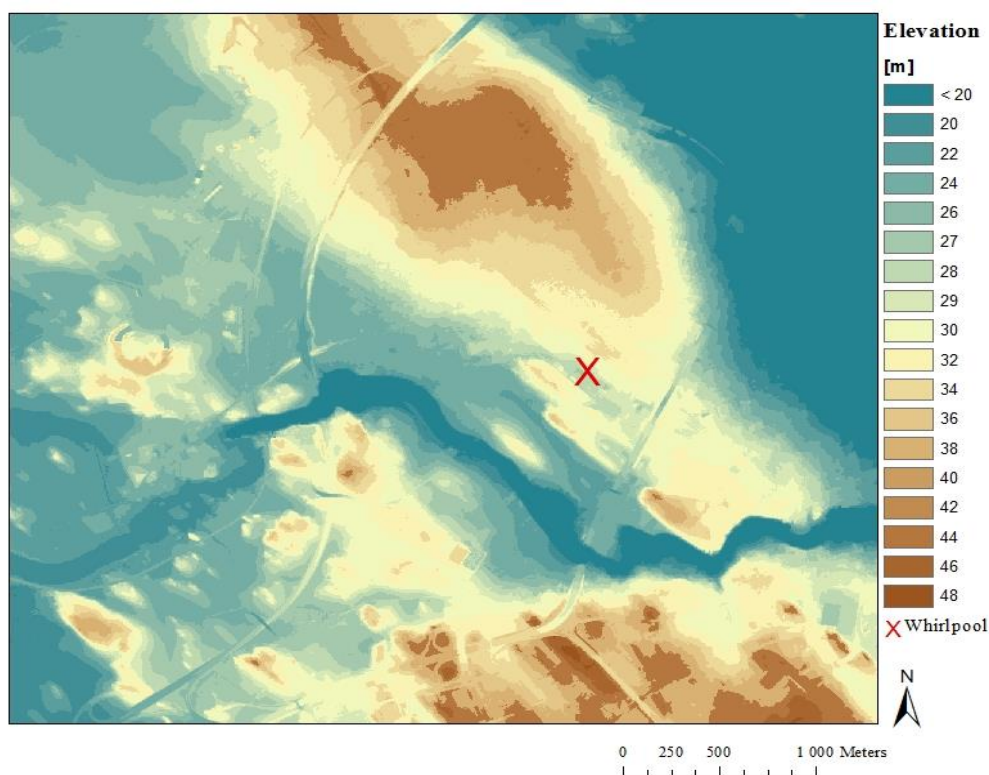
Jordlagerföljden vid Whirlpool påvisades genom provtagning. Det kunde konstateras att de jordarter som förekom i den mättrade zonen omfattade främst sand och i vissa punkter grus. I enstaka punkter kunde även morän samt finare material såsom lerig silt och silt påvisas. Jordarterna i den mättrade zonen överensstämmer väl med de vid ytan, vilket påvisar ett relativt uniformt jordlager i området. I figur 13 ses en illustration över den jordlagerföljd som kunnat konstateras i utvalda punkter, i appendix A.2, figur A2, ses provpunkternas placering. Det kan ses att den jordmån som dominerar i de djupliggande lagren främst är sand, siltig sand eller sandig silt samt grusig sand och sandigt grus.



Figur 13 Översikt över jordlagerföljd ned till berg i utvalda provpunkter baserat på data från WSP. F=fyllnad, Gr=grus, Sa=sand, Si=silt, Le=lera.

Topografi

I figur 14 ses områdets topografi. Det kan ses att Whirlpool befinner sig i en svacka då elevationen är högre nordöst och sydöst om området samt att markelevationen i området varierar mellan 20–30 möh enligt Lantmäteriets GSD-Höjddata, grid 2+.



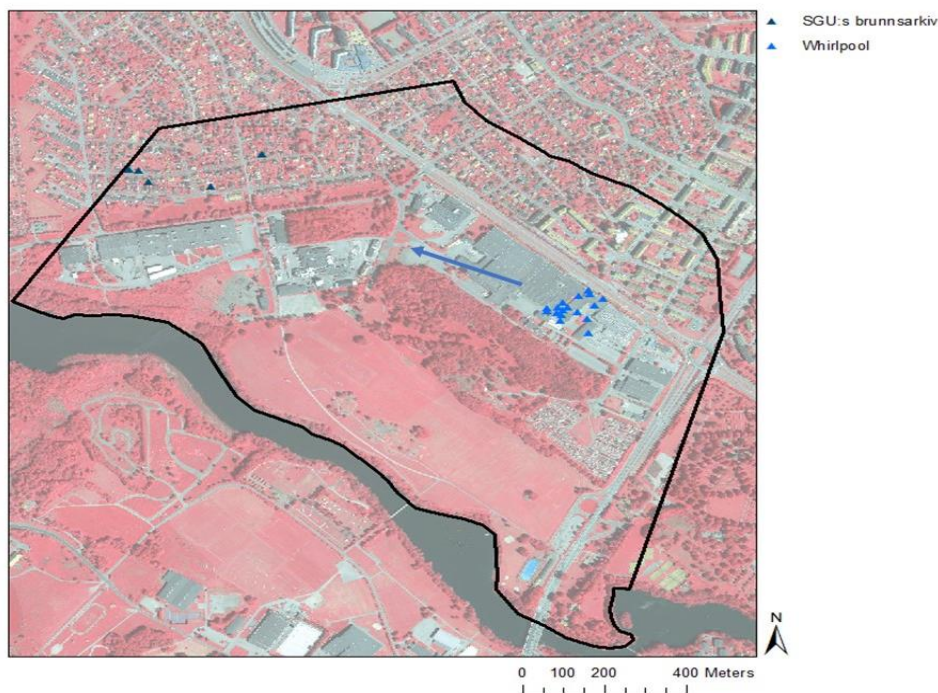
Figur 14 Höjddata på stort avstånd från området kring Whirlpool skapad utifrån GSD-Höjddata, grid 2+. © Lantmäteriet.

Enligt SGU:s karta över berggrund 1:50 000–1:250 000, vilken ses i appendix D figur D1, kan ses att en deformationszon går parallellt nedanför längs med Whirlpool.

Grundvattenströmning

Under kvarteret Strömbrytaren finns ett grundvattenmagasin, vilket ses i appendix E, figur E1. Grundvattennivåer finns uppmätta i flertalet punkter kring Whirlpool där grundvattnets riktning bedömdes variera på grund av den ojämna terrängen och geologin. Grundvattennivåer finns dokumenterade i SGU:s brunnsarkiv, se appendix B tabell B1, i punkter belägna ungefär 700 meter från Whirlpool. För att konstatera den generella grundvattenriktningen genom området jämfördes uppmätta grundvattennivåer vid Whirlpool med de erhållna från brunnsarkivet. Då grundvatten går från högre mot lägre potential, kunde det konstateras att grundvattenriktningen går i sydvästlig riktning mot Motala ström, vilket är markerat i figur 15.

I figur 15 ses provpunkters placering i området där de ljusare blå punkterna representerar grundvattennivåer uppmätta vid Whirlpool och de mörkare blå punkterna symboliserar punkter erhållna från brunnsarkivet. Grundvattnets riktning i området är markerad med en pil.



Figur 15 Punkter i vilka grundvattennivåer uppmätts med underliggande GSD–Ortofot och GSD–Ortofot25. © Lantmäteriet

3.2.6 FÖRORENINGSSITUATION

Då klorerade lösningsmedel brukats under flera decennier fanns anledning att misstänka förekomst av förorening i markprofilen inunder lokalerna. Det saknas information kring att större utsläpp ska ha skett, vilket medför att läckage av föroreningen kan antas ha skett kontinuerligt under en längre tid. I syfte att kartlägga föroreningsituationen kring lokalen har provtagning genomförts av WSP i grundvatten, jord, inomhusluft samt i porgas. Peristaltisk pump har använts för att detektera halter endast i grundvatten, medan MIP–sondering genomförts för att mäta halter i grundvatten, jord, samt markluft.

Peristaltisk pump

Provtagningen i grundvatten genomfördes huvudsakligen genom att använda peristaltisk pump som är en slags sugpump. Grundvattnet utsätts då för ett undertryck och sugs mot markytan. Då vattnet utsätts för undertryck är risken för avgång av flyktiga ämnen stor vilket innebär att de halter av de klorerade lösningsmedel som uppmätts kan vara reducerade relativt de faktiska halterna i grundvattnet. Dessutom kan slangen i en pumpenhet vara adsorptionsbenägen vilket kan medföra att lägre halter förorening detekteras ur grundvattenprovet. Peristaltiska pumpar är lämpliga att använda vid provtagning av grundvatten då de har hög tillförlitlighet och risken för kontaminering är låg (SGF, 2013). Provpunkternas position för grundvattenprovningen ses i appendix A.4, figur A4–A7.

MIP–sond

För att undersöka utbredning av en flyktiga kolväten, såsom klorerade alifatiska kolväten, i jord och grundvatten är det lämpligt att använda MIP–sondering, *Membrane Interface Probe* (SGF, 2013). MIP–sonden är utrustad med detektorer vilka är representativa för det kolväte som ska detekteras, samt innehåller en värmeplatta med ett anslutet semipermeabelt membran. Värmeplattan upphettas till ca 120 °C vilket innebär att då

plattan kommer i kontakt med jord eller grundvatten frigörs de flyktiga föreningarna i gasfas och diffunderar genom membranet på sonden varefter bärgas transporterar dem till markytan där de kan extraheras. Det kan alltså vara på så vis att då provtagning utförs i den mättade zonen, medföljer förorening både från vattenfas samt bunden till jord, därav detekteras inte halter enbart i grundvatten (Arvidslund et al., 2012).

På den aktuella platsen har MIP-sondering utförts i flertalet punkter för att uppmäta halter klorerade lösningsmedel i jord och grundvatten. Halter i markprofilen uppmättes från markytan ned till berggrund där halter av PCE och dess nedbrytningsprodukter TCE, cis-1,2-DCE samt VC kunde detekteras på olika djup. Från erhållna data kunde ses hur halterna varierade med djupet i provtagningspunkterna. Provpunkternas position med MIP-sondering i appendix A.2, figur A2.

3.3 MODELLER

För att erhålla översikt kring föroreningsspridningen i grundvattnet kring ett förorenat område kan programmet *GMS, Groundwater Modeling System*, användas (Gustafsson & Refsgaard, 2007). *GMS* består av flertalet olika gränssnitt såsom *MODFLOW* och *RT3D*. Genom att använda gränssnittet *MODFLOW* kan grundvattenflödet genom akviferen modelleras (Harbaugh, 2005). Då grundvattenflödet i en akvifer simulerats i *MODFLOW* kan föroreningstransport modelleras med tillvalsmodulen *RT3D*.

3.3.1 MODFLOW

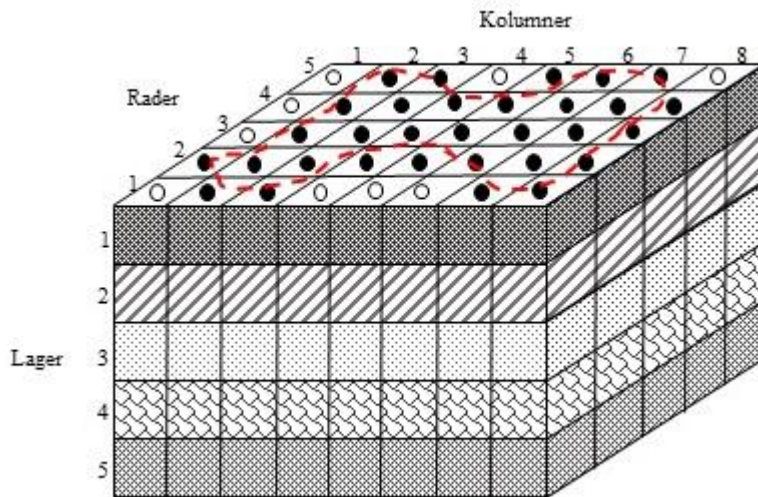
I syfte att modellera grundvattenflöde i den mättade zonen kan två- eller tredimensionella modeller användas (Hill, 1990). *MODFLOW* är en tredimensionell modell utvecklad av U.S.G.S vilken löser grundvattnekvationen numeriskt med finita differensmetoder (Harbaugh, 2005). *MODFLOW* simulerar mättat flöde i tre dimensioner och innehåller olika moduler och tillvalspaket vilka hanterar specifika egenskaper som används för att beskriva det hydrologiska systemet (Bedient, 1994). Flödet mellan cellerna beräknas baserat på ansatta grundvattennivåer, hydraulisk konduktivitet samt de randvillkor som ansatts för systemet (Harbaugh, 2005). Primära utdata ur *MODFLOW* är tryckfördelningar och volymetrisk vattenmängd (Bedient, 1994).

Diskretisering

Vid utformning av en flödesmodell kan olika tillvägagångssätt implementeras, antingen *grid approach* eller *conceptual model approach*. Vid det förstnämnda skapas en modelldomän initialt varpå parametrar sedan ansätts cellvis för att efterlikna det naturliga systemet. Det andra tillvägagångssättet innebär att en konceptuell modell skapas initialt där kända lagerdata importerar samt olika hydrauliska parametrar såsom hydraulisk konduktivitet och infiltration definieras. Sedan konverteras den konceptuella modellen till *MODFLOW* där den kan användas för att simulera grundvattenflöde (Brigham Young University, 1999).

För att numeriskt lösa transportekvationen krävs att modellområdet indelas i olika beräkningsceller. Varje cell tilldelas då egenskaper såsom hydraulisk konduktivitet, porositet eller grundvattenbildning. Antal beräkningsceller baseras på kända geologiska förutsättningar och formationer i området och cellernas storlek kan även variera beroende på hur stor lokal variation som råder kring hydrauliska egenskaper. Området delas in i ett rutnät där upplösningen väljs baserat på storleken på det område som ska modelleras (Gunnemyr, 2007).

Det är viktigt att ta hänsyn till jordartssammansättningen i en markprofil då detta påverkar hur grundvattenflödet kan ske genom akviferen (Domenico & Schwartz, 1998). För att ta hänsyn till detta kan systemet delas in i olika lager. I figur 16 ses en konceptuell modellområde utformad med lager, rader och kolumner, inspirerad av Harbaugh (2005). I det yttigaste lagret representerar den streckade röda linjen en geologisk formation inom vilken flöde kan ske där de fyllda punkterna motsvarar aktiva celler och de ofyllda punkterna representerar celler som ej deltar i flödet.



Figur 16 Översiktlig modellstruktur inspirerad av Harbaugh. (2005)

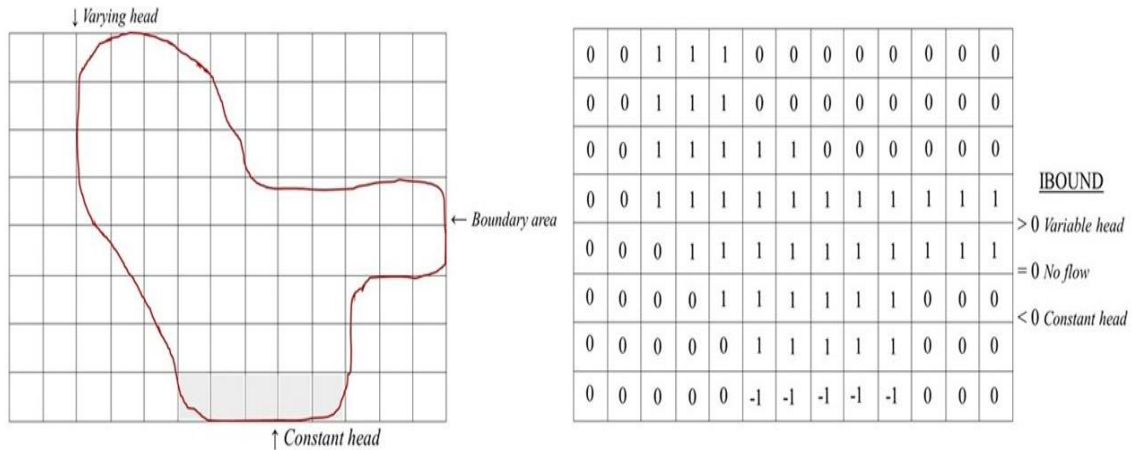
I MODFLOW delas processerna kring grundvattenflödet in i olika processer, *procedures*, vilka används för att lösa flödesekvationerna. Simuleringsperioderna är indelade in i så kallade *stress periods* inom vilka egenskaperna är konstanta, vilka i sin tur är indelade i en serie av tidssteg. För varje *stress period* specificerar användaren den totala längden och antal tidssteg. Vid slutet av varje tidssteg beräknas potentialen iterativt med finita differentialekvationer (Harbaugh, 2005).

Tillvalspaket

Olika delar av koden hanterar olika egenskaper vilka påverkar grundvattenflödet vilket hanteras av olika tillvalspaket. Det finns två typer av hydrologiska paket vilka är *internal flow package*, vilket hanterar internt flöde mellan närliggande celler, samt hydrologiska paket vilka simulerar intern belastning såsom floder, brunnar eller inflöde. Det finns ett stort antal tillvalspaket vilka går att läsa mer om i Harbaugh (2005).

Ett viktigt tillvalspaket är *basic transport package* vilket hanterar administrativa uppgifter såsom att läsa namnfiler, hantera minne, avläsa den initiala potentialen samt lagra variabler såsom IBOUND-variabler (Harbaugh, 2005). IBOUND-variablerna används för att ansätta randvillkor vilka avläses i *basic transport package* (Bedient, Newell & Refai, 1994). IBOUND-vektorn innehåller en kod för varje cell vilken indikerar huruvida potentialen (1) varierar över tid, (2) är konstant eller (3) om inget flöde sker inom cellen. På så sätt kan IBOUND-vektorn användas för att ansätta randvillkor eller initialvillkor i modellen. Initialt ansätts en potential av användaren, vilken ligger till grund för beräkningen av potential i följande tidssteg (Harbaugh, 2005).

I figur 17 ses en illustration över hur IBOUND–variabler kan implementeras för att representera randvillkor där nollor representerar inaktiva element, positiva tal motsvarar att potentialen kan variera över tid och negativa tal motsvarar celler där potentialen är konstant. Till vänster i figur 17 ses det område som ska modelleras samt aktuella randvillkor och till höger ses hur randvillkor implementeras med IBOUND–variabler (Harbaugh & McDonald, 1988).



Figur 17 Illustration över ett tänkbart modellområde med randvillkor till vänster, till höger ses lämpliga IBOUND–variabler (Harbaugh & McDonald, 1988).

Recharge package är ett annat tillvakspaket vilket kan användas i syfte att simulera grundvatteninfiltration till en akvifer. Användaren ansätter plats specifika värden för infiltration i *recharge package* för att efterlikna det naturliga inflödet. Om området exempelvis består av hårdgjorda ytor kan det återspeglas genom ansats lägre infiltration i *recharge package*.

Randvillkor

Då ett modellområde skapats väljs lämpliga randvillkor. Randvillkoren är yttre gränser som används för att beskriva och avgränsa området i syfte att efterlikna det verkliga systemet. För att definiera randvillkoren vid modellens yttre gränser krävs att information kring områdets geologi, topografi och andra hydrauliska egenskaper är kända (Franke, et al., 1987). I MODFLOW kan tre konceptuella randvillkor appliceras vilka omfattar:

- I. *Dirichlet*: Specificerad hydraulisk potential eller specificerad koncentration
- II. *Neumann*: Specificerat flöde
- III. *Cauchy*: Potential– eller koncentrationsberoende flöde (kombination av I och II)

Randvillkoren ses sammanfattade i tabell 8 där H är potential, h ä en sträcka, c är en konstant och C är koncentration och x , y respektive z representerar riktning i rummet.

Tabell 8 Randvillkor enligt Wiedemeier et al. (1996)

Randvillkor	Typ	Formellt namn	Matematisk beskrivning	
			Grundvattenflöde	Föroreningstransport
Specificerad potential eller koncentration	1	Dirichlet	$H=f(x,y,z,t)$	$C=f(x,y,z,t)$
Specificerat flöde	2	Neumann	$\frac{\partial H}{\partial h} = f(x, y, z, t)$	$\frac{\partial C}{\partial h} = f(x, y, z, t)$
Potential- eller koncentrationsberoende flöde	3	Cauchy	$\frac{\partial H}{\partial h} + cH = f(x, y, z, t)$	$\frac{\partial C}{\partial h} + cC = f(x, y, z, t)$

Den första typen av randvillkor, Dirichlet, motsvarar att potentialen eller den mättade koncentrationen längs en rand är konstant. Dirichlet-randvillkor kan användas då den hydrauliska potentialen är oberoende av flödesförhållanden i modelldomänen. Randvillkoret specificerad potential, eller *constant head*, kan användas då potentialen längs en rand är konstant eller varierar linjärt längs med en rand. Genom att ansätta *constant head* kommer potentialen längs med randen variera linjärt samt vara konstant över tid och därigenom ej påverkas av andra förhållanden i modelldomänen. Randvillkoret kan vara lämpligt exempelvis längs med ett ytvattendrag. På samma vis kan konstant koncentration appliceras vilket kan vara lämpligt exempelvis om det finns en konstant utsläppskälla i akviferen (Wiedemeier et al., 1996).

Den andra typen av randvillkor, Neumann, används för att specificera flödet av grundvatten eller massan förorening som funktion av position och tid. Specificerat flöde kan användas då det finns en fast potentialgradient längs en modelldomän. En nollflödesrand, *no flow*, är ett specificerat flöde där flödet är noll över tid och rum, vilket kan vara lämpligt för att representera en grundvattendelare (Wiedemeier et al., 1996). En nollflödesrand kan även motsvara en impermeabel eller lågpermeabel zon såsom tätt berg (Gunnemyr, 2007).

Den tredje typen av randvillkor, *Cauchy*, används då flödet genom delar av randen förändras som respons till att den hydrauliska potentialen förändras i en punkt nära randen. I sådana situationer är flödet specificerat som en funktion av potential och varierar under simuleringarna när potentialen varierar (Wiedemeier et al., 1996).

Begynnelsevillkor

Lämpliga begynnelsevillkor ansätts baserat på känd information såsom uppmätta grundvattennivåer eller kända geologiska zoner i området (Gunnemyr, 2007). Vilka begynnelsevillkor som ansätts beror därmed av akviferen och ansätts platsspecifikt för att skapa en representativ flödesmodell (Bedient et al., 1994).

3.3.2 RT3D

Då föroreningstransporten ska simuleras finns olika tillvalsmoduler att välja i MODFLOW baserat på vilken process som ska modelleras. Då föroreningstransport ska modelleras kan som nämnt RT3D användas (Clement & Jones, 1998). RT3D utvecklades

av Batelle Pacific Northwest National Laboratory (AQUAVEO, 2017). I RT3D finns flertalet reaktioner definierade såsom dispersion, advektion och nedbrytning vilka simulerar den spridning som sker i en markprofil. Modellering sker tredimensionellt där finita processer används för att simulera nedbrytning och spridning genom akviferen.

För att använda RT3D krävs att en flödesmodell framtagits i MODFLOW varpå RT3D kan användas för att simulera nedbrytning och transport av en förorening i en akvifer (Clement, 1997). De grundvattenflöden som beräknats ur MODFLOW används av RT3D för att lösa transportekvationen, se ekvation (3) (Johnson et al., 2006).

Reaktionspaket

Den reaktiva transporten i ett mättat medium beskrivs tredimensionellt i RT3D med ekvation (3). För att behandla de olika processerna separat indelas koden i olika tillvalspaket (Johnson et al., 2006) på samma vis som i MODFLOW. Vilka tillvalspaket som är lämpliga beror av vilka processer som ska simuleras, då nedbrytning av klorerade lösningsmedel och dess nedbrytningsprodukter ska modelleras används paketen *advection*, *dispersion*, *sources/sink mixing* samt *chemical reaction package* (Clement & Jones, 1998).

Transportekvationen löses numeriskt för samtliga mobila komponenter för ett visst tidssteg och fortsätter sedan att lösa kopplade ekvationer implicit genom att använda en inbyggd differentialekvationslösare (Clement, 1997). Reaktionstermen i transportekvationen beskrivs med ordinära differentialekvationer. Genom att använda *chemical reaction package* kan användaren definiera kinetiska parametrar såsom nedbrytningshastighet (Johnson et al., 2006).

Reaktionsmoduler

I RT3D finns olika reaktionsmoduler med vilka olika processer kan simuleras. *Sequential decay* är en modul som kan användas för att simulera nedbrytning av klorerade alifatiska kolväten genom att lösa differentialekvationer under antagandet att nedbrytningen enbart sker då föroreningen är i vattenfas, under anaeroba förhållanden. (Clement, 1997). Detta sker under antagandet att den nedbrytning som sker är av första ordningen (Clement, 2005).

4. RESULTAT

Baserat på områdesspecifik information kring kvarteret Strömbrytaren, presenterad i avsnitt 6, kunde principer för grundvattenmodellering samt numerisk modellering, presenterade i avsnitt 3 samt 4, brukas för att framta en platsspecifik grundvattenmodell i MODFLOW. Den erhållna flödesmodellen användes för att framta en masstransportmodell i RT3D baserad samt ämnesspecifika parametrar för klorerade lösningsmedel presenterade i avsnitt 5. Med masstransportmodellen modellerades spridningen av PCE, TCE, cis-1,2-DCE samt VC genom den mättade zonen efter 10, 30 samt efter 75 år.

4.1 KONCEPTUELL GRUNDVATTENMODELL

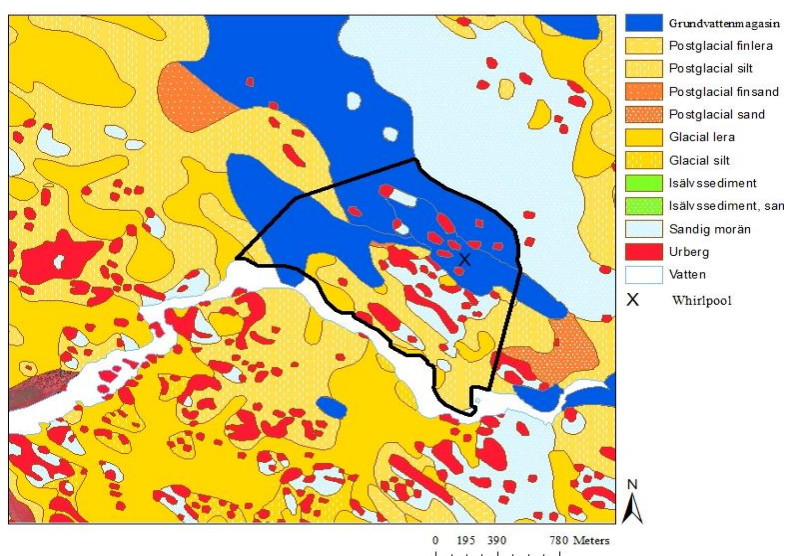
För att modellera området kring Whirlpool bedömdes det som lämpligast att skapa en konceptuell modell där modelldomän och randvillkor definieras initialt, varefter ett rutnät skapades och konverterades till MODFLOW. Dessutom beräknades och ansattes grundvattenbildningen i området i området.

4.1.1 Val av modellomän

Jordmänen i den mättade zonen konstaterades från jordlagerföljdsundersökningar, se avsnitt 6.5.3, där det sågs att jordmaterialet bestod till stor del av högpermeabelt jordmaterial såsom sand med inslag av grus. Förekomst av högpermeabla jordarter medför att grundvattenströmning genom den mättade zonen kan ske relativt snabbt och därigenom sker föroreningstransporten snabbt. Med detta i åtanke bedömdes det som rimligt att använda en relativt stor modellomän vilken kan påvisa grundvattenflödet på större avstånd från kvarteret Strömbrytaren för att undersöka omfattningen av spridningen.

Det bedömdes som relevant att anlägga modellen på sådant vis att ytvattendraget Motala ström inkluderas i domänen för att bedöma huruvida halter av klorerade lösningsmedel skulle nå vattendraget efter 10, 30 respektive 75 år. Om föroreningen når ett ytvattendrag skulle spridning till omgivande mark kunna ske mycket snabbt och ge upphov till en allvarligare föroreningssituation. Detta sammantaget med att vattendraget redan idag ej uppfyller god ekologisk status medför att det är intressant att undersöka om föroreningarna når dit.

Val av modellomän ska som nämnt baseras på kända geologiska formationer och hydrologiska förhållanden i ett område. I avsnitt 3.4.1 presenteras avrinningsområdet vilket provplatsen är beläget inom. Söder om lokalen kan det ses att avrinningsområdet avgränsas av en ås, ungefär 300 meter norr relativt Whirlpool. Från den topografiska kartan, vilken ses i avsnitt 6.5.4, kan det ses att markytan är belägen högre vid åskanten än vid Whirlpool, dessutom ses från jorddjupskartan, vilken ses i avsnitt 6.5.2, att berget är ytligt i dessa andelar av modellomänen, vilket tyder på låg genomströmning. Från jordartskartan, presenterad i avsnitt 6.5.1, ses att jordarten i motsvarande område, vid åsen, består av sandig morän. Genom en ås är ofta genomflödet av grundvatten lågt då jordartsmaterialet är tätt packat. I figur 18 ses jordartskartan med ovanliggande grundvattenmagasin där det kan ses att grundvattenmagasinet är beläget utefter den sandiga moräns kant, åsen avgränsar alltså grundvattenmagasinet vilket gör åskanten till en lämplig modellrand.



Figur 18 Grundvattenmagasin med underliggande jordartskarta enligt SGU:s Jordarter 1:25 000 – 1:100 000” med ovanliggande modellomän. © Sveriges geologiska undersökning

Grundvattenströmningen i området konstaterades ske i västlig riktning för att sedan bryta av och riktas söderut mot Motala ström, från Whirlpool sett. Detta medför att modellranden öster om lokalen kan väljas relativt nära invid lokalen då masstransport av klorerade lösningsmedel ej bedöms kunna ske i östlig riktning. Modellranden baserades på markelevation samt jordartskartan där den placerades på så vis att den angränsade till höga markelevationer där berget var beläget ytligt.

I västlig riktning valdes modelldomänen på så vis att uppmätta grundvattennivåer dokumenterade från brunnsarkiv skulle inkluderas. Provpunkterna i vilka grundvattennivåer uppmäts ses i appendix A1, figur A1. Det är lämpligt att medta dessa punkter då de används för att kalibrera modellen utefter samt är viktiga vid ansats av randvillkor.

I figur 19 ses den valda modelldomänen där Whirlpool är markerat med ett kryss.



Figur 19 Vald modelldomän med underliggande GSD–Ortofoto och GSD–Ortofoto25. © Lantmäteriet

4.1.2 Randvillkor

Baserat på den definierade modelldomänen ansattes lämpliga randvillkor baserat på rådande geologiska och hydrologiska förhållanden. Förhållandena jämfördes med de randvillkoren presenterade i avsnitt 4.1.3 varefter lämpliga randvillkor för modelldomänen kunde väljas. I den konceptuella modellen definierades randvillkor genom att ansätta olika egenskaper till ändpunkterna, eller noderna, längs med ränderna.

Längs med Motala ström är den hydrauliska potentialen känd och det bedömdes därigenom som lämpligt att ansätta ett Dirichlet–randvillkor, *constant head*, längs med denna rand. Den hydrauliska potentialen kunde då specificeras i noderna A och B, se figur 20, i den konceptuella modellen varefter potentialen varierar linjärt längs randen.

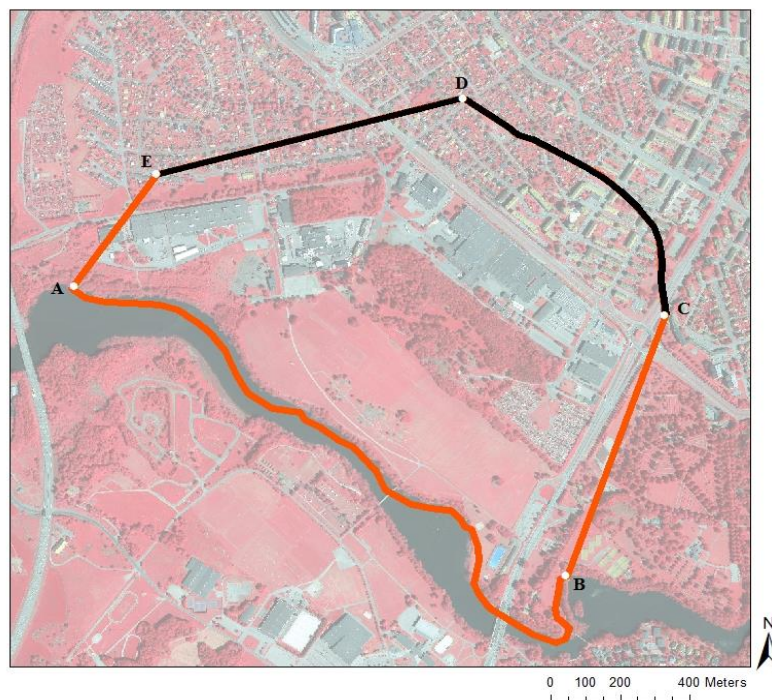
I noden C var den hydrauliska potentialen inte känd, däremot finns grundvattennivåer uppmätta invid Whirlpool samt nära punkten E. Därigenom kunde den hydrauliska gradienten för området beräknas under grova antagandet att den hydrauliska potentialen är konstant genom området. Då den hydrauliska gradienten beräknats kunde potentialen

i punkten C interpoleras och därigenom kunde randvillkoret *constant head* appliceras även längs randen BC.

Längs med den övre modellranden, sträckan CD, kunde det från geologi och jordartskarta, enligt avsnitt 6.5, ses att en ås löper i nordvästlig riktning vilken fungerar som en grundvattendelare enligt tidigare resonemang. Detta medför att det ej kommer ske ett flöde genom denna rand vilket medför att ett Neumann-randvillkor, specificerat flöde eller *no flow*, är ett lämpligt randvillkor. Längs med sträckan DE sker heller inget flöde av grundvatten, från Whirlpool sett, indikerat av den höga elevationen i området därigenom valdes randvillkoret *no flow* även längs denna sträcka.

Invid punkten E finns uppmätta grundvattennivåer dokumenterade i brunnsarkivet. Det kunde ses att potentialen minskar från punkten E i riktning mot Motala ström vilket ses i uppmätta grundvattennivåer i appendix B tabell B1. Baserat på detta kunde potentialen specificeras längs randen EA genom ansats av ett Dirichletrandvillkor där potential ansattes i noderna E och A.

I figur 20 ses modelldomänen med markerade ränder, där orange färg motsvarar val av randvillkoret Dirichlet och svart representerar val av randvillkoret Neumann.



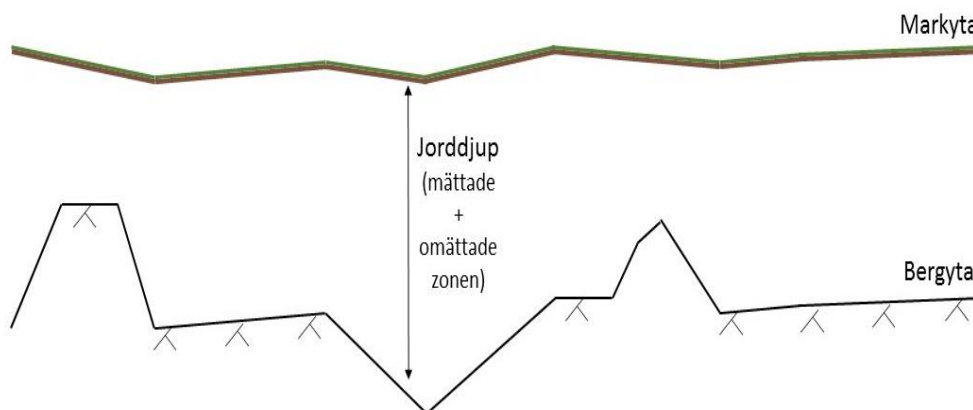
Figur 20 Valda randvillkor med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. © Lantmäteriet

4.1.3 Lager

För att framta en tredimensionell modell över grundvattenakviferen importerades data över bergets elevation samt uppmätta grundvattennivåer. Bergets nivå kommer då motsvara den mättade zonens botten och grundvattenytan är dess övre rand. Det antogs att berget är impermeabelt vilket innebär att inget grundvattenflöde sker genom sprickor i berggrunden. Detta då inga sådana mätningar utförts samt att det är svårt att avgöra eventuella sprickors utbredning i rummet. De provtagningar som genomförts har dock påvisat att halter klorerade lösningsmedel i berggrundvatten är låga.

Djup till berg fanns uppmätt i punkter invid Whirlpool men inte i övriga modelldomänen. För att uppskatta djup till berg i övriga andelar av domänen interpolerades djup till berg baserat på markytans läge, figur 14, och jorddjup, figur 12, i dessa punkter. På så vis erhöles en dataserie över bergets position i akviferen vilka kunde interpoleras som den mättade zonen botten.

Det kunde konstateras att bergytan i modelldomänen varierar lokalt samt att berg i dagen är frekvent förekommande, därav medför osäkerheter i lagerinterpolering. I figur 21 ses en konceptuell bild över markytan och jorddjup vilka användes för att interpolera bergets djup i ett antal punkter.



Figur 21 Konceptuell bild över hur markytan och det kända jorddjupet användes för att interpolera bergytans nivå.

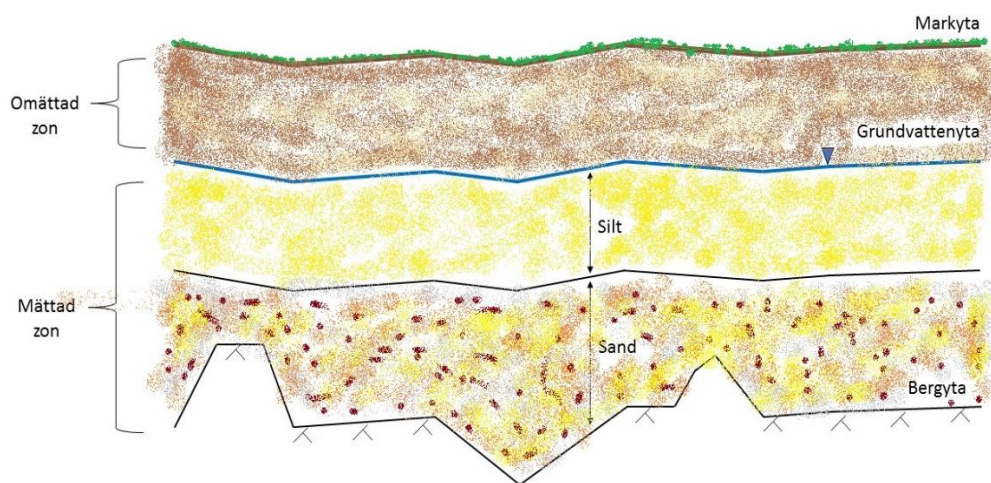
I den konceptuella modellen interpolerades grundvattennivån vilken representerar det övre lagrets gränssyta. Grundvattennivån interpolerades baserat på uppmätta grundvattennivåer invid Whirlpool samt grundvattennivåer som erhöles från SGU:s brunnsarkiv längs randen EA i figur 20.

Jordlagerföljden bestämdes som nämnt i vissa punkter invid Whirlpool där det kunde ses att jordarten var av grövre material såsom grusig sand, sandigt grus och siltig grusig sand i den mättade zonen invid Whirlpool. Från jordartskartan, figur 11, ses att jordmaterialet i den nordöstra domänen består av isälvsediment samt postglacial sand vid ytan. Dessa jordarter finns även i djupare andelar av marken och det kunde konstateras att jordmänen var relativt uniform. Det antogs därför att den mättade zonen bestod av ett lager invid Whirlpool.

Från jorddjupskartan med ovanliggande vald modelldomän, se appendix I figur I1, kunde ses att i det västra partiet av modelldomänen invid Motala ström är jordlagret tjockare än i övriga modellområdet med en mäktighet omkring 20 meter. I detta område finns inga genomförda jordlagerföljdsundersökningar eller uppmätta grundvattennivåer, därav är det svårt att avgöra den mättade zonen utseende. Som tidigare nämnt löper en isälvsformation parallellt med den nordliga modelldomänen. Enligt teori kring avsättning av en isälvsformation, beskrivet i avsnitt 3.1.3, är det känt att jordarter närmare åsen är grövre medan finare material kan röra sig längre från isälven innan de avsätts. Genom att betrakta jordartskartan kan detta beteende observeras inom modelldomänen och det är därför troligt att det under det finare ytliga materialet, finns ett underliggande mer högkonduktivt lager. Då information saknas rörande jordlagerföljd eller

grundvattennivåer i området kan förhållandet mellan dessa lager inte fastställas. Därigenom får det grova antagandet att förhållandet mellan dessa två lager är 1:1 tas, vilket skulle innebära att hälften av lagret är mer högkonduktivt medan den andra halvan lågkonduktivt.

För att interpolera gränsen mellan dessa två lager modellerades initialt grundvattenflödet med ett lager varpå den simulerade grundvattennivån antecknades. Då grundvattennivån i detta område bestämts antogs att denna motsvarade den mättade zonen övre gräns, medan berget motsvarar det undre gränsen av den mättade zonen. Då det antogs att fördelningen mellan sand- och siltlagret var 1:1 kunde en dataserie skapas, vilken då är mittpunkten mellan berget och grundvattenytan. På så vis skapas en dataserie vilken representerar gränsen mellan silt- och sandlagret. Detta ses konceptuellt i figur 22.



Figur 22 Konceptuell bild över de två lagren i det djupa partiet av modellen i västra hörnet av området.

Ofta antas som nämnt att flödet, och den hydrauliska konduktiviteten, är konstant i olika riktningar, men då två lager finns är detta inte fullständigt representativt då det även sker ett vertikalt flöde vilket kan vara olika stort beroende av de olika lagrens egenskaper. Då information om det vertikala flödet saknas kan en anisotropifaktor ansättas i MODFLOW. Under isotropa förhållanden, det vill säga då flödet är detsamma i x-, y- och z-riktning är anisotropifaktorn 1. Då information om flödena i olika riktningar inte finns tillgänglig, antas en anisotropifaktor för att ta hänsyn till eventuella skillnader i flödeshastighet (Harbaugh et al., 2000; AQUAVEO 2017).

4.1.4 Grundvattenbildning

Den generella grundvattenbildningen för Norrköpingsområdet kunde beräknas då genomsnittlig nederbörd, avdunstning samt evaporation var kända. Från SMHI:s databas *Öppna Data* kunde information kring total nederbördsmängd per månad mellan åren 1993–2016 erhållas. Baserat på den totala nederbörden per månad kunde den genomsnittliga årliga nederbördsmängden beräknas vilken presenteras i tabell 9.

Vad gäller avdunstning eller evaporation fanns ingen platsspecifik information att tillgå. Från SMHI erhöles den genomsnittliga avdunstningen i området vid Norrköping. Den årliga avdunstningen i Sverige mellan åren 1961–1990 i Norrköping ses i appendix F, figur F1 (SMHI, 2017). Det kan ses att den årliga medelemparationen för området kring Norrköping är 400–500 mm/år, vilket ger en genomsnittlig avdunstning på 450 mm/år.

Grundvattenbildningen beräknas då genomsnittlig årsnederbörd och avdunstning för området är känt, resultatet ses i tabell 9 nedan.

Tabell 9 Genomsnittlig nederbörd, avdunstning och grundvattenbildning baserat på data från SMHI. (2017)

Process	Nederbörd	Avdunstning	Grundvattenbildning
[mm/år]	555	450	105

I andelar av modelldomänen där marken var hårdgjord, vilket ses i figur 8, ansattes ett lägre värde för grundvattenbildning eftersom mindre vatten kan infiltrera till den mättrade zonen. Värdet 10,5 mm/år ansattes i dessa andelar av modelldomänen.

4.2 KONCEPTUELL TRANSPORTMODELL

För att undersöka masstransporten av PCE, TCE, cis-1,2-DCE samt VC framtoogs en transportmodell i RT3D baserat på den framtagna flödesmodellen samt den föroreningsituation som råder i området.

4.2.1 Föroreningsituation

Kring Whirlpool har som nämnts provtagning av grundvatten genomförts i syfte att kartlägga föroreningsbilden i området. I flera provpunkter har gränsvärden för halter vilka ej får överskridas i grundvatten detekterats för de klorerade lösningsmedlen PCE, TCE, cis-1,2-DCE samt VC.

Peristaltisk pump

I tabell 10 ses uppmätta halter av PCE, TCE, cis-1,2-DCE samt VC i grundvatten, vilka uppmätts med peristaltisk pump. Halterna jämfördes med riktvärdena för grundvatten, vilka ses i avsnitt 2.2.6, och är markerade med grönt då de ej överskrider riktvärdet enligt något av kriterierna, markerade med gult när den halten överstiger riktvärdet enligt något av riktvärden och slutligen markerade med rött då de överskrider riktvärdet enligt samtliga använda jämförvärden. Det kan ses att riktvärdet i flertalet punkter är överskridet enligt samtliga riktvärden och de är därav markerade med rött. I appendix A.4, figur A4–A7, ses de olika provpunkternas placering i området markerade baserat på hur de förhåller sig till riktvärdena. Sammanställda värden över uppmätta halter i grundvatten ses i appendix C, tabell C1.

Tabell 10 Uppmäta halter PCE, TCE, DCE samt VC i grundvatten med peristaltisk pump.

Provpunkt	PCE [µg/l]	TCE [µg/l]	DCE [µg/l]	VC [µg/l]
Intervall för tillåtna värden relativt riktvärdena	1 – 10	1 – 500	1 – 70	0,2 – 5
W1501	0,70	20,7	0,22	1,0
15WP56	0,20	0,10	0,10	1,0
15WP57	0,20	0,10	6,08	1,0
14WM214	0,10	0,42	17,0	10,00
14WM215	0,20	0,60	11,40	9,00
14WM08	0,10	0,10	0,10	0,20
PP104	0,20	0,10	0,10	1,0
PS1_1	0,10	43,0	30,6	0,01
PS2_1	77,6	93,3	254	10,80
PS4	0,10	0,05	0,05	0,01
PS5_1	0,10	16,20	10,2	0,01
PS6	0,10	0,05	0,05	0,01
PS7_1	0,10	7,66	23,2	1,0
PS8	0,32	0,05	0,05	0,01
PS9	0,10	0,05	0,05	0,01
PS1_2	0,10	349,00	1520	14,9
PS2_2	1250	464	872	211
PS5_2	0,10	10,0	9,66	0,01
PS7_2	0,10	7,58	26,6	0,01
M24	0,10	0,05	0,05	0,01
MIP26	0,23	2,87	0,05	0,01
MIP13	2,29	728	14,8	1,60

* Rött motsvarar att halten överskrider samtliga riktvärden, gult motsvarar att halten överskrider med avseende på något av riktvärdena och slutligen motsvarar grönt att halten inte överskrider med avseende på något av de beaktade riktvärdena.

MIP-sondering

I tabell 11 redovisas uppmätta maximala halter från MIP-sonderingen i punkter belägna i den mättade zonen. I appendix A.2, figur A2, ses de punkter i vilka MIP-sondering genomförts.

Tabell 11 Uppmätta halter PCE, TCE, DCE samt VC i grundvatten med MIP-sond.

Provpunkt	PCE [µg/l]	TCE [µg/l]	DCE [µg/l]	VC [µg/l]
Intervall för tillåtna värden relativt riktvärdena	1 – 10	1 – 500	1 – 70	0,2 – 5
M103	0	100	0	0
M105	675	40 000	40 000	150
M109	0	5000	2000	0
M111	0	4000	4000	0
M113	0	4500	4000	0
M114	0	10 000	5750	0
M115	0	1000	0	0
M116	0	1000	0	0
M117	0	900	0	0
M118	0	125	9500	0
M120	0	0	6250	0
M122	1750	7000	35 000	1500
M123	1750	10 000	12 000	150
M125	100	225	0	0
M126	300	285	0	0
MIP13	1658	3887	33	10
MIP21	193	253	10	10
MIP20	104	187	10	10
MIP71	10	397	1212	36

* Rött motsvarar att halten överskrider samtliga riktvärden, gult motsvarar att halten överskrider med avseende på något av riktvärdena och slutligen motsvarar grönt att halten inte överskrider med avseende på något av de beaktade riktvärdena.

4.2.2 Ansats av koncentration

Genom att betrakta den föroreningsituation som råder ansattes koncentrationer av klorerade lösningsmedel i den konceptuella i modellen i punkter vilka klorerade lösningsmedel uppmätts i. För att undersöka hur ansats av initial koncentration påverkade spridningen genomfördes separata simuleringar med ansats av halter uppmätta med peristaltisk pump samt med halter uppmätta vid MIP-sondering.

4.2.3 Ansats av transport- och nedbrytningsparametrar

För att modellera sekventiell nedbrytning och spridning av klorerade lösningsmedel behövdes indata såsom adsorptionsförmåga och nedbrytningshastighet definieras för de olika komponenterna PCE, TCE, cis-1,2-DCE samt VC, vilka ses i avsnitt 5.3.2 samt 5.3.4. I den konceptuella transportmodellen kunde dessa parametrar ansättas separat för de olika komponenterna.

4.3 NUMERISK GRUNDVATTENMODELL

Skapandet av den numeriska modellen innefattar ansats av numeriska randvillkor samt skapandet av ett lämpligt rutnät.

4.3.1 Randvillkor

För att ansätta randvillkoren *constant head* längs ränderna EA, AB samt BC, vilka ses i figur 20, behöver potentialerna i dessa punkter definieras i den konceptuella modellen. Längs Motala ström är potentialen känd, 18,8 m, och därav kan denna ansättas i punkterna A och B.

I punkten E kunde potentialen ansättas till 21 m baserat på de grundvattennivåer som dokumenterats i SGU:s brunnarkiv. I punkten C däremot krävs att potentialen beräknas då information om potentialen i detta område saknades. För att beräkna potentialen i C behöver den hydrauliska gradienten beräknas. Grundvattennivåer invid Whirlpool samt vid punkten E, vilka ses i appendix B tabell B1, är kända. Genom att anta att den hydrauliska gradienten är relativt konstant genom modelldomänen kunde den beräknas enligt ekvation (7).

$$\frac{dh}{dL} = \frac{h_{Whirlpool} - h_{brunnarkiv}}{L_{akvifer}} = \frac{21 \text{ m} - 25 \text{ m}}{1600 \text{ m}} = 0,0025 \text{ [-]} \quad (7)$$

Där	$L =$	domänens längd (1600)	[m]
	$h =$	grundvattnets potential	[m]
	$dh/dl =$	hydraulisk gradient	[-]

Då den hydrauliska potentialen beräknats kunde potentialen i punkten C bestämmas, på samma vis som ovan, då avståndet mellan punkterna är känt. Beräkningen ses i ekvation (8).

$$0,0025 = \frac{x \text{ m} - 25 \text{ m}}{300 \text{ m}} \rightarrow x = 25,75 \text{ m} \quad (8)$$

Potentialen i punkten C ansattes därav initialt till 25,75 meter varefter grundvattenmodellen kalibrerades genom att jämföra de simulerade grundvattennivåerna med uppmätta grundvattennivåer.

Längs med randen CD och DE ansätts som nämnt randvillkoret *no flow* vilket innebär att potentialen inte behöver specificeras i dessa punkter.

4.3.2 Rutnät

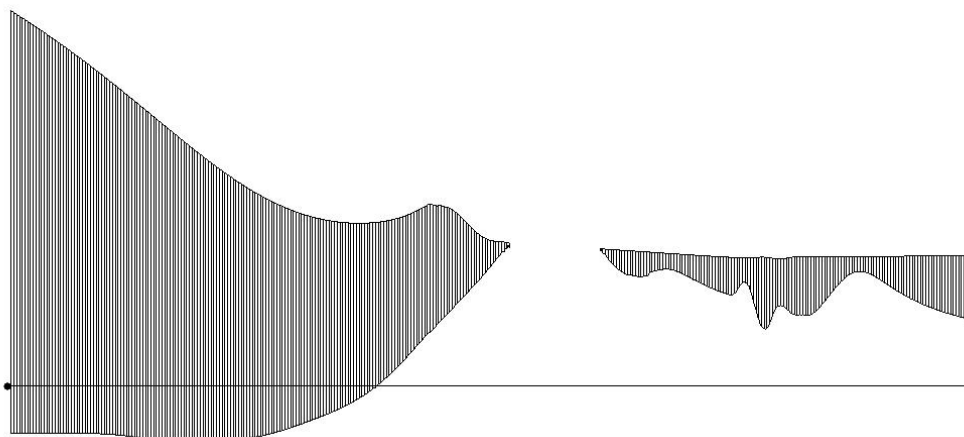
I figur 23 ses den erhållna numeriska modellen. De ljusgrå partierna av modellen representerar andelar av modellområdet genom vilka inget grundvattenflöde sker, vilket är väntat om topografin i området beaktas, se figur 14. I mitten av modelldomänen sker inget flöde vilket bedöms som rimligt om topografi samt jorddjup beaktas, se figur 12 och 14, där det kan ses att markelevationen är hög i detta område samt att berget är beläget ytligt. Vid platsbesök kunde ses att motsvarande område var beläget högt och därigenom agerade som en barriär för grundvattenflödet.

Olika storlek på cellerna i rutnätet undersöktes innan ett finare rutnät med celler av dimensionen 5x5 meter valdes. Det totala modellområdet är ungefär 1,4 km² stort. I figur 23 ses den numeriska modellen, till höger ses den rödmarkerade andelen av modelldomänen på nära håll för att cellstorleken på rutnätet ska ses tydligare.



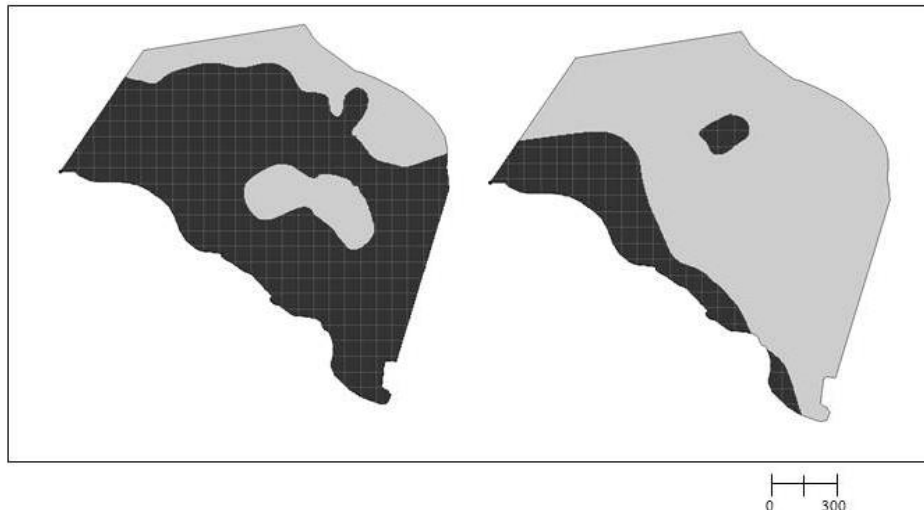
Figur 23 Framtagen numerisk modell samt rutnät i MODFLOW.

Topografin i området är som nämnt varierande då berg i dagen är frekvent förekommande. I figur 24 ses modellområdet i genomskärning längs med den rad markerad med blått i figur 23. Till vänster ses att den mättade zonen har större mäktighet vilket representerar den andel av modelldomänen där två lager ansatts, i det sydvästra hörnet av modelldomänen, där mäktigheten är omkring 20 meter. Till vänster i figur 24 ses området invid Whirlpool där jordlagret är tunnare. Som ses i figuren är berget invid Whirlpool ojämnt.



Figur 24 Modelldomänen invid Whirlpool i genomskärning längs med raden markerade med blått i figur 23.

I figur 25 ses de två lager vilka interpolerats i MODFLOW. Till vänster ses det ytligaste lagret i den mättade zonen och till höger ses det underliggande högkonduktiva lagrets utsträckning.



Figur 25 De två lagrens utsträckning genom området med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. © Lantmäteriet

4.4 KALIBRERING OCH KÄNSLIGHETSANALYS

Baserat på litteraturvärden och uppmätta parametrar kalibrerades flödesmodellen varpå känslighetsanalys av flödesmodellen– samt transportmodellen genomfördes. Dessutom undersöktes värsta spridningsscenario.

4.4.1 Kalibrering

Initialt kalibrerades grundvattenmodellen där värden för hydraulisk konduktivitet och effektiv porositet ansattes varefter kalibrering genomfördes tills genererade grundvattennivåer överensstämde med uppmätta i modellområdet.

4.4.2 Känslighetsanalys av grundvattenmodell

Efter att grundvattenmodellen kalibrerats genomfördes en känslighetsanalys för att undersöka grundvattenmodellens robusthet med avseende på hydraulisk konduktivitet samt effektiv porositet. Genererade grundvattenflöden jämfördes med uppmätta för att bedöma rimligheten.

För att undersöka robustheten med avseende på hydraulisk konduktivitet hölls porositeten konstant varefter den hydrauliska konduktiviteten för sand varierades. För att undersöka siltlagrets inverkan på det genererade grundvattenflödet hölls sandlagrets hydrauliska konduktivitet konstant medan siltens hydrauliska konduktivitet varierades.

Då hydraulisk konduktivitet inte fanns uppmätt i området insamlades litteraturvärden för de jordarter som förekommer i området vilka ses sammanfattade i avsnitt 2.1.1. I tabell 12 ses en sammanställning över litteraturvärdena för minimala, maximala samt medelvärden över hydraulisk konduktivitet för sand och silt.

Tabell 12 Använda värden av hydraulisk konduktivitet, 2.1.1 vid kalibrering av modell.

Jordart	Hydraulisk konduktivitet [m/s]		
	min	max	medel
Sand ¹	10^{-6}	10^{-2}	$5 \cdot 10^{-4}$
Silt	10^{-9}	10^{-5}	$5 \cdot 10^{-7}$

Känslighetsanalys genomfördes även med avseende på effektiv porositet. Den hydrauliska konduktiviteten hölls då konstant vid medelvärdet varefter den effektiva porositeten varierades. Värden över effektiv porositet är baserade på litteraturvärden för aktuella jordarter presenterade i avsnitt 2.1.1 vilka ses sammanfattade i tabell 13.

Tabell 13 Effektiv porositet för grus, sand och silt enligt avsnitt 2.1.1.

Material	Effektiv porositet [%]		
	min	max	Medel
Grus – Sand	5	25	15
Silt	5	25	15

4.4.3 Känslighetsanalys av transportmodell

Då platsspecifika parametrar för adsorptionsförmåga och nedbrytningshastighet inte fanns uppmätt användes litteraturvärden från studier där jordarter och geologiska förhållanden liknade de vid Whirlpool. Dessa värden kan variera stort och det bedömdes därför lämpligt att genomföra en känslighetsanalys där dessa parametrar minimerades och maximerades för att undersöka hur olika parameterintervall påverkar nedbrytning och spridning.

För att undersöka adsorptionsparametrarnas påverkan på förorenings-spridningen hölls först reaktionsparametrarna för PCE, TCE, DCE samt VC konstanta varefter adsorptionsparametrarna varierades. Parametrarna baserades på litteraturvärden presenterade i avsnitt 2.2.3. vilka ses sammanfattade i tabell 14.

Tabell 14 Adsorptionsparametrar enligt avsnitt 2.2.3.

Förening	K_d [m^3/kg]	K_d [m^3/kg]	K_d [m^3/kg]
	Min	Max	Medel
PCE	$4,18 \cdot 10^{-9}$	$8,4 \cdot 10^{-4}$	$6,29 \cdot 10^{-6}$
TCE	$2,14 \cdot 10^{-9}$	$6,2 \cdot 10^{-4}$	$9,17 \cdot 10^{-6}$
DCE	$1,3 \cdot 10^{-9}$	$1,7 \cdot 10^{-4}$	$6,5 \cdot 10^{-6}$
VC	$8 \cdot 10^{-12}$	$1,2 \cdot 10^{-4}$	$4,6 \cdot 10^{-8}$

För att undersöka transportmodellens beroende av reaktionsparametrarna hölls adsorptionskonstanterna konstanta varefter reaktionsparametrarna varierades. Reaktionsparametrarna vilka användes baserades på litteraturvärden presenterade i avsnitt 5.3.4 och ses sammanfattade i tabell 15.

Tabell 15 Nedbrytningskonstanter från för PCE, TCE, DCE samt VC enligt avsnitt 6.3.4.

Ämne	λ [dag^{-1}]	λ [dag^{-1}]	λ [dag^{-1}]
	Min	Max	Medel
PCE	0,00073	0,020	0,0137
TCE	0,00088	0,010	0,0031
DCE	0,00055	0,017	0,0045
VC	0,00040	0,012	0,0016

4.4.4 Värsta scenario

För att undersöka hur omfattande en potentiell spridning av PCE, TCE, DCE samt VC skulle vara vid värsta scenario utfördes simuleringar där förhållanden vilka tillåter maximal spridning appliceras. Sådana förhållanden väntas vara då minimal fastläggning och minimal nedbrytning råder.

Dessutom genomfördes modellering där maximal hydraulisk konduktivitet samt porositet applicerades vilket bör medföra att grundvattnet kan flöda snabbare genom den mättade zonen.

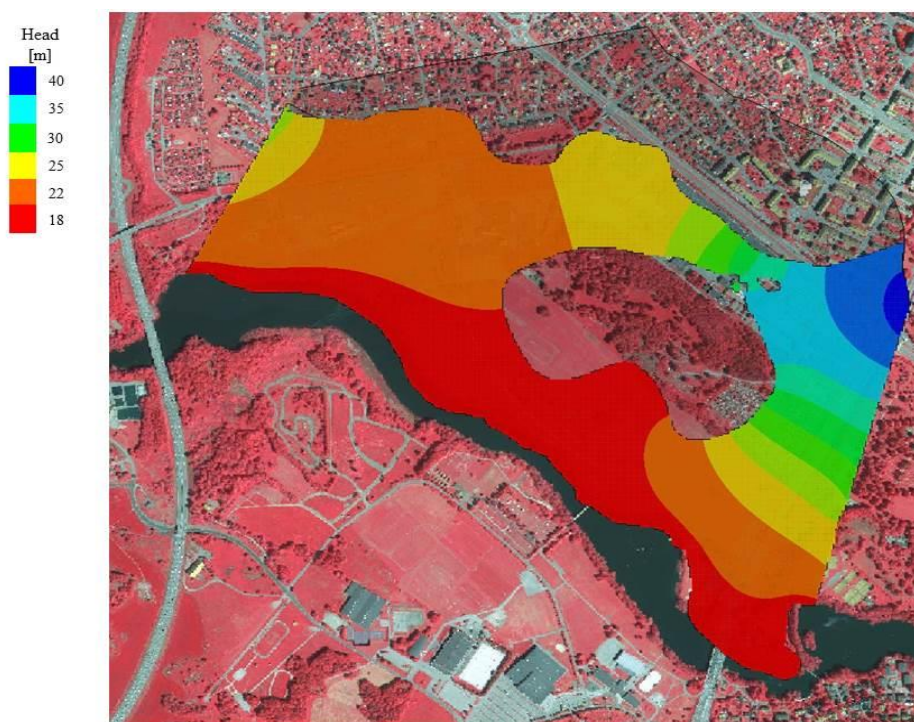
4.5 GRUNDVATTENMODELLERING

Resultatet av den kalibrering och känslighetsanalys som genomfördes med avseende på hydraulisk konduktivitet och effektiv porositet presenteras i följande avsnitt.

4.5.1 Kalibrering

Då hydraulisk konduktivitet och effektiv porositet inte fanns uppmätt i området kalibrerades modellen utifrån värden presenterade i tabell 1 och 2, avsnitt 2.1.1. Invid Whirlpool fanns grundvattennivåer uppmätta, på så vis kunde konstateras inom vilket intervall parametrar kunde ansättas för att överensstämna med dessa. Då information om grundvattennivåer i övriga modelldomänen inte fanns var det svårt att kalibrera runt om i området, därav utgicks från de värden som genererade rimliga grundvattennivåer invid Whirlpool, sedan togs medelvärden inom dessa intervall.

I figur 26 ses det erhållna grundvattenflödet genom området efter kalibrering.



Figur 26 Kalibrerad grundvattenmodell kring området runt Whirlpool med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. © Lantmäteriet

I tabell 16 ses de parametervärden som användes för att generera det grundvattenflöden som ses i figur 26.

Tabell 16 Vald hydraulisk konduktivitet samt effektiv porositet för den slutgiltiga grundvattenmodellen baserat på avsnitt 4.4.2.

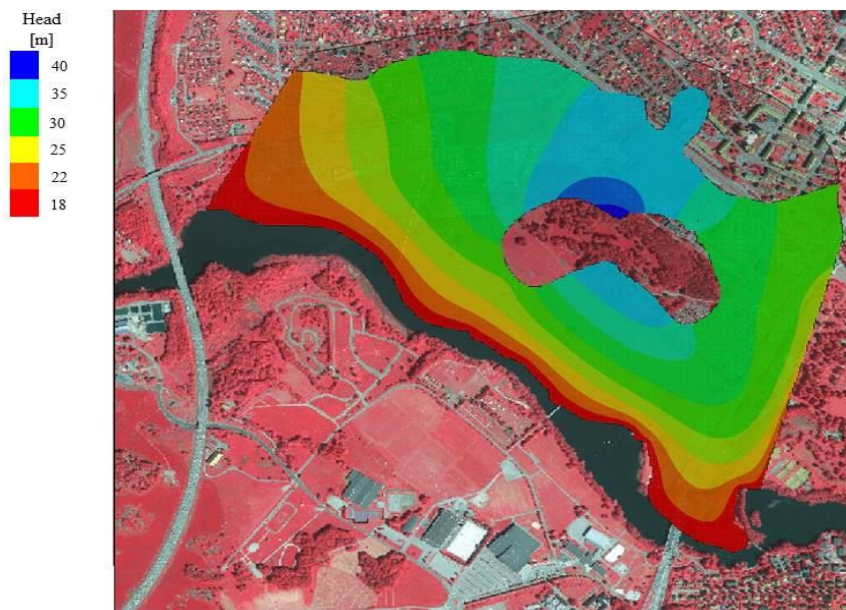
Jordart	Hydraulisk konduktivitet [m/s]	Porositet [%]
Sand ¹	$5 \cdot 10^{-4}$	15
Silt	$5 \cdot 10^{-7}$	15

4.5.2 Känslighetsanalys

Sedan utfördes en känslighetsanalys med avseende på hydraulisk konduktivitet och effektiv porositet för att konstatera inom vilka intervall flödesmodellen är tillförlitlig.

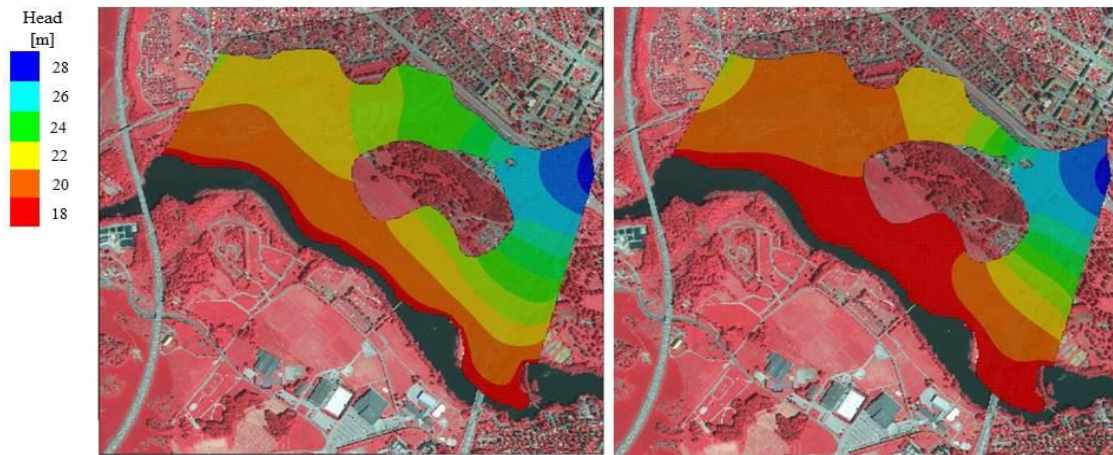
Hydraulisk konduktivitet

I figur 27 ses alstrat grundvattenflöde vid ansats av minimal hydraulisk konduktivitet, 10^{-6} m/s och medelvärde av effektiv porositet vilken hölls konstant.



Figur 27 Grundvattenflöde vid ansats av minimal hydraulisk konduktivitet med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. Den effektiva porositeten hölls konstant vid medelvärdet. © Lantmäteriet

I figur 28 ses till vänster det genererade grundvattenflöden vid applicering av hydraulisk konduktivitet 10^{-5} m/s samt till vänster den maximala hydrauliska konduktiviteten 10^{-2} m/s för sand.

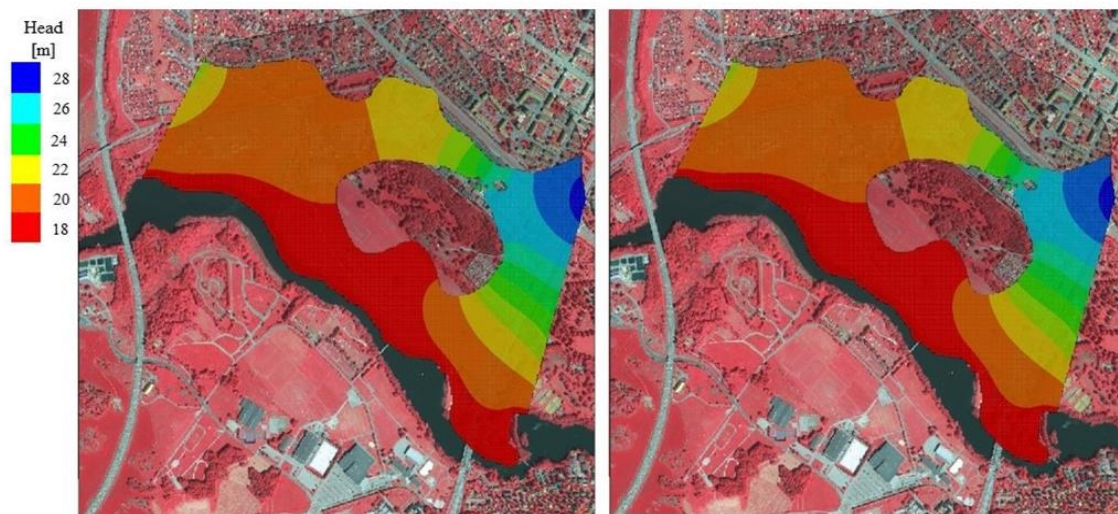


Figur 28 Grundvattenflöde vid ansats av hydraulisk konduktivitet 10^{-5} m/s, till vänster, samt 10^{-2} m/s, till höger med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. Den effektiva porositeten hölls konstant vid medelvärdet. © Lantmäteriet

I appendix J, figur J1, ses grundvattenflödet när den hydrauliska konduktiviteten för silt varierades.

Effektiv porositet

I figur 29 ses det genererade grundvattenflödet vid ansats av minimal effektiv porositet, 5 %, samt maximal effektiv porositet, 25 % och medelvärdet av hydraulisk konduktivitet användes.



Figur 29 Grundvattenflöde vid applicering av minimal effektiv porositet, 5 %, till vänster samt maximal effektiv porositet, 25 %, till höger med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. Den hydrauliska konduktiviteten hölls konstant vid medelvärdet. © Lantmäteriet

4.6 TRANSPORTMODELLERING

Vid framtagandet av transportmodellen användes den kalibrerade grundvattenmodellen, vilken ses i figur 29, varefter RT3D användes för att simulera föroreningstransport och sekventiell nedbrytning genom den mättade zonen. Spridning simulerades vid ansats av initial koncentration uppmätt med peristaltisk pump samt med MIP-sondering för att

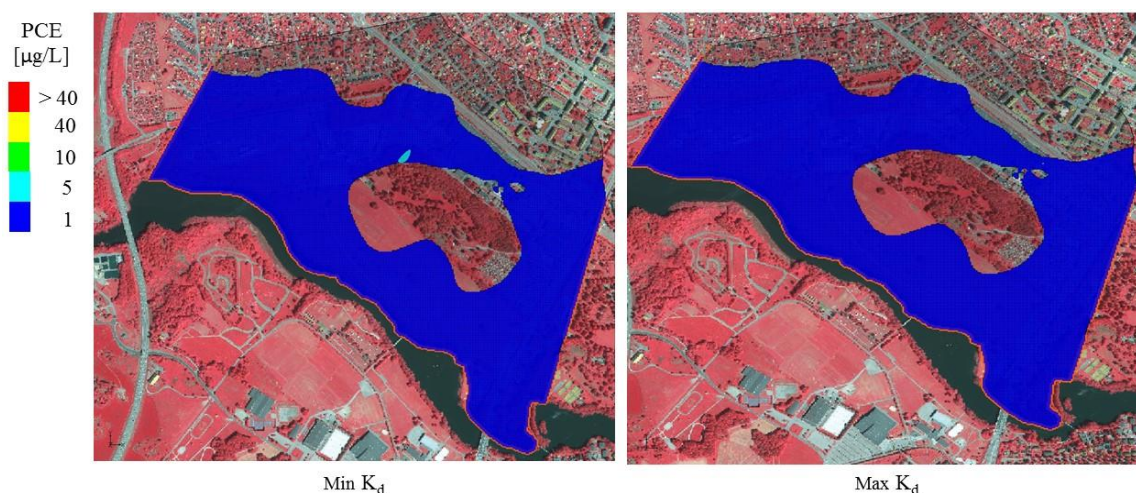
undersöka spridningen efter 10, 30 samt 75 år. Dessutom undersöktes det värsta spridningsscenarioet.

4.6.1 Känslighetsanalys

Värden för adsorption samt reaktionsparametrar ansattes baserat på litteraturvärden för att undersöka spridningens variation i de olika fallen. I känslighetsanalysen appliceras initiala koncentrationer från den peristaltiska pumpen och spridning under ett år beaktas.

Skalan vilka föroreningsplymerna är graderade utefter är baserade på riktvärden presenterade i avsnitt 5.6.1 där halten är markerad med blå färg om genererade halter inte överskrider något av riktvärden, sedan sker gradering på så vis att varje färg representerar överskridning av ett gränsvärde beroende av vilken förorening som betraktas.

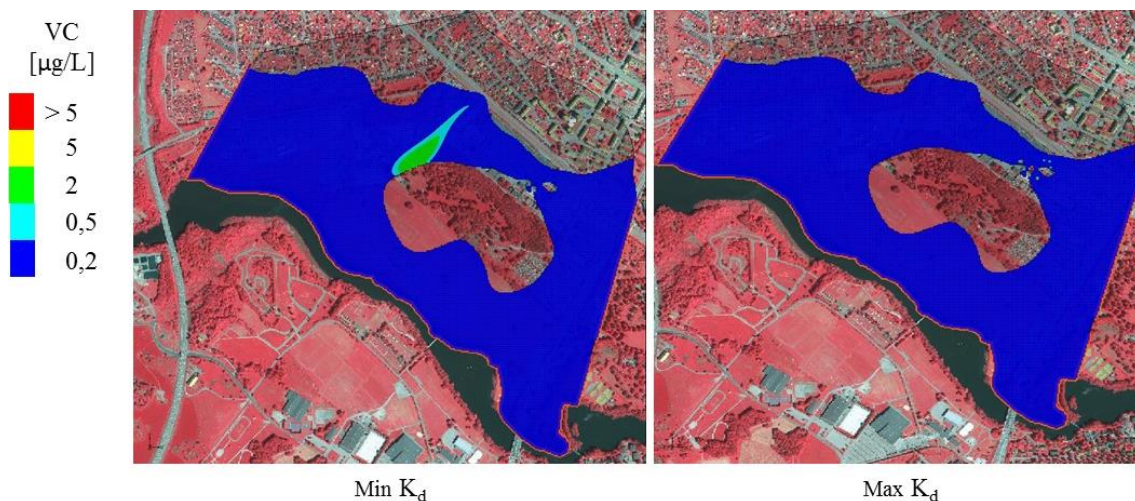
I figur 30 ses spridning för PCE då reaktionsparametrarna hölls konstanta varefter adsorptionsparametrarna varierades. Då maximal fastläggning ansattes förblev PCE invid källzonen, vilket ses tydligare i appendix K figur K1.



Figur 30 Spridning av PCE efter ett år vid ansats av olika adsorptionsparametrar samt reaktionsparametrarna hölls konstanta vid medelvärdet, med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. © Lantmäteriet

För TCE och DCE kunde samma mönster som för PCE ses, vilket ses i appendix K figur K2 och K3.

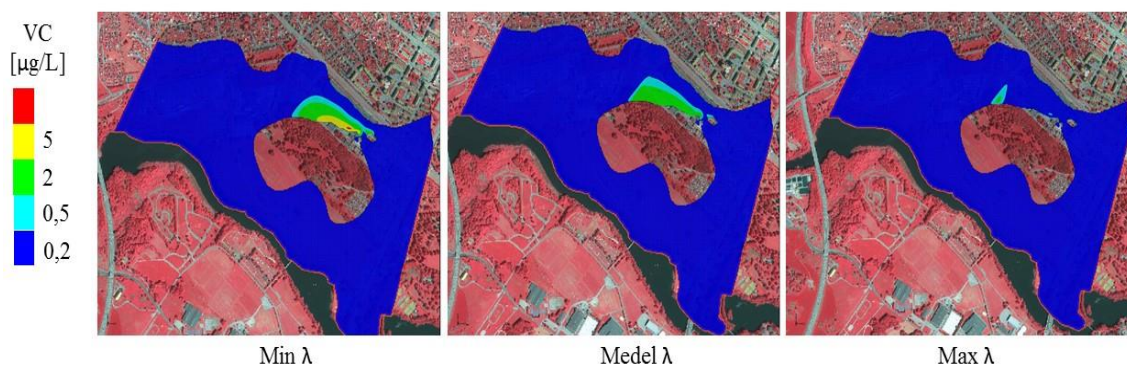
Spridning av VC då reaktionsparametrarna hölls konstanta och adsorptionsparametrarna varierades ses i figur 31. Spridning av VC vid ansats av maximal fastläggning ses tydligare i appendix K figur K4.



Figur 31 Spridning av VC efter ett år vid ansats av olika adsorptionsparametrar samt reaktionsparametrarna hölls konstanta vid medelvärdet, med underliggande GSD–Ortofoto och GSD–Ortofoto25. © Lantmäteriet

Då medelvärdet av adsorption användes och reaktionsparametrarna varierades, kunde ses att för PCE, TCE och cis–1,2–DCE rörde sig föroreningsplymerna inte från källzonen.

I figur 32 ses spridning av VC då adsorptionsparametern hållits konstant medan reaktionsparametrarna varierats.



Figur 32 Spridning av VC efter ett år vid ansats av olika reaktionsparametrar och adsorptionen hölls konstant vid medelvärdet med underliggande GSD–Ortofoto och GSD–Ortofoto25. © Lantmäteriet

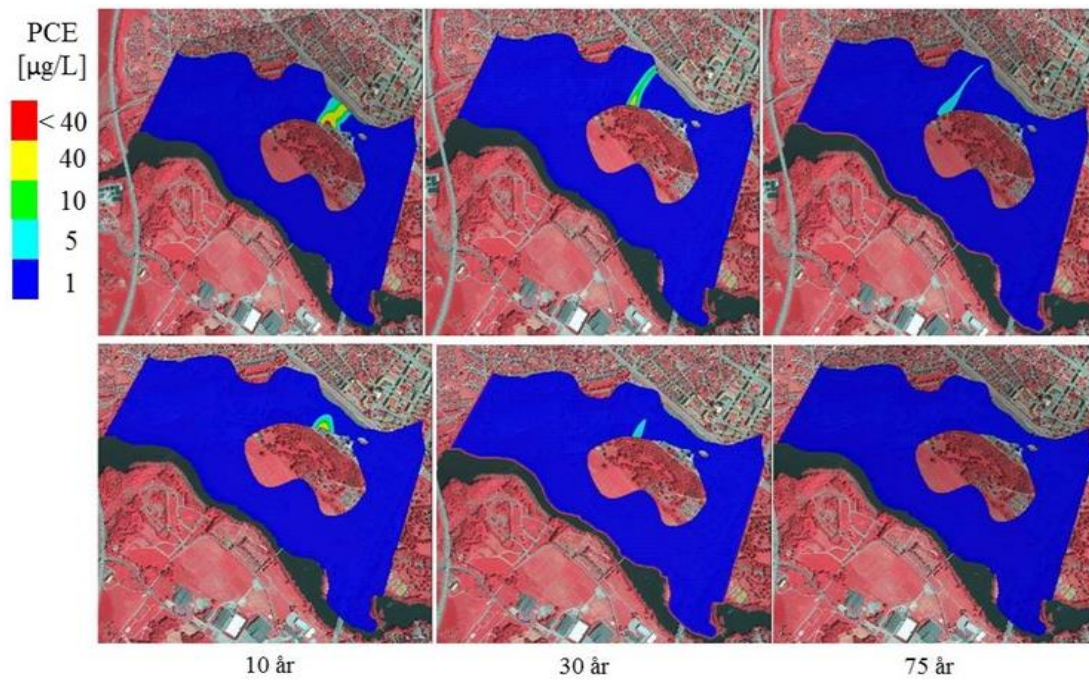
4.6.2 Förorenings-spridning efter 10, 30 samt 75 år

Medelvärden av K_d och λ valdes för att representera hur spridningen blir efter 10, 30 samt 75 år vid ansats av initiala koncentrationer från MIP–sonderingen samt den peristaltiska pumpen. Valda parametrar ses sammanställda i tabell 17.

Tabell 17 Adsorptions– samt reaktionsparametrar baserade på avsnitt 4.4.3.

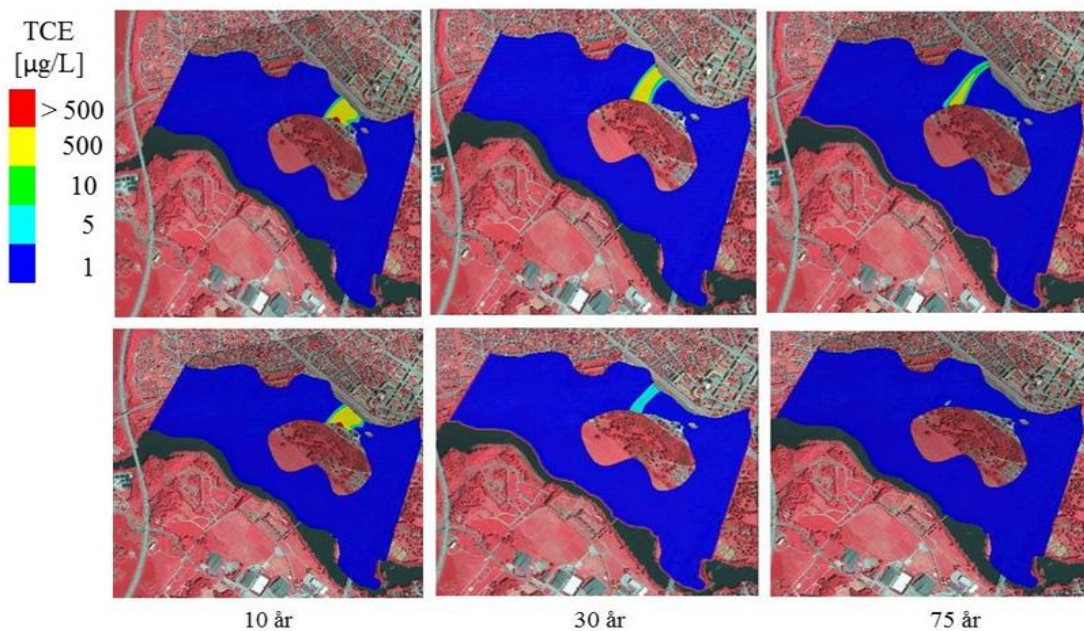
	PCE	TCE	DCE	VC
K_d [m^3/kg]	$6,29 \cdot 10^{-6}$	$9,17 \cdot 10^{-6}$	$6,5 \cdot 10^{-6}$	$4,6 \cdot 10^{-8}$
λ [dag^{-1}]	0,0137	0,0031	0,0045	0,0016

I figur 33 ses spridning av PCE efter 10, 30 och 75 år vid ansats av initiala koncentrationer från MIP–sonderingen överst och ansats av halter från den peristaltiska pumpen underst.



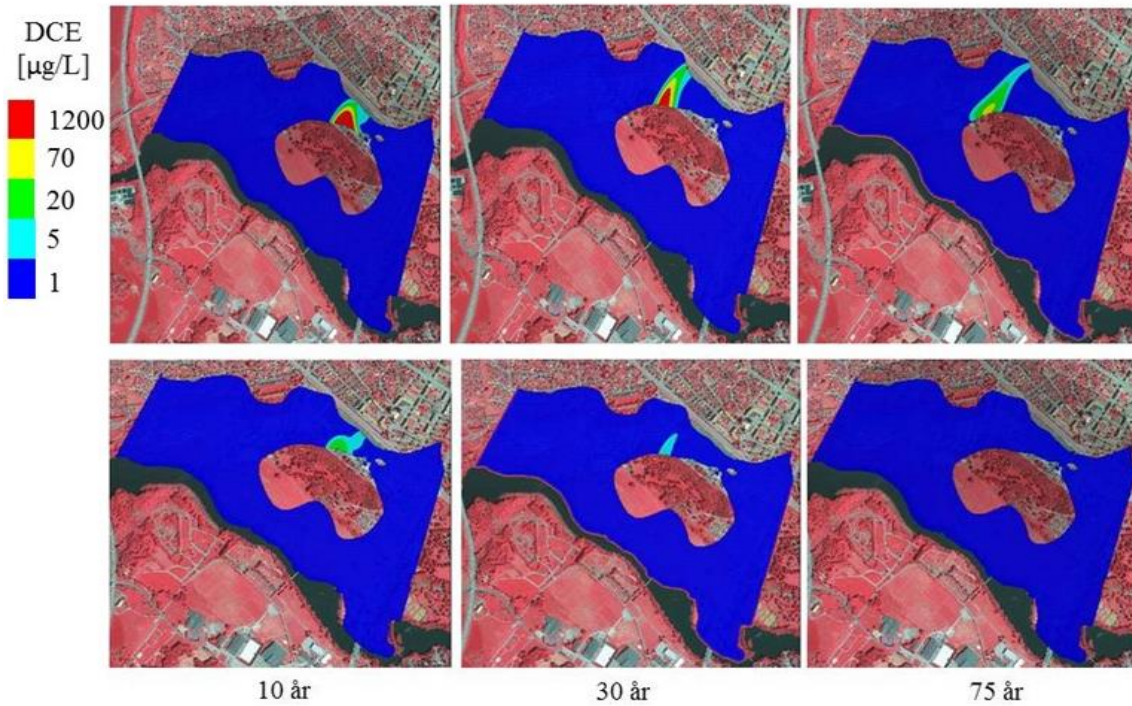
Figur 33 Spridning av PCE efter 10, 30 samt 75 med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. © Lantmäteriet

I figur 34 ses spridning av TCE efter 10, 30 och 75 år vid ansats av initiala koncentrationer från MIP-sonderingen överst och ansats av halter från den peristaltiska pumpen underst.



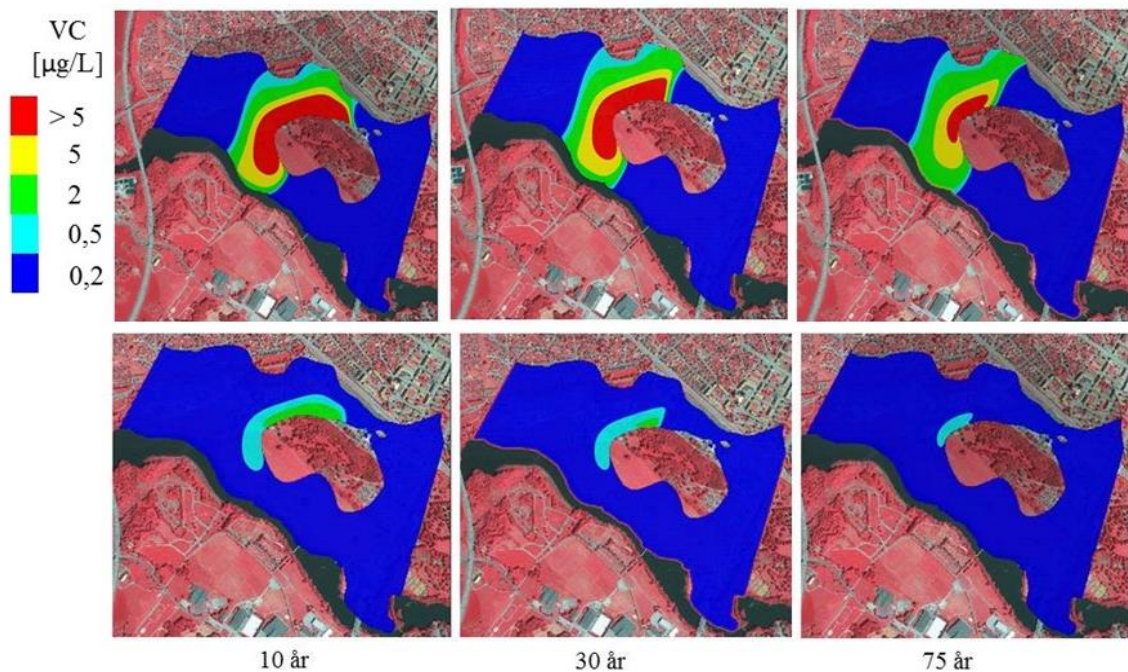
Figur 34 Spridning av TCE efter 10, 30 och 75 år med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. © Lantmäteriet

I figur 35 ses spridning av DCE efter 10, 30 och 75 år med initiala koncentrationer från MIP-sonderingen överst och ansats av halter från den peristaltiska pumpen underst.



Figur 35 Spridning av DCE efter 10, 30 och 75 år med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. © Lantmäteriet

Spridning av VC efter 10, 30 samt 75 år ses i figur 36 vid applicering av initiala koncentrationer från MIP-sonderingen överst och ansats av halter från den peristaltiska pumpen underst.



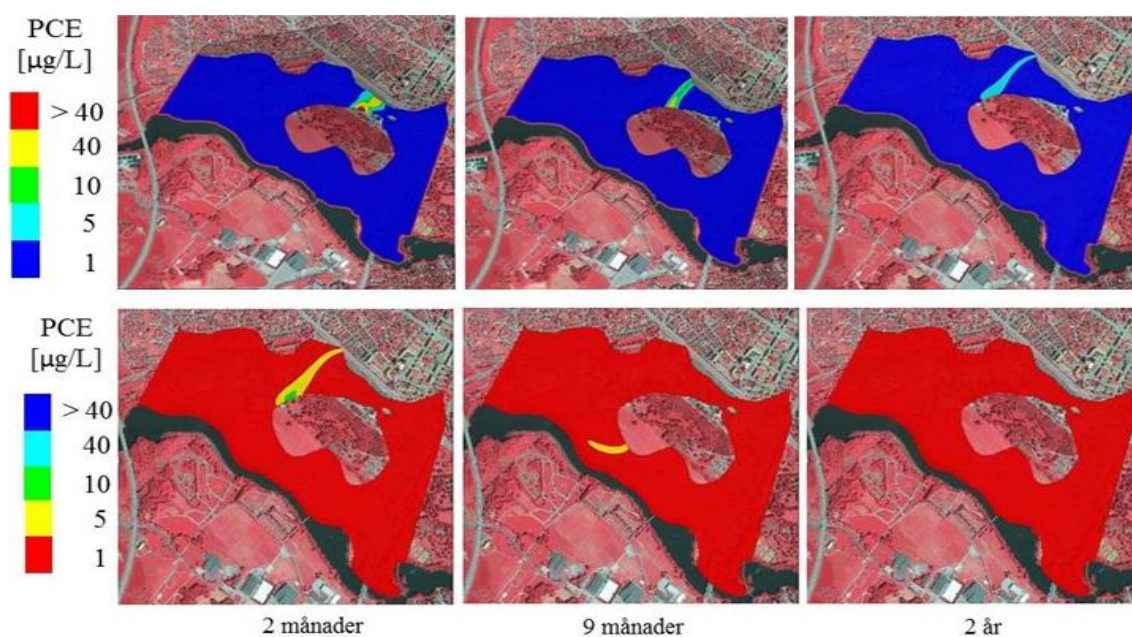
Figur 36 Spridning av VC efter 10, 30 och 75 år med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. © Lantmäteriet

4.6.3 Värsta scenario

För att undersöka spridningen i värsta scenariot undersöktes spridning efter totalt två år dels vid ansats av minimal adsorption och fastläggning där medelvärdet av hydraulisk konduktivitet brukades. Dessutom genomfördes modellering med samma fastläggning- och reaktionsparametrar samt med maximal hydraulisk konduktivitet och effektiv porositet. Spridningsmodellering utfördes för ansats av både initial koncentration både från MIP-sonderingen samt från den peristaltiska pumpen.

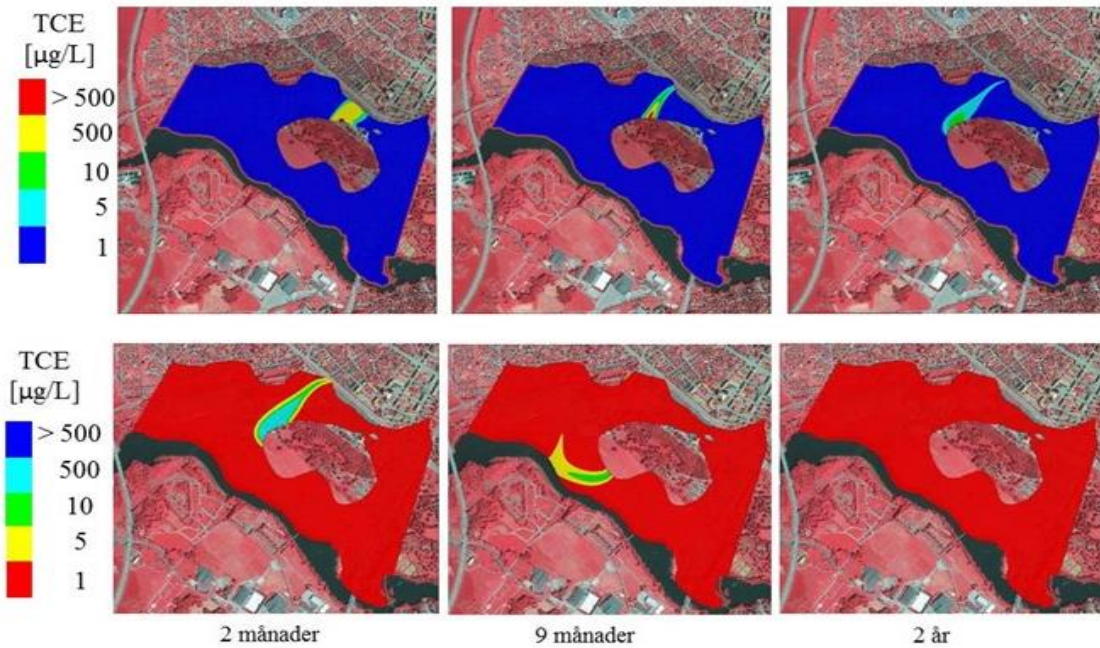
MIP-sondering

I figur 37 ses spridning av PCE efter totalt två år. Överst i figuren ses spridningen då medelvärdet av hydraulisk konduktivitet applicerats, undertill ses spridningen då maximal hydraulisk konduktivitet applicerats. Minimal adsorption och fastläggning ansattes.



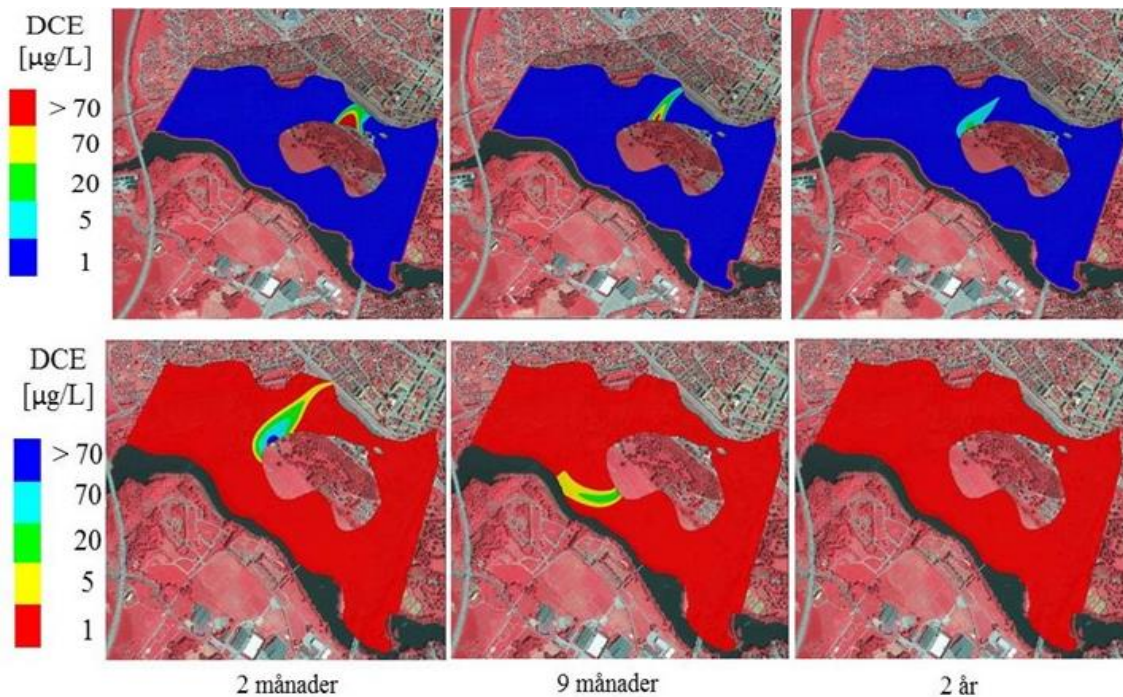
Figur 37 Spridning av PCE efter två månader, nio månader samt efter två år med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. Minimal adsorption och fastläggning ansattes. © Lantmäteriet

I figur 38 ses spridning av TCE efter totalt två år där applicering av medelvärdet av hydraulisk konduktivitet ses överst samt maximal hydraulisk konduktivitet nederst. Minimal adsorption och fastläggning ansattes.



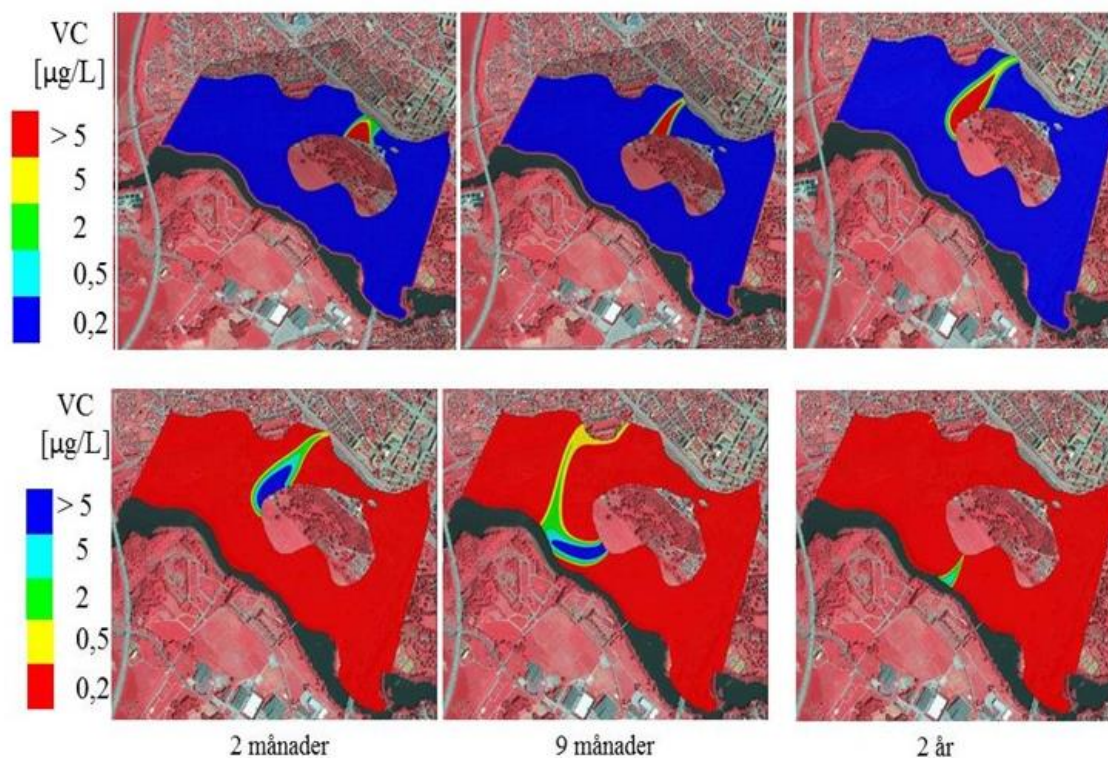
Figur 38 Spridning av TCE efter två månader, nio månader samt efter två år med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. Minimal adsorption och fastläggning ansattes. © Lantmäteriet

I figur 39 ses spridning av DCE efter totalt två år där applicering av medelvärdet av hydraulisk konduktivitet ses överst samt maximal hydraulisk konduktivitet nederst. Minimal adsorption och fastläggning ansattes.



Figur 39 Spridning av DCE efter två månader, nio månader samt efter två år med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. Minimal adsorption och fastläggning ansattes. © Lantmäteriet

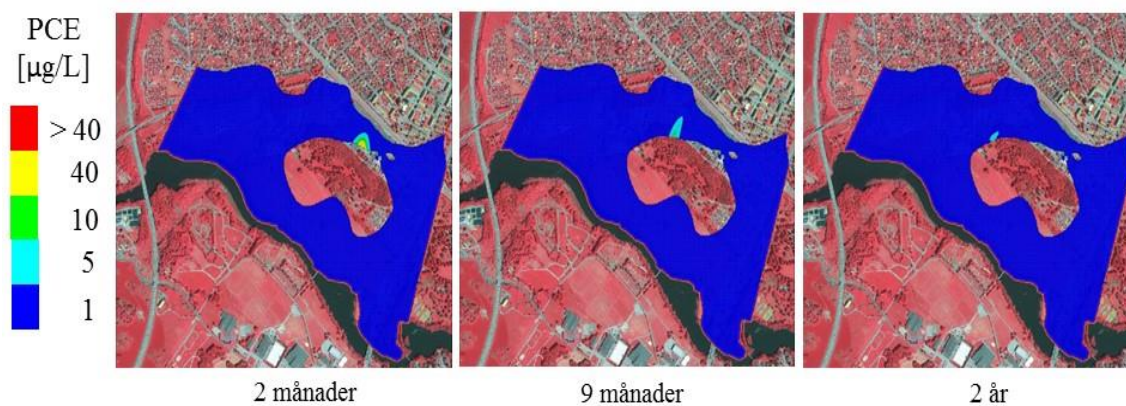
I figur 40 ses spridning av VC efter totalt två år där applicering av medelvärdet av hydraulisk konduktivitet ses överst samt maximal hydraulisk konduktivitet nederst. Minimal adsorption och fastläggning ansattes.



Figur 40 Spridning av VC efter två månader, nio månader samt efter två år med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. Minimal adsorption och fastläggning ansattes. © Lantmäteriet

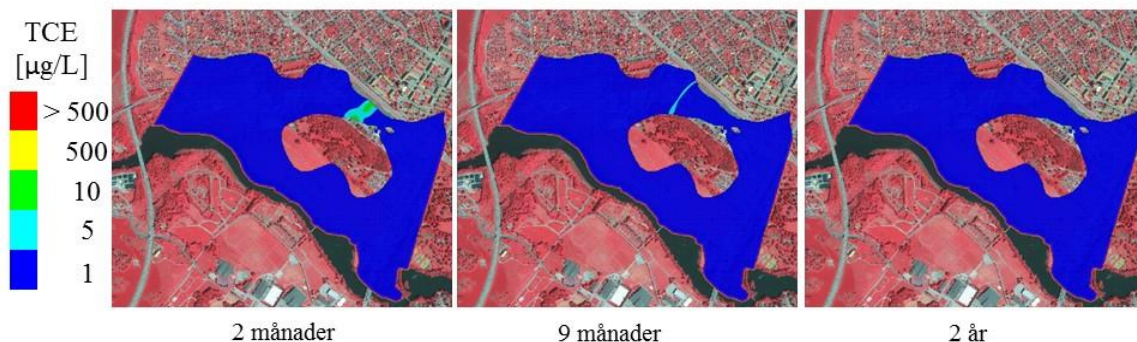
Peristaltisk pump

I figur 41 ses spridning av PCE vid ansats av initial koncentration från den peristaltiska pumpen efter totalt två år vid ansats av medelvärdet av hydraulisk konduktivitet och effektiv porositet. I appendix L, figur L1, ses spridningen då maximal hydraulisk konduktivitet och effektiv porositet ansattes. Minimal adsorption och fastläggning ansattes.



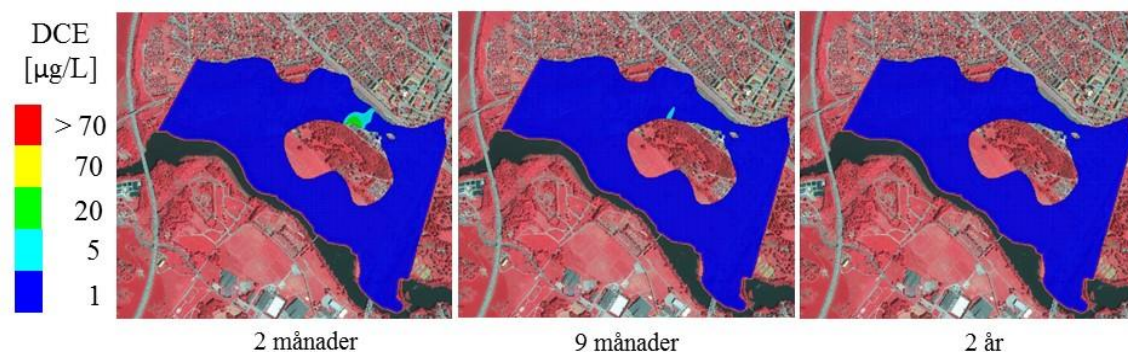
Figur 41 Spridning av PCE efter totalt två år med ansats initial koncentration uppmätt från peristaltisk pump med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. © Lantmäteriet

I figur 42 ses spridning av TCE vid ansats av initial koncentration från den peristaltiska pumpen efter totalt två år vid ansats av medelvärdet av hydraulisk konduktivitet och effektiv porositet. I appendix L, figur L1, ses spridningen då maximal hydraulisk konduktivitet och effektiv porositet ansattes. Minimal adsorption och fastläggning ansattes.



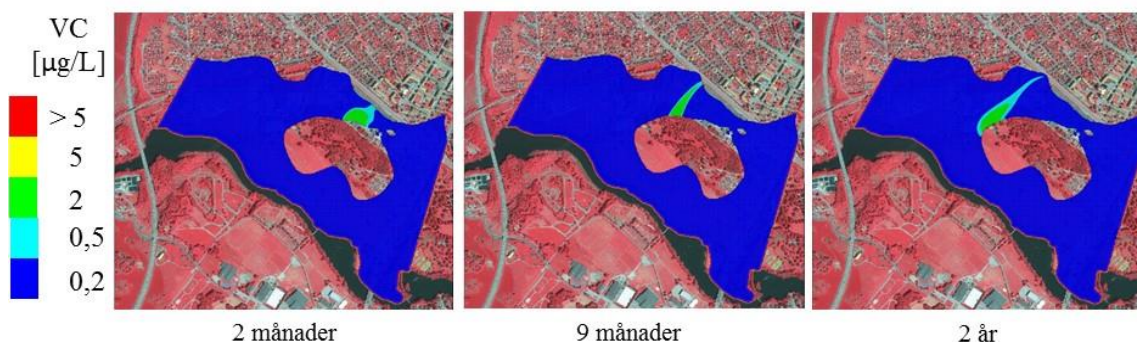
Figur 42 Spridning av TCE efter totalt två år med ansats av initial koncentration uppmätt från peristaltisk pump med underliggande GSD–Ortofoto och GSD–Ortofoto25. © Lantmäteriet

I figur 43 ses spridning av DCE vid ansats av initial koncentration från den peristaltiska pumpen efter totalt två år vid ansats av medelvärden av hydraulisk konduktivitet och effektiv porositet. I appendix L, figur L1, ses spridningen då maximal hydraulisk konduktivitet och effektiv porositet ansattes. Minimal adsorption och fastläggning ansattes.



Figur 43 Spridning av DCE efter totalt två år med ansats av minimal adsorption och reaktionshastighet samt initiala koncentration uppmätt från peristaltisk pump med underliggande GSD–Ortofoto och GSD–Ortofoto25. © Lantmäteriet

I figur 44 ses spridning av VC vid ansats av initial koncentration från den peristaltiska pumpen efter totalt två år vid ansats av medelvärden av hydraulisk konduktivitet och effektiv porositet. I appendix L, figur L1, ses spridningen då maximal hydraulisk konduktivitet och effektiv porositet ansattes. Minimal adsorption och fastläggning ansattes.



Figur 44 Spridning av VC efter totalt två år med ansats av minimal adsorption och reaktionshastighet samt initiala koncentration uppmätt från peristaltisk pump med underliggande GSD–Ortofoto och GSD–Ortofoto25. © Lantmäteriet

5. DISKUSSION

5.1 GRUNDVATTENMODELL

För att undersöka grundvattenströmningen genom området användes MODFLOW. Grundvattenmodellens tillförlitlighet beror dock av flertalet faktorer och antaganden som gjorts i den konceptuella modellen vilka inverkar på genererade flödena.

5.1.1 Osäkerheter

Skapandet av den konceptuella modellen baserades på flertalet antaganden. Ett antagande som togs var att berget i modelldomänen var impermeabelt vilket innebär att DNAPL ansamlas vid bergytan där det antas att spridning genom sprickor i berg är obefintlig. Enligt SGU:s karta över berggrund kunde, som tidigare nämnt, ses att en deformationszon går parallellt med Whirlpool. Då en deformationszon finns kan det eventuellt indikera på att berget är sprött och att föroreningsspridning därav kan ske även genom sprickor i berg och att antagande om att spridning sker genom berg inte är helt rimligt. För att undersöka hur eventuell spridning genom berg sker krävs omfattande information angående eventuella sprickors utbredning samt deras storlek vilket saknades därav gjordes denna avgränsning.

En annan osäkerhet är bergets utbredning genom akviferen. Invid Whirlpool fanns djup till berg uppmätt men denna information saknades i övriga modelldomänen. För att interpolera bergets utsträckning användes därför data över markelevation samt över jorddjup i motsvarande punkter erhållen från Lantmäteriet och SGU vilka användes för att interpolera bergets placering. Detta genomfördes i punkter vilka bedömdes som lämpliga för att representera enbart det viktigaste geologiska formationerna i området, vilket inte ger en fullständig representativ beskrivning över hela områdets geologi. I området är berg i dagen vanligt förekommande och bergytan fluktuerar mycket vilket kan ses i jorddjupskartan, figur 12, det medföljer därav osäkerheter vid interpolering av bergytans position. Det skulle därmed vara relevant att uppmäta djup till berg i fler punkter i området, enligt figur 45, för att erhålla en representativ bild över områdets geologi.



Figur 45 Område i vilket kompletterande undersökningar skulle vara lämpligt med underliggande GSD–Ortofoto och GSD–Ortofoto25. © Lantmäteriet

Ytterligare ett antagande som gjordes var att jordlagret var uniformt, bestående av mestadels sand baserat på jordlagerföljdsundersökningar genomförda invid Whirlpool. Då jordlagerföljdsbestämning inte genomförts i övriga modelldomänen fick ett antagande göras angående att jordlagret i övriga modellen bestod av liknande jordmaterial som vid Whirlpool i de partier av domänen där jorddjupet var ungefär detsamma vilket är ett grovt antagande som påverkar grundvattnets strömning. Det antogs dessutom att det invid Motala ström i det djupare partiet av modelldomänen fanns generellt två lager i den mättade zonen. Det antogs att fördelningen mellan dessa var 1:1 då ingen jordlagerföljdsbestämning genomförts i detta område vilket är ett grovt antagande vilket påverkar grundvattnets rörelse genom området vilket inte kan bekräftas då undersökningar saknades. Det kunde ses från känslighetsanalysen att siltlagret inte inverkar på genererade grundvattenflöden i någon större utsträckning, därav antas det inte påverka resultaten i en större grad.

Antagandet om silt- och sandlagrens förhållande är grovt och det påverkar genomströmningen genom den mättade zonen. Om det skulle vara så att majoriteten av den mättade zonen består av silt skulle flödet genom denna zon troligen ske långsammare, på samma vis skulle flödet genom denna zon ske snabbare om lagret istället består mestadels av sand. Det bedöms dock som nödvändigt att ta hänsyn till att det troligtvis inte är endast ett lager i denna andel av domänen, därför är antagandet nödvändigt. Då olika jordmaterial har olika hydrauliska egenskaper är det viktigt att känna till vilka jordarter som befinner sig i modelldomänen för att på ett representativt vis kunna återspegla hur grundvattnet flödargenom akviferen. Det är därav relevant att genomföra

jordlagerföljdsbestämningar i andelar av domänen på större avstånd från Whirlpool, i synnerhet i den djupa andelen av modelldomänen enligt markerade områden i figur 45.

Ansatsen av randvillkor i modelldomänen baserades på uppmätta grundvattennivåer invid Whirlpool och de dokumenterade i brunnsarkivet. Grundvattennivåerna användes dels för att tilldela konstant potential till noderna där randvillkoret *constant head* applicerades och de dels för att beräkna den hydrauliska gradienten. Osäkerheter kring detta tillkommer då grundvattennivåerna endast finns uppmätta i enstaka punkter i modelldomänen. Då grundvattennivåer kan variera under året samt mellan olika år ska grundvattennivåer helst uppmätas flera gånger under ett år samt gärna under flera år för att erhålla en så god förståelse som möjligt av grundvattnets flöde genom akviferen. Grundvattennivåerna invid Whirlpool uppmättes under våren 2017 medan de prover som registrerats av brunnsarkivet var uppmätta utspritt under året samt under olika år där det äldsta provet uppmättes 2003. Grundvattennivåerna erhållna från brunnsarkivet antas dock vara relevanta då de påvisar grundvattnets riktning och de är värdefulla i syfte att kalibrera grundvattenmodellen utefter. Det skulle dock vara värdefullt att uppmäta grundvattennivåer mer utspritt under året, i punkter kring området markerat i figur 45, för att påvisa hur grundvattennivåerna fluktuerar under året.

Ansats av *constant head* är inte fullständigt korrekt då potentialen som nämnt kommer variera under året vilket medför att den inte är konstant längs med ränderna där detta randvillkor ansattes. Detta är dock ett antagande som behöver göras och det bedöms återspegla verkligheten tillräckligt bra för att simulera grundvattenflödets generella riktning genom modellområdet.

Ett antagande som gjordes var att den hydrauliska gradienten var konstant genom modelldomänen, vilket utnyttjades då potentialen i punkten C, se figur 20, beräknades. Då grundvattennivå inte fanns uppmätt kring punkten C, men flöde bedömdes kunna gå genom detta område, bedömdes det som lämpligt att utgå från den beräknade potentialen för att kunna använda randvillkoret *constant head* längs randen BC, se figur 20. Antagandet är troligtvis inte korrekt särskilt med åtanke på att berggrundens läge i området är mycket varierande. Berg i dagen är frekvent förekommande i området, särskilt invid Whirlpool, vilket tyder på att flödet troligtvis inte är uniformt i området vilket medför att den hydrauliska gradienten sannolikt inte är konstant. Då grundvattennivåer enbart finns uppmätta i närheten av Whirlpool samt väster i domänen är det svårt att beräkna den hydrauliska gradienten på annat vis än genom att utgå från dessa grundvattennivåer. För att beräkna hur den hydrauliska gradienten varierar i området skulle det vara relevant att uppmäta grundvattennivåer i fler delar av modelldomänen på större avstånd från Whirlpool, enligt figur 45.

Den årliga grundvattenbildningen beräknades till 105 mm/år vilken anses rimlig då liknande slutsatser dragits av Rodhe et al. (2006) där den genomsnittliga grundvattenbildningen kring Östgötaslätten beräknas vara 100 mm/år. I området var stora andelar av marken bebyggd eller bestod av hårdgjorda ytor, resten av området var beväxt med skog eller ängsmark. Grundvattenbildning ansattes till ett lägre värde, 10,5 mm/år, där marken var hårdgjord samt angavs högre i områden med bar mark. För en mer noggrann kartläggning av lokal grundvattenbildning kan undersökningar rörande nederbörd och avdunstning genomföras på plats. Grundvattenbildningens exakta storlek

bedöms dock som en mindre avgörande faktor flödesmodellen då stora andelar av området är hårdgjort och infiltrationen till den mättade zonen är därmed begränsad.

Ytterligare en osäkerhet är att det inte fanns någon information kring hur det vertikala flödet sker genom akviferen, detta gäller främst i den andel av modelldomänen där det antagits att två lager finns vilket är i det sydvästra hörnet av domänen invid Motala ström. Då information om detta saknades antogs en anisotropifaktor vilken tar hänsyn till dessa skillnader, dock är denna vald generellt och är därav inte platsspecifik.

5.1.2 Känslighetsanalys

I känslighetsanalysen kunde det konstateras att grundvattennivåer genererade från MODFLOW inte överensstämmer med det uppmätta vid ansats av minimal hydraulisk konduktivitet, se figur 27. För det minimala värdet, 10^{-6} m/s, genererades grundvattennivåer invid Whirlpool vilka uppgick i 30–35 meter vilket inte överensstämmer med uppmätta grundvattennivåer, vilka är omkring 25–26 meter.

När den hydrauliska konduktiviteten 10^{-5} m/s ansattes kunde det ses att simulerade grundvattennivåer i vid Whirlpool liknade de uppmätta. Det kunde konstateras att grundvattenflödena invid Whirlpool efterliknade de uppmätta även då maximal hydraulisk konduktivitet, 10^{-2} m/s, ansattes vilket ses i figur 28. Då intervallet, inom vilket genererade grundvattennivåer överensstämde med uppmätta invid Whirlpool, var relativt stort bedöms modellen som relativt robust med avseende på hydraulisk konduktivitet, åtminstone för att simulera flödet invid Whirlpool.

Däremot kunde det ses att genererade grundvattennivåer i övriga modelldomänen påverkades mer av hur den hydrauliska konduktiviteten valdes. Vid applicering av hydraulisk konduktivitet kunde det konstateras att grundvattenflödet kring Whirlpool var relativt jämnt kring 24–26 meter då hydraulisk konduktivitet applicerades inom intervallet 10^{-5} – 10^{-2} m/s. I övriga andelar av modelldomänen, söder om Whirlpool, kunde det ses att ansats av lägre värden på hydraulisk konduktivitet genererade högre grundvattennivåer i den övriga modelldomänen. Då högre värden på hydraulisk konduktivitet ansattes var de genererade grundvattennivåerna lägre, vilket ses i figur 28. Då grundvattennivåer inte fanns uppmätta i denna del av modellen finns svårigheter i att avgöra vilken hydraulisk konduktivitet som är lämpligast att applicera, därav användes medelvärde av de hydrauliska konduktiviteterna vilka genererar rimlig potential invid Whirlpool, presenterat i avsnitt 7.4.2, vilken är $5 \cdot 10^{-3}$ m/s. För att undersöka vilka parametervärden som är rimliga att ansätta skulle det vara intressant att uppmäta antingen grundvattennivåer eller hydraulisk konduktivitet i omgivande modelldomän, vilket ses i figur 45. Genom att mäta upp dessa parametrar skulle modellen kunna kalibreras och göras mer platsspecifik.

Det konstaterades att siltlagret inte påverkar det genererade grundvattenflödet i alltför stor utsträckning, vilket ses i appendix J figur J1, därav valdes medelvärde för hydraulisk konduktivitet för silt vilket var $5 \cdot 10^{-7}$ m/s. Hur siltlagret skulle påverka genomströmningen skulle kunna beskrivas bättre om information kring lagrens fördelning fanns tillgänglig. Därav skulle jordlagerföljds mätningar i den djupa andelen av modellområdet vara relevanta. Uppmätande av grundvattennivåer skulle även vara relevanta i syfte att skapa större förståelse kring det mättade lagrets utformning.

Det kunde konstateras att effektiv porositet inte påverkade flödet i alltför stor utsträckning, vilket ses i figur 29. Vid ansats av minimal effektiv porositet 5 % i både sand- och siltlagret genererades inga större skillnader i genererat grundvattenflöde jämfört med då maximal effektiv porositet 25 % applicerades. När siltlagret tillsattes minimal effektiv porositet medan sandlagret tillsattes maximal effektiv porositet kunde ingen avsevärd skillnad i genererat grundvattenflöde observeras, därav ansattes medelvärdet 15 % för den effektiva porositeten. Den effektiva porositeten bör påverka grundvattenflödet på så sätt att större porositet medför ett större genomflöde, att den inte påverkas nu är därför underligt, men kan bero på av att den hydrauliska konduktiviteten helt enkelt har en dominerande inverkan vid definiering av flödet. Den hydrauliska konduktiviteten kan variera i en mer omfattande utsträckning, här inom intervallet 10^{-7} – 10^{-2} m/s, medan porositeten inte påverkar den hydrauliska konduktiviteten alltför mycket.

5.2 TRANSPORTMODELL

För att undersöka spridningen efter 10, 30 respektive 75 år modellerades masstransport med RT3D. Transportmodellens tillförlitlighet beror av flertalet faktorer och antaganden vilka medför osäkerheter vilket kunde påvisas ur den känslighetsanalys som genomfördes då spridningen berodde mycket av vilka parameterintervall som gjordes.

5.2.1 Osäkerheter

Det finns svårigheter i att avgränsa källzonen då klorerade lösningsmedel kan förekomma i flertalet faser, dessutom kan halterna inom plymen variera mycket. Detta medför att de halter som mätts upp i området inte definitivt beskriver hela föroreningsplymen då den kan vara mer omfattande på större avstånd från källzonen. I den konceptuella modellen ansattes uppmätta föroreningshalter i de punkter där provtagning utförts och i övriga domänen ansattes koncentrationerna till noll. Att anta att koncentrationerna är noll i omkringliggande område är inte helt rimligt eftersom klorerade lösningsmedel hanterats på platsen under flera decennier samt att det inte finns dokumentation om ett större utsläpp i området, vilket indikerar på att utsläpp skett kontinuerligt under en längre tid. Detta sammantaget med klorerade lösningsmedels mobila egenskaper samt de högpermeabla förhållandena i området indikerar på att halter klorerade lösningsmedel troligen spridit sig längre västerut i området och att halterna därav inte är noll i övriga modelldomänen.

Det bedömdes dock som inte som relevant att försöka uppskatta hur stora dessa halter skulle kunna vara då detta beror på så många olika parametrar, det skulle därför vara rena gissningar utan belägg. I syfte att göra en noggrannare kartläggning av föroreningssituationen idag, inför modellering, skulle det därför vara relevant att uppmätta halter klorerade lösningsmedel i grundvatten på större avstånd, omkring 400–600 meter väster om källzonen enligt det markerade området i figur 46, för att undersöka om förorening finns i dessa områden.



Figur 46 Kompletterande undersökning av befintliga halter klorerade lösningsmedel.

De prover som tagits i grundvatten är uppmätta dels med peristaltisk pump samt med MIP-sond. Ansats av initial koncentration påverkade spridningen genom akviferen stort då det kunde ses att halterna uppmätta med MIP-sond var generellt högre. Då peristaltisk pump används är risken för avgång av VOC stor vilket medför att de halter som detekteras är lägre än de faktiska halterna. Då MIP-sondering används är halterna avsevärt högre troligen beroende av det faktum att MIP-sonden detekterar halter från grundvatten men till viss del även i jord, vilket medför att detekterade halter inte motsvarar enbart halter i grundvatten. Ingen av mätserierna kan konstateras vara fullständigt tillförlitlig, därav kan resultaten betraktas som extremvärden. Ett mellanting av de båda scenarierna kan därav betraktas som rimligt att återspegla föroreningsituationen.

Då grundvattenmodellen påvisade att effektiv porositet inte inverkar på det genererade flödet varierades inte denna parameter i transportmodellen. Den effektiva porositeten kan dock inverka på föroreningstransporten då den påverkar advektion (Gunnemyr et al., 2007), vilket även kan ses i ekvation (4). Dock fanns inte effektiv porositet uppmätt i området, så ett litteraturvärde hade fått ansättas och det hade inte varit en platspecifik illustration.

5.2.2 Känslighetsanalys

Adsorption

Den känslighetsanalys som genomfördes med avseende på adsorptionsparametrar samt reaktionsparametrar kunde påvisa hur transportmodellen påverkades av olika parameterintervall vilket är relevant för att påpeka eventuella svagheter samt förbättringar som kan göras i modellen. För PCE kunde ses att då adsorptionen var lägre blev spridningen genom profilen större, vilket ses i figur 30. Vid ansats av minimal adsorption transporterades PCE 500 meter väster om källzonen under ett år, då maximal fastläggning ansattes kunde ses att föroreningen var hårt bunden till marken och förblev kvar invid källzonen.

För TCE och DCE kunde samma mönster som för PCE observeras där mobiliteten minskade med ökad fastläggning. Det kunde ses att TCE och DCE bröts ned och understeg tillåtna halter i grundvatten inom ett år då minimal fastläggning ansattes. För VC kunde ses att då minimal samt medelvärdet av adsorption applicerades så spreds föroreningen genom profilen utan att brytas ned. Då fastläggningen var maximal rörde sig VC inte från källzonen vilket ses i figur 31.

Det kunde konstateras att fastläggningen hade stor påverkan på föroreningarnas mobilitet där maximal fastläggning medförde att samtliga föreningar förblev invid källzonen. Applicering av minimal fastläggning medförde att TCE och DCE bröts ned inom ett år medan PCE transporterades 400–500 meter iväg från källzonen och bröts ned till stor del inom ett år. VC bröts inte ned inom ett år utan spreds 400–500 meter från källzonen med en relativt stor plym.

Det kan därav konstateras att det skulle vara relevant att bestämma platsspecifika K_d -värden, exempelvis genom att uppskatta mängden klorerade lösningsmedel som släppts ut under produktionstiden, för att sedan bestämma K_d enligt avsnitt 3.4.3.

Reaktionsparametrar

För att undersöka påverkan av reaktionsparametrarna behölls adsorptionen konstant vid sitt medelvärde varefter reaktionsparametrarna varierades. För PCE, TCE samt DCE kunde ses att då medelvärdet av adsorption applicerades så invercade val av reaktionsparameter inte i en större utsträckning då föroreningarna förblev kvar invid källzonen oberoende av vilka reaktionsparametrar som valdes. Endast VC påverkades av vilken reaktionshastighet som användes, där det kunde ses att en högre reaktionshastighet medförde att föroreningen bröts ned snabbare, enligt figur 32. Det kunde ses att spridningen av VC blev ungefär lika stor oberoende av reaktionskonstanten men att VC bröts ned fortare om reaktionshastigheten var högre. Det kunde konstateras att reaktionsparametrarna inte påverkade spridningen i lika stor utsträckning som adsorptionen.

5.2.3 Spridning efter 10, 30 samt 75 år

Föroreningsituationen för PCE, TCE, DCE samt VC är olika beroende på vilken initial koncentration som ansats. Halter uppmätta med MIP-sond var generellt högre än de uppmätta med peristaltisk pump. Under dess simuleringar användes som nämnt medelvärden över adsorption och nedbrytning då information om dessa värden inte fanns och det är svårt att avgöra vilka parameterintervall som är lämpliga.

PCE

För PCE kunde konstateras att spridning, vid ansats av initiala koncentrationer erhållna från MIP-sonderingen, sker relativt långsamt. Efter 10 år har föroreningsplymen rört sig ungefär 100 meter från källzonen innehållande halter större än 40 µg/l PCE. Efter 30 år kan ses att plymen spridits ytterligare samt att plymen minskat i storlek och att koncentrationen inom plymen understiger 40 µg/l. Efter 75 år kan en föroreningsplym observeras på ungefär 500 meters avstånd från källzonen innehållande 1–5 µg/l PCE. Detta ses överst i figur 33.

Vid applicering av initiala koncentrationer från den peristaltiska pumpen ses att plymerna rör sig lika långt genom profilen men innehållande lägre halter och samt att storleken på plymen är mindre. Efter 10 år finns en föroreningsplym innehållande 1–40 µg/l PCE vilket överskrider riktvärdena. Plymen kvarstår efter 30 år men då innehållande lägre halter omkring 1–10 µg/l PCE. Efter 75 år har PCE brutits ned och överstiger inte något av riktvärdena. Det kunde ses att PCE inte når Motala ström.

TCE

För TCE kunde ses att då initiala koncentrationer från MIP–sonderingen applicerades, hade en plym innehållande halter högre än 500 µg/l TCE spridit sig 100 meter från källzonen efter 10 år. Efter 30 år kunde ses att plymen förflyttat sig 400 meter från källzonen, där föroreningsplymen innehöll 1–500 µg/l TCE. Efter 75 år har förflyttningen fortsatt ytterligare 50 meter, men det kunde ses att nedbrytning skett då halterna i plymens yttre kanter är något lägre än tidigare, vilket ses överst i figur 34.

Vid applicering av initiala koncentrationer från den peristaltiska pumpen ses för TCE att föroreningsplymen efter 10 år innehöll halter vilka överskred 500 µg/l. Efter 30 år har plymen förflyttat sig västerut innehållande lägre halter kring 1–10 µg/l TCE. Efter 75 år har majoriteten av föroreningsplymen brutits ned, dock kvarstår en mindre föroreningsplym innehållande halter omkring 1–5 µg/l TCE. Det kan ses att TCE inte når Motala ström, vilket ses i figur 34.

DCE

För DCE ses att vid applicering av initiala koncentrationer från MIP–sonderingen har plymen rört sig omkring 100 meter väster om källzonen innehållande halter vilka överskred 1200 µg/l DCE. Efter 30 år ses att plymen förflyttat sig 300–400 meter från källzonen innehållande liknande halter. Efter 75 år ses att DCE rört sig omkring 500 meter väster om källzonen samt att halterna inom föroreningsplymen minskat något, innehållande halter 1–70 µg/l DCE, vilket ses överst i figur 35.

Vid applicering av initiala koncentrationer från den peristaltiska pumpen ses att det efter 10 år finns en utbredd föroreningsplym av DCE 300 meter från källzonen innehållande 1–20 µg/l, denna har efter 30 år spridit sig ytterligare 100 meter och halterna har då minskat till 1–5 µg/l inom plymen. Efter 75 år finns DCE ej kvar i profilen. Det kan ses att DCE inte når Motala ström, vilket ses underst i figur 35.

VC

Vid applicering av initiala koncentrationer från MIP–sonderingen kan ses att VC är avsevärt mer mobil jämfört med PCE, TCE och DCE då den under samma förhållanden sprids längre i akviferen och når Motala ström inom 10 år, vilket ses överst i figur 36. Det kan ses att föroreningsplymen efter 10 år innehåller höga halter relativt riktvärdena för grundvatten där halterna in stora andelar av plymen överskrider riktvärdet 5 µg/l i grundvattnet. Det kan ses att plymen efter 30 och 75 år kvarstår i akviferen men att halterna efter 75 år är lägre än de efter 10 år samt efter 30 år.

Vid applicering av initiala koncentrationer från den peristaltiska pumpen ses för VC att spridningen efter 10 år är omfattande då den spridits omkring 700 meter från källzonen innehållande halter omkring 0,2–2 µg/l. Se underst i figur 36. Det kunde ses att

nedbrytning påbörjats efter 30 år då plymen minskat i storlek. Efter 75 år hade nedbrytningen av VC fortsatt och halterna inom plymen var då 0,2–0,5 µg/l. VC nådde inte Motala ström vid ansats av initiala koncentrationer från den peristaltiska pumpen.

Sammantaget

Det kunde konstateras att PCE, TCE, DCE och VC har olika egenskaper vilka gör att de sprids på olika vis genom akviferen. VC är mer mobil och svårnedbrytbar än de andra föreningarna och därigenom transporterades VC längre genom akviferen. En faktor att ta hänsyn till är att mängden VC i akviferen ökar i takt med att PCE, TCE och DCE bryts ned. Det kunde ses att vid ansats av initiala koncentrationer från MIP-sonderingen är det endast VC som inom 75 år når Motala ström. Vid ansats av de initiala koncentrationerna från den peristaltiska pumpen når ingen av föroreningarna Motala ström inom 75 år och det kan ses tydligt att föroreningarna efter 30 år brutits ned avsevärt. Efter 75 år hade PCE och TCE brutits ned och understeg riktvärdena medan en mindre plym DCE och VC kvarstod. De råder därav ingen risk för att PCE, TCE eller DCE ska nå Motala ström men däremot finns en stor risk att VC når vattendraget under antagna förhållanden.

Vid ansats av initial koncentration från MIP-sonderingen kunde ses att samtliga föroreningar sprids minst 500 meter från källzonen innehållande halter vilka översteg något av riktvärdena. Detta bedöms som allvarligt då området vilket föroreningarna sprids till är ett område som människor befinner sig vid då det används för rekreation. Då klorerade lösningsmedel har humantoxisk påverkan samt TCE och VC är säkerställt cancerogena och PCE är möjligt cancerogen i samband med exponering, bedöms detta som allvarligt. Människor vistas dock inte på platsen längre tidperioder så det bör inte utgöra alltför stor risk. Det kunde ses att ingen av plymerna når de dricksvattentäkter som fanns på 700–900 meters avstånd väster om Whirlpool.

Plymerna nådde generellt ungefär lika långt genom akviferen men halterna var lägre inom de plymer som genererades då initial koncentration från den peristaltiska pumpen användes. Det kunde också ses att dessa plymer var mindre i storlek, nedbrytning skedde alltså snabbare vilket är väntat med tanke på att de initiala koncentrationerna var lägre.

5.2.4 Värsta scenario

MIP-sondering

Vid simulering av värsta scenario för PCE, vilket ses i figur 37, vid ansats av minimala fastläggnings- samt reaktionsparametrar kunde ses att föroreningen redan efter två månader nått lika långt som efter tio år då högre fastläggning och nedbrytning ansattes, vilket ses i figur 33. Efter två år kunde ses att föroreningen transporterats ungefär 500 meter från källzonen vid ansats av medelvärdet av hydraulisk konduktivitet. Då maximal hydraulisk konduktivitet applicerades kunde ses att spridningen skedde avsevärt snabbare genom akviferen då föroreningen når lika långt efter två månader som den annars gjort på två år. Det kunde ses att plymen PCE i akviferen inte längre syns i modellområdet efter två vilket indikerar på att den nått Motala ström och spridits vidare med vattendraget då maximal hydraulisk konduktivitet ansattes.

För TCE, vilket ses i figur 38, kunde ses att spridningen sker snabbt relativt då lägre adsorption och nedbrytning ansattes, vilket ses i figur 34. Det kunde ses att plymen efter två år nått ungefär 500 meter från källzonen då medelvärdet av hydraulisk konduktivitet

applicerades. Det kunde ses att då högre hydraulisk konduktivitet brukades skedde spridningen genom akviferen snabbare. Det kunde ses att plymen efter nio månader nådde Motala ström och efter två år ses plymen inte längre i modelldomänen vilket kan indikera på att den lösts i Motala ström och spridits vidare med ytvattnet.

För DCE, se figur 39, kunde ses att då medelvärdet av hydraulisk konduktivitet applicerades sker spridningen avsevärt snabbare genom akviferen relativt när medelvärden över adsorption och reaktionsparametrar användes, vilket ses i figur 35. Efter två år hade plymen nått ungefär 500 meter från källzonen. När maximal hydraulisk konduktivitet ansattes skedde spridningen avsevärt snabbare genom profilen då föroreningen inom nio månader nådde Motala ström. Efter två år ses DCE inte längre inom modelldomänen.

För VC, se figur 40, kunde ses att då medelvärdet av hydraulisk konduktivitet appliceras sker spridningen snabbt genom akviferen. Efter två månader hade plymen nått 500 meter bort från källzonen. Det finns dock svårigheter i att jämföra spridningen i detta scenario med det då medelvärdet av adsorptions- och reaktionsparametrar brukades, se figur 36, då VC i det scenariot nått Motala ström inom tio år. För PCE, TCE samt DCE kunde ses att spridningen efter två år var större än efter tio år då minimal fastläggnings- samt reaktionsparametrar valdes, därav kunde det tydligt ses att spridningen då vart mer omfattande. För VC kan inte samma metod användas då spridningen efter två år i detta scenario inte orsakar större spridning än efter tio år, det går därav inte att säkerställa att VC sprids mer omfattande vid ansats av lägre fastläggnings- och reaktionsparametrar, även om det är troligt att så är fallet.

Då lägre hydraulisk konduktivitet ansattes sågs att föroreningsplymen av VC efter två år nått 500 meter från källzonen medan plymen redan efter två månader nått lika långt då maximal hydraulisk konduktivitet användes. Då maximal hydraulisk konduktivitet applicerades kunde ses att plymen inom nio månader nått Motala ström och att den efter två år inte kvar i området.

Det kunde konstateras att då initiala koncentrationer från MIP-sonderingen, minimal fastläggning, minimala reaktionsparametrar samt maximal hydraulisk konduktivitet ansattes nådde samtliga föroreningar Motala ström inom den undersökta tiden. Då medelvärdet av hydraulisk konduktivitet ansattes kunde ses att ingen av komponenterna nådde Motala ström inom den undersökta tiden, därav kunde konstateras att val av hydraulisk konduktivitet påverkade transporten genom den mättade zonen stort.

Peristaltisk pump

På samma vis genomfördes modellering då initial koncentration från den peristaltiska pumpen ansattes. För PCE, se figur 41, kunde ses att mobiliteten ökade avsevärt då lägre fastläggnings- och reaktionsparametrar användes samt medelvärdet av hydraulisk konduktivitet. Efter nio månader spred sig plymen ungefär 400 meter från källzonen och efter två år hade plymen förflyttat sig ytterligare 100 meter från området och det kunde ses att halterna minskat. Då maximal hydraulisk konduktivitet ansattes, se appendix L figur L1, kunde ses att PCE inom två månader transporterats 500 meter från källzonen och att PCE efter sex månader hade brutits ned och understeg riktvärdena.

För TCE, se figur 42, kunde ses att föroreningsplymen rört sig omkring 400 meter från källzonen efter nio månader samt att TCE inom två år brutits ned och understeg riktvärdena. Då maximal hydraulisk konduktivitet brukades, se appendix L figur LI, kunde ses att TCE bryts ned och understeg riktvärdena inom två månader.

För DCE ses att plymen sprids snabbt relativt då högre adsorption och reaktionsparametrar ansattes, vilket ses i figur 43. Efter nio månader hade plymen spridit sig ungefär 300 meter från källzonen och inom två år har DCE brutits ned och understeg riktvärdena. Då maximal hydraulisk konduktivitet ansattes, se appendix L figur LI, spreds föroreningen 500 meter från källzonen inom två månader och inom sex månader hade DCE brutits ned och understeg riktvärdena.

För VC kan ses att spridningen sker snabbare genom akviferen vid ansats av minimal fastläggning reaktionsparametrar, se figur 44. Efter nio månader har plymen nått 400 meter från källzonen och efter två år hade plymen nått ytterligare 150 meter. Då maximal hydraulisk konduktivitet ansattes, se appendix L figur L1, spreds föroreningen 500 meter från källzonen inom två månader och inom sex månader hade VC brutits ned och understeg tillåtna halter i grundvatten.

Det kunde konstateras att ansats av initial koncentration från den peristaltiska pumpen samt minimala värden över fastläggning och reaktionsparametrar samt medelvärdet över hydraulisk konduktivitet, nådde ingen av föroreningarna Motala ström inom den undersökta tiden. Det kunde istället ses att föroreningarna i större utsträckning bröts ned. Vid ansats av maximal hydraulisk konduktivitet kunde ses att föroreningarna transporterades längre genom akviferen men att de inom två år hade brutits ned. Det kunde därmed konstateras att då adsorptions- samt reaktionsparametrar valdes lägre ökade nedbrytningen, troligen eftersom de inte var lika hårt bundna till marken, och därmed minskade risken för att föroreningarna skulle spridas genom akviferen mot Motala ström. Om föroreningen skulle nå Motala ström skulle de klorerade lösningsmedlen kunna spridas vidare längre sträckor samt förorena marker längs med vattendraget, vilket ej är önskvärt då plymerna innehåller halter vilka överstiger riktvärdena.

6. SLUTSATSER

Framtagande av en platsspecifik flödes- och masstransportmodell är en mycket komplex process då modellen beror av flertalet ingående parametrar. Det grundvattenflöde som modellerats berodde av flertalet antaganden som gjorts i den konceptuella modellen vilka bidrar till osäkerheter. Det genererade grundvattenflödet väntas dock påvisa det generella grundvattenflödet i området, vilket sker i sydvästlig riktning relativt Whirlpool.

Från känslighetsanalys konstaterades att den erhållna grundvattenmodellen var relativt robust med avseende på porositet och hydraulisk konduktivitet invid Whirlpool. Val av hydraulisk konduktivitet påverkade i större grad vilka grundvattenflöden som genererades i övriga modellområdet, bortanför Whirlpool. Det kunde dessutom konstateras masstransporten av föroreningarna berodde av vilka värden för adsorption som ansattes. Reaktionsparametrarna påverkade däremot inte spridningen i lika stor utsträckning.

Analyserade mätvärden påvisade att halterna klorerade lösningsmedel i flertalet provpunkter överskred utsatta riktvärden. Från spridningssimuleringarna efter 10, 30 respektive 75 år kunde det ses att varken PCE, TCE eller DCE nådde Motala ström inom den undersökta tiden, oavsett vilken initial koncentration som ansattes. Det kunde däremot ses att VC redan efter 10 år nådde Motala ström med halter vilka överskred samtliga riktvärden då initial koncentration från MIP-sonden applicerades. Då initiala koncentrationer från den peristaltiska pumpen ansattes kunde ses att VC rörde sig ungefär 500 meter från källzonen utan att nå Motala ström.

Vid undersökning av värsta scenario sågs att ingen av föreningarna nådde Motala ström inom två år vid ansats av medelvärdet över hydraulisk konduktivitet, oavsett initial koncentration. Däremot kunde ses att de rörde sig avsevärt snabbare genom profilen än när högre fastläggning och nedbrytning ansattes. När samma förhållanden för adsorption och nedbrytning ansattes, men maximal hydraulisk konduktivitet och effektiv porositet användes, kunde ses att samtliga föroreningar nådde Motala ström inom två år vid ansats av initial koncentration från MIP-sonden. Om däremot halter från den peristaltiska pumpen ansattes, under samma förhållanden, kunde ses att PCE, TCE och DCE bröts ned inom två år samt att endast en mindre plym av VC kvarstod.

Det är svårt att avgöra huruvida de utförda simuleringarna är rimliga då det kunde konstateras att spridningens omfattning skiljde sig mycket åt beroende av framförallt hur adsorption och hydraulisk konduktivitet ansattes i modellområdet, vilka ej fanns uppmätta. Spridningen berodde dessutom stort av vilken initial koncentration som ansattes. Det kunde ses att de flesta scenarion orsakade omfattande föroreningsplymer vilka innehöll halter som överskrev riktvärdena i grundvatten, vilket bör betraktas som allvarligt med åtanke på deras toxiska och cancerogena effekter.

6.1 FORTSATT STUDIER

För att öka masstransportmodellens tillförlitlighet föreslås följande fortsatta studier:

- Mäta upp grundvattennivåer runt om i modelldomänen mellan Whirlpool och Motala ström enligt figur 46
- Mäta upp hydraulisk konduktivitet
- Genomföra jordlagerbestämning i punkter runt om i profilen för att kunna konstruera mer platsspecifika lager
- Uppskatta massan PCE och TCE som under produktion läckt ut i samband med produktion i syfte att bestämma platsspecifika K_d -värden
- Provtagning av grundvatten med avseende på klorerade lösningsmedel ungefär 400–500 meter väster om Whirlpool

REFERENSER

- Ahlgren, S., Djurberg, H., Hummel, A., Jirner, E., Johansson, P., McCleaf, P., McConnachie, D., Mikko, H. & Rodhe, L. (2016). *Jordlagermodellering i 3D –exempel från Uppsalaåsen med hydrogeologisk tillämpning*. Uppsala: Sveriges Geotekniska Undersökning. (SGU-rapport 2016:19).
- Andersen, M. (1984). *Movement of contaminants in ground water: Groundwater Transport: Advection and Dispersion*. Washington: University of Wisconsin. (National Academy Press).
- Anderson, M., Hunt, R. & W. Woessner. (2015). *Applied Groundwater modelling: Simulation of Flow and Advective Transport*. 2. uppl. Elsevier Inc.
- Andersson-Sköld, Y., Nilsson, G., Norrman., Starzec, J. (2005). Föroreningsspridning Underlag för handlingsplan för att förutse och förebygga naturolyckor i Sverige vid förändrat klimat Deluppdrag 3. Linköping, Sveriges Geotekniska Institut (Varia 560:3).
- Aral, M., Warren, T. (2011). *Groundwater quantity and quality management*. Virginia: American Society of Civil Engineers.
- Arvidslund, O., Engelke, F., Haglund, K. & Larsson, L. (2012). Praktikfall tvätteriet Alingsås: *Utvärdering av metoder för undersökning och provtagning av klorerade alifater*. Linköping: Sveriges Geotekniska Undersökning (Varia 621).
- AQUAVEO (2017) *Reactive Transport Modelling with GMS*. Tillgänglig: <http://www.aquaveo.com/software/gms-rt3d> [2017-02-06]
- Azadpour-Keeley, A., Russel, H.H. & Sewell, G.W. (1999). *Microbial Processes Affecting Monitored Natural Attenuation of Contaminants in the Subsurface*. Washington: Superfund Technology Support Center for Ground Water (U.S.EPA, EPA/540/S-99/001).
- Bailey, R., Morway, E., Niswonger, R. Gates, T. (2012). Modelling Variably Saturated Multispecies Reactive Groundwater Solute Transport with MODFLOW-UZF and RT3D. *Groundwater, vol 51, ss. 752–761. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2012.01009.x*
- Bear, J. (1972). *Dynamics of fluids in porous media*. New York: American Elsevier publishing companyinc.
- Bedient, P., Newell, C. & Rifai, H. (1994). *Ground Water Contamination: Transport and remediation*. New Jersey: PTR Prentice Hall.
- Brigham Young University. (1999). *Groundwater Modeling System. GMS v3.0 Reference Manual*. Environmental Modeling Research LaboratoryFIGUR 11 (EMRL) of Brigham Young University. url: <http://ftp.gtk.fi/mirrors/gms/gms/gms3.0/docs/refman30.pdf>
- Clement, T. (1997). *A Modular Computer Code for Simulating Reactive Multi-species Transport in 3-Dimensional Groundwater Systems*. Washington: U.S. Department of Energy (Rapport 11720).
- Clement, T. & Jones. N. (1998) *RT3D Tutorials for GMS Users*. Washington: Pacific Northwest National Laboratory. (PNNL-11805).
- Cwiertny, D. & Scherer, M. (2010). *Chlorinated Solvents Chemistry: Structures, Nomenclature and properties.*: University of California at Riverside, The University of Iowa.
- Domenico, P. & Schwartz, F. (1998) *Physical and chemical hydrology*. 2. uppl. Wiley: University of Michigan.

- Eklund, J. & Mases, J. (2010). *Riksintressen i Norrköpings kommun*. Linköping: Samverkan Norrköping Linköping.
- Englöv, P., Cox, E., Durant, N., Dall-Jepsen, J., Höjbjerg Jørgensen, T., Nielsen, J. & Törneman, N. (2007). *Klorerade lösningsmedel – Identifiering och val av efterbehandlingsmetod*. Stockholm: Naturvårdsverket. (Rapport 5663).
- Espeby, B. & Gustavsson, J. (1998). *Vatten och ämnestransport i den omättade zonen*. Stockholm: Kungliga Tekniska Högskolan. (TRITA-AMI 3038).
- Ferguson, J. & Pietari, J. (2000). Anaerobic transformations and bioremediation of chlorinated solvents. *Environmental Pollution*, vol. 107 (2), ss. 209–215.
- Fetter, C.W. (1980) *Applied Hydrology*. Ohio: Charles E. Merrill Publishing Co. A Bell & Howell Company.
- Franke, L., Reilly, T. & Bennett, G. (1987) Techniques of Water-Resources Investigations of the United States Geological Survey. Chapter B5 Definition of Boundary and Initial Conditions in the Analysis of Saturated Ground-Water Flow Systems– An Introduction. Denver: U.S. Geological Survey (Bok 3 sektion B).
- Galizia, A. & Thompson, D. (2010). *Toxicological Review of cis-1,2-Dichloroethylene and trans-1,2-Dichloroethylene*. Washington: U.S. Environmental Protection Agency (U.S.EPA, EPA/635/R-09/006F).
- Galizia, A. & Thompson, D. (2012). Toxicological review of Tetrachlorethylene (Perchlorethylene). Washington: (U.S. Environmental Protection Agency, EPA/635/R-08/011F).
- Grip, H. & Rodhe, A. (2016). *Vattnets väg från regn till bäck*. 4. Uppl. Uppsala: Uppsala Universitet.
- Gunnemyr, L., Lindstrans, O., Jonasson, S. & von Brömssen, M. (2006). *Modeller för transport och spridning av föroreningar – fas 1*. Stockholm: Naturvårdsverket (Rapport 5541).
- Gunnemyr, L., Jonasson, S., Lindstrand, O. & von Brömssen, M. (2007). *Modeller för transport och spridning av föroreningar fas 2*. Bromma: Naturvårdsverket. (Rapport 5692).
- Gustafsson, L. & Refsgaard, A. (2007). *Datormodeller för föroreningsspridning fas 2*. Bromma: Naturvårdsverket. (Rapport 5676).
- Harbaugh, M. & McDonald, A. (1988). *A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model: Techniques of Water-Resources Investigations 06-A1*. Denver: U.S.G.S.
- Harbaugh, A. (2005) *MODFLOW-2005, The U.S. Geological Survey Modular Ground-Water Model – the Ground-Water Flow Process*. Virginia: (U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6-A16).
- Haglund, K. (2010). *Gerrud 4:2, F.d. Holmstrands plåtindustri, Karlstad kommun MIFO-fas 2 undersökning*. Linköping: Statens Geotekniska Institut (2-0904-0241 14016-302).
- Harbaugh, A., Banta, E., Hill, M. McDonald, M. (2000). *MODFLOW-2000, The U.S. Geological Survey Modular Ground-Water Model – User Guide to Modularization Concepts and the Ground-Water Flow Process*. Virginia: U.S. Geological Survey (00-92).
- Hill, M. (1990). *Preconditioned Conjugate-Gradient 2 (PCG2), a Computer Program for Solving Ground-Water Flow Equations*. Denver. U.S. Geological Survey. Rapport 90-4048.

- Horton, K. & Bense, V. (2014) *Hydrogeology Principles and Practice. 2 uppl.* Oxford. John Wiley & sons Ltd.
- Horton, R., Thompson M. & McBride, J. (1988). *Determination of Effective Porosity of Soil Materials.* Cincinnati. United States Environmental Protection Agency (EPA/600/S2-B8/045).
- Johnson, R.L., Pankow, J.F. (1992). Dissolution of dense chlorinated solvents into groundwater. 2. Source functions for pools of solvent. *Environmental Science & Technology*, vol 26 (5), ss. 896. DOI: 10.1021/es00029a004
- Johnson, C., Truex, M. & Clement, T. (2006). Natural and Enhanced Attenuation of Chlorinated Solvents Using RT3. Washington: U.S. Department of Energy (PNNL-15937).
- Johnson, C. & Truex, M. (2006). RT3D Reaction Modules for Natural and Enhanced Attenuation of Chloroethanes, Chloroethenes, Chloromethanes, and Daughter Products. Washington: U.S. Department of Energy (PNNL-15938).
- Jonsson, P. (2014). *Utländska riktvärdens tillämpning på svenska förhållanden gällande förorenad mark.* Göteborgs Universitet. Institutionen för biologi och miljövetenskap.
- Karickhoff, S., Brown, D. & Scott, T. (1979). Sorption of Hydrophobic Pollutants on Natural Sediments. *Water Research.* vol 13, ss.241-248.
- Kemikalieinspektionen. (2016a). *Klorerade lösningsmedel.* Tillgänglig: http://www.kemi.se/prio-start/kemikalier-i-praktiken/kemikaliegrupper/klorerade-losningsmedel?_t_id=1B2M2Y8AsgTpgAmY7PhCf%3d%3d&_t_q=+klorerade+1%3C%3B6sningsmedel&_t_tags=language%3asv%2csiteid%3a007c9c4c-b88f-48f7-bbdc-5e78eb262090&_t_ip=194.71.254.28&_t_hit.id=KemI_Web_Models_Pages_Prio_PrioArticlePage/_7231b1f2-25ea-4794-9e85-f23274e3e1af_sv&_t_hit.pos=1 [2017-01-23]
- Kret, E., Kiecak, G., Malina, G., Nijenhuis, I. & Postawa, A. (2015). Identification of TCE and PCE sorption and biodegradation parameters in a sandy aquifer for fate and transport modelling: batch and column studies. *Environmental Science and Pollution Research.* vol. 22 (13), ss. 9877-9888. DOI: 10.1007/s11356-015-4156-9.
- Larsson, R. (2008). *Jords egenskaper.* Linköping: Statens Geotekniska Institut.
- Lu, C., Bjerg, P., Zhang, F., Broholm, M. (2011) Sorption of chlorinated solvents and degradation products on natural clayey tills. *Chemosphere.* vol 83, ss 1467-1474. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.chemosphere.2011.03.007>
- Morrison, R., Murphy, B. (2013) *Chlorinated solvents: a forensic evaluation.* Cambridge The Royal Society of Chemistry.
- Mårtensson, J., Ranung, J., Asp, S., Ceric, N., Gyllander, A., Johnsen, Å., Olsson, H., Westman, Y. & Wingqvist, E. (2011). *Arbete 2007-2010 med SVAR, Svenskt Vattenarjuv, en databas vid SMHI.* SMHI.
- Naturvårdsverket. (2009). *Riktvärden för förorenad mark: Modellbeskrivning och vägledning.* Bromma: Naturvårdsverket (Rapport 5976).
- Naturvårdsverkets verktyg skyddad natur. (2017). *Skyddad Natur.* Tillgänglig: <http://skyddadnatur.naturvardsverket.se/> [2017-02-22]
- Newell, C. & Ross, R. (1992). *Estimating Potential for Occurrence of DNAPL at Superfund Sites.* Washington: United States Environmental Protection Agency, Office of Solid Waste and Emergency Response: (9355.4-07FS).

- Nilsson, G. (2003). *Handledning i jordartsklassificering för mindre markvärmesystem*. Linköping: Sveriges Geotekniska Institut (Varia 527).
- Nilsson, C. (2014). Idag tar en industriepok slut. *Folkbladet*, 19 januari.
- Nordström, J. (2014). En dag på Philips: Året är 1980. *Folkbladet*, 8 februari.
- Pepelko, E.W. (2000) *Toxicological Review of Vinyl Chloride*. Washington: U.S. Environmental Protection Agency, IRIS. (EPA/635R-00/004).
- Quiot, F., Rollin, C., Bour, O., Jordana, S., Ruiz, E., Guimera, J., Schwartz, J. & Boblet, P. (2014). *Modeling of chlorinated solvents transport and natural attenuation in groundwater*. Dijon: French National Institute for Industrial Environment and Risks (ineris-00972535).
- Rodhe, A., Lindström, G., Rosberg, J. & Pers, C. (2006). *Grundvattenbildning i svenska typjordar – översiktlig beräkning med en vattenbalansmodell*. Uppsala: Uppsala Universitet. (Report Series A No. 66).
- Salomonsson, J. (2015). *Stockholms Framtida Avloppsrening*. Stockholm: Stockholm Vatten VA AB. (bilaga F5). Hydrogeologiska beräkningar.
- Schaerlaekens, J., Mallants, D., Simunek, J., Van Genuchten, M. & Feyen, J. (1999). Numerical simulation of transport and sequential biodegradation of chlorinated aliphatic hydrocarbons using CHAIN_2D. *Hydrological Processes*. vol. 13, ss 2847–2859.
- SGF (Sveriges Geotekniska Föreningen). (2012). *Klorerade lösningsmedel i mark och grundvatten– Att tänka på inför provtagning och upphandling*. Göteborg: Rapport 2:2011.
- SGF Sveriges geotekniska Förening. (2013). *Fälthandbok: Undersökning av förorenade områden*. Stockholm: SGF Rapport 2:2013.
- Sims, J.L., Suflita, M. & Russel, H.H. (1991). *Reductive Dehalogenation of Organic Contaminants in Soils and Ground Water*. Oklahoma: (U.S.EPA, EPA/540/4-90/054)
- SMHI. (2017). *Årsavdunstning medelvärde 1961–1990*. Tillgänglig: <http://www.smhi.se/klimatdata/hydrologi/vattenstand-2-2-338/arsavdunstning-medelvarde-1961-1990-1.4096> [2017-02-09]
- Stenström, J. (2014). Nu har stjärnan slocknat. *Norrköpings Tidningar*, 23 januari.
- Stockholm TT. (2014) Whirlpool stänger Norrköpingsfabriken. *Svenska Dagbladet*, 22 januari.
- Sundberg, J. (1991). *Termiska egenskaper i jord och berg*. Linköping: Statens Geotekniska Institut (Information 12).
- Svenska Geotekniska Föreningen. (2004). *Fälthandbok Miljötekniska markundersökningar*. Linköping: SGF Rapport 1:2004.
- U.S.EPA. (2011). *Toxicological Review of Trichlorethylene*. U.S. Washington: Environmental Protection Agency (EPA/635/R-09/011F).
- U.S.EPA. (2017). *National Primary Drinking Water Regulations*. [2017-02-03]
- VISS. (2017). *Motala Ström (Glan-Bråviken)*. [2017-02-21]
- Wiedemeier, T., Swanson, M., Moutoux, D., & Gordon, K., Wilson, J., Wilson, B., Kampbell, D., Hansen, J., Haas, P. & Chapelle, F. (1996) *Technical Protocol for Evaluating Natural Attenuation of Chlorinated Solvents in Groundwater*. Texas: Air Force Center for Environmental Excellence.

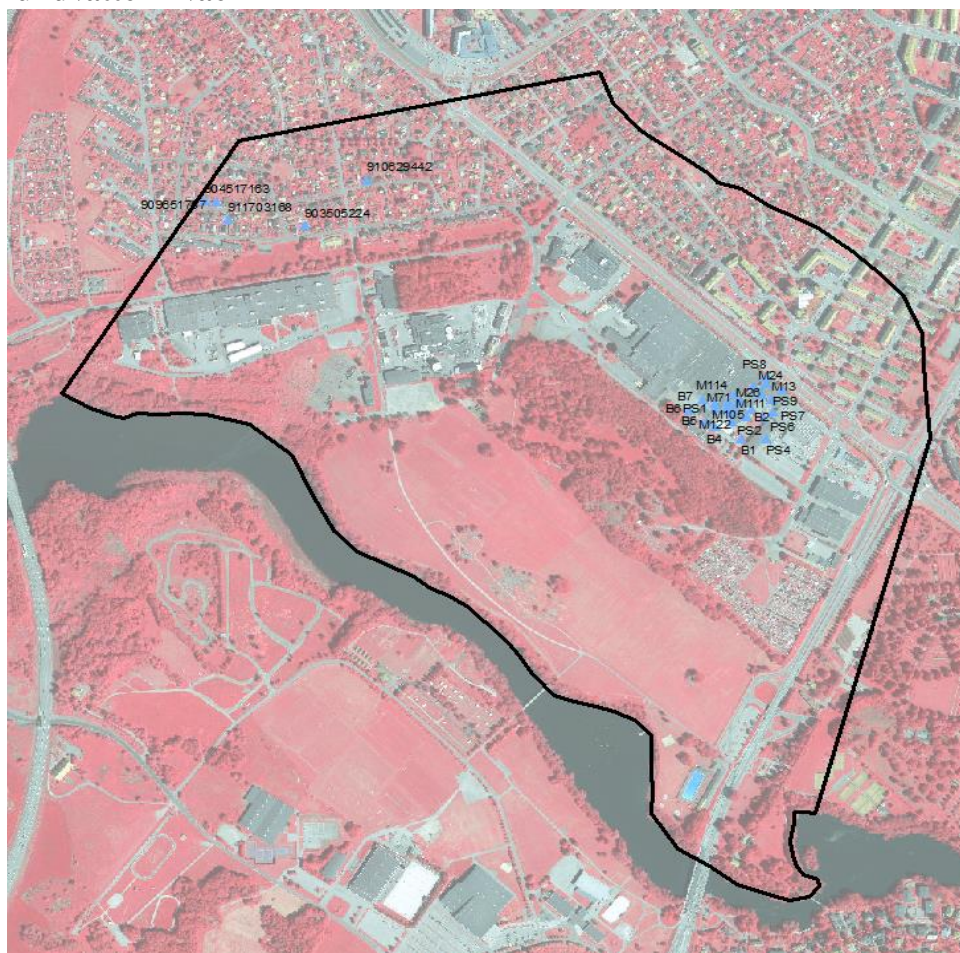
Wiedemeier, T., Swanson, M., Moutoux, D., Gordon, K., Wilson, J., Wilson, B., Kampbell, D., Haas, P., Miller, R., Hansen, J., & Chapelle, F. (1998). *Technical Protocol for Evaluating Natural Attenuation of Chlorinated Solvents in Ground Water*. Ohio: U.S. Environmental Protection Agency (EPA/600/R-98/128).

Xu, M. & Eckstein, Y. (1995) Use of Weighted Least Squares Method in Evaluation of the Relationship Between Dispersivity and Field-Scale. *National Ground Water Association*, vol 33 (6). ss.905-908. DOI: 10.1111/j.1745-6584.1995.tb00035.

APPENDIX

A. PROVPUNKTER

A.1 Grundvattennivåer



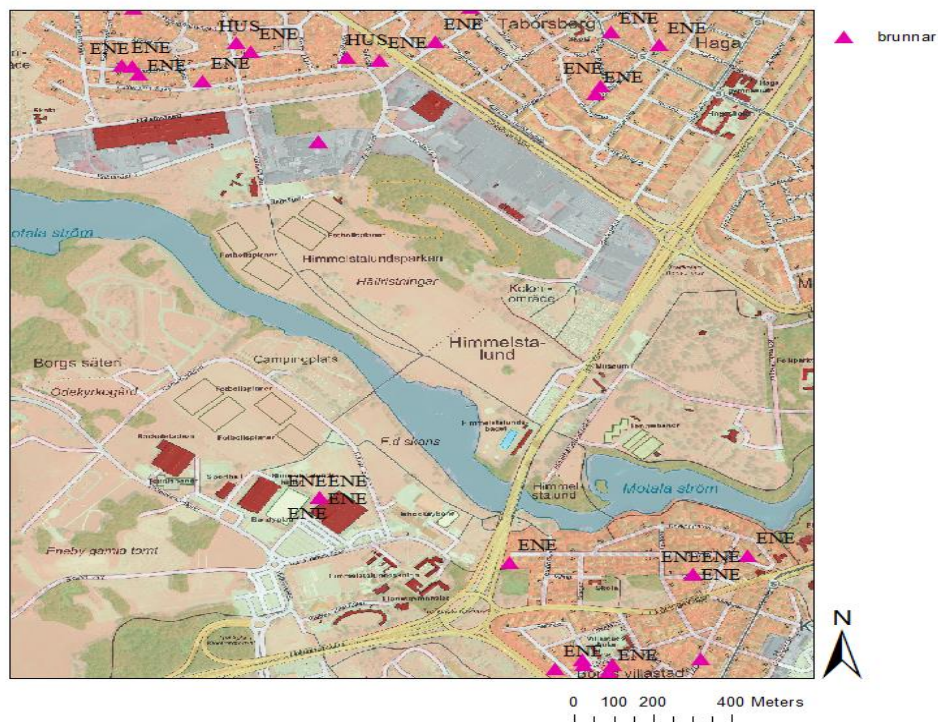
Figur A1 Provpunkter i vilka grundvattennivåer uppmätts med underliggande GSD-Ortofot och GSD-Ortofot25. © Lantmäteriet

A.2 MIP-sondering



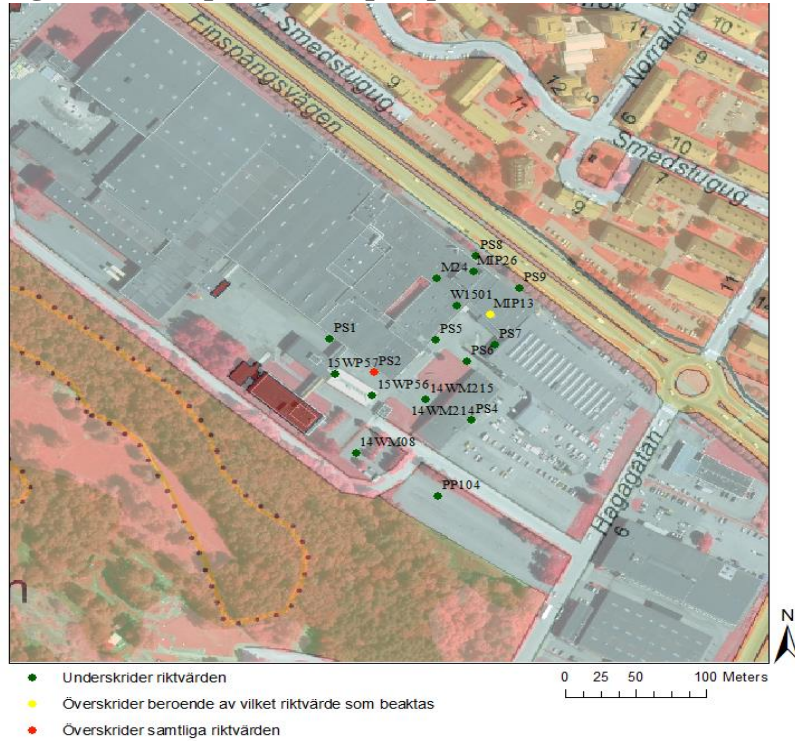
Figur A2 Punkter i vilka MIP-sondering utförts med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. © Lantmäteriet

A.3 Brunnar och dricksvattentäkter

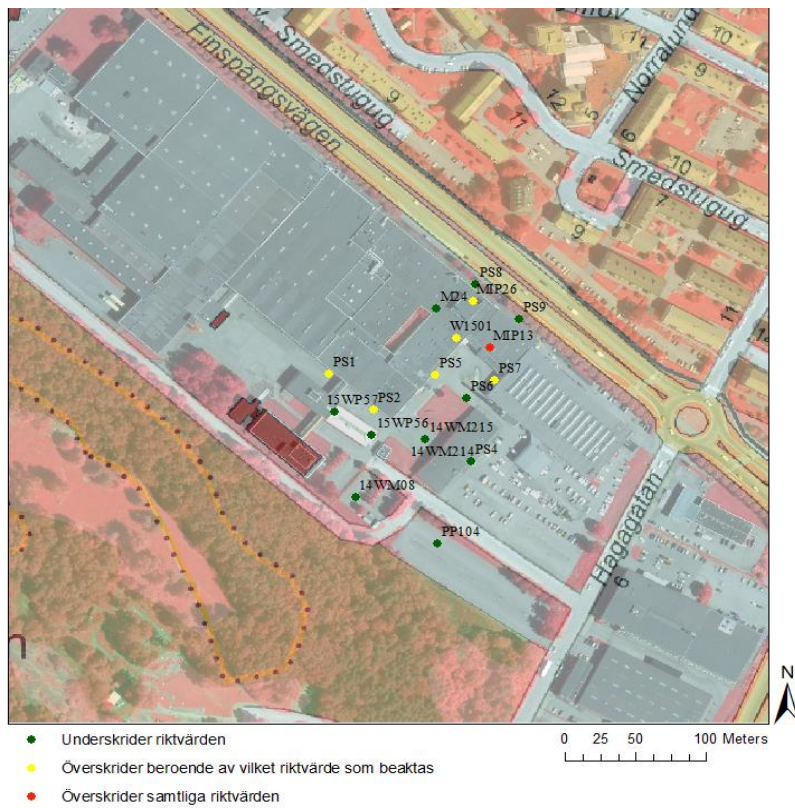


Figur A3 Befintliga brunnar med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25 där ENE representerar energibrunn och HUS representerar grundvattentäkt för hushåll eller fritidshus. © Lantmäteriet och Sveriges Geologiska Undersökning.

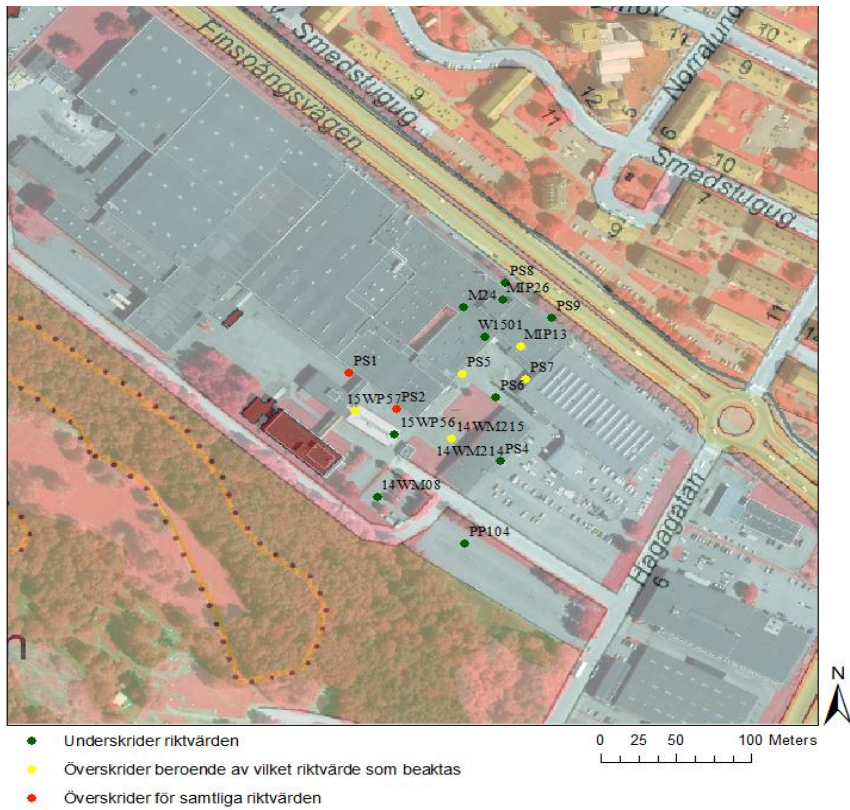
A.4 Halter i grundvatten peristaltisk pump



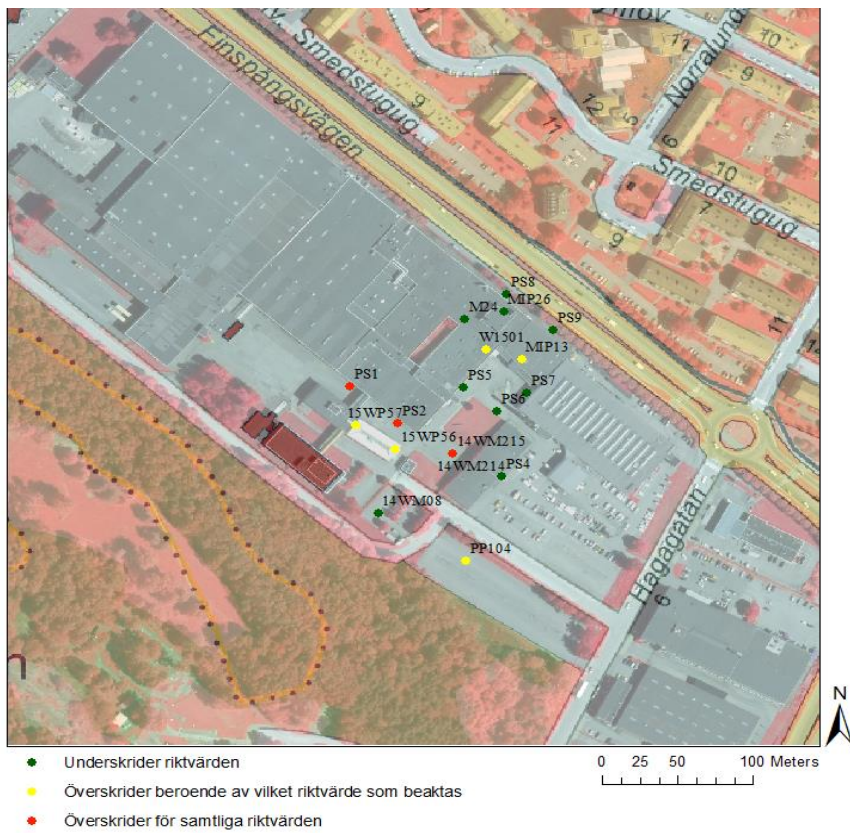
Figur A4 Halter PCE uppmätta i grundvatten med peristaltisk pump med underliggande GSD–Ortofoto och GSD–Ortofoto25. © Lantmäteriet



Figur A5 Halter TCE uppmätta i grundvatten med peristaltisk pump med underliggande GSD–Ortofoto och GSD–Ortofoto25. © Lantmäteriet



Figur A6 Halter cis-1,2-DCE uppmätta i grundvatten med peristaltisk pump med underliggande GSD-Ortofot och GSD-Ortofot25. © Lantmäteriet



Figur A7 Halter VC uppmätta i grundvatten med peristaltisk pump med underliggande GSD-Ortofot och GSD-Ortofot25. © Lantmäteriet

B. GRUNDVATTENNIVÅER

Tabell B1 Uppmätta grundvattennivåer i området från WSP samt från SGU:s brunnarkiv (2017).

Provpunkt	X	Y	Grundvattennivå [m]	Datum
M13	567075.658	6495731.400	25.8	2017-03-13
M24	567037.141	6495760.291	25.7	2017-03-13
M26	567063.771	6495765.897	25.7	2017-03-13
M71	567011.199	6495726.966	25.7	2017-03-13
M105	566960.739	6495722.177	25.7	2017-03-13
M111	566986.863	6495725.728	25.7	2017-03-13
M113	566984.102	6495708.538	25.7	2017-03-13
M114	566998.996	6495739.934	25.7	2017-03-13
M122	566995.874	6495701.120	25.7	2017-03-13
M123	566999.300	6495715.722	25.7	2017-03-13
PS1	566960.813	6495712.229	25.9	2017-03-13
PS2	566994.622	6495683.648	26.5	2017-03-13
PS4	567062.501	6495645.376	26.0	2017-03-13
PS5	567034.574	6495709.878	25.7	2017-03-13
PS6	567059.381	6495690.898	26.2	2017-03-13
PS8	567062.778	6495778.874	26.1	2017-03-13
PS9	567096.693	6495751.443	25.8	2017-03-13
PS7	567076.494	6495705.131	25.8	2017-03-13
W1501	567052.073	6495741.267	25.7	2017-03-13
B1	567014.445	6495645.612	25.7	2017-03-13
B2	567024.649	6495693.019	25.8	2017-03-13
B4	566961.790	6495670.907	26.4	2017-03-13
B5	566942.302	6495681.847	25.4	2017-03-13
B6	566909.858	6495705.276	20.2	2017-03-13
B7	566935.520	6495730.188	26.5	2017-03-13
903505224.	566140.000	6496106.000	23.0	2003-10-16
910629442.	566265.000	6496205.000	24.0	2010-07-08
911703168.	565986.000	6496119.000	21.0	2011-12-16
904517163.	565938.000	6496159.000	21.0	2004-02-22
909651707.	565962.000	6496156.000	20.0	2009-09-24

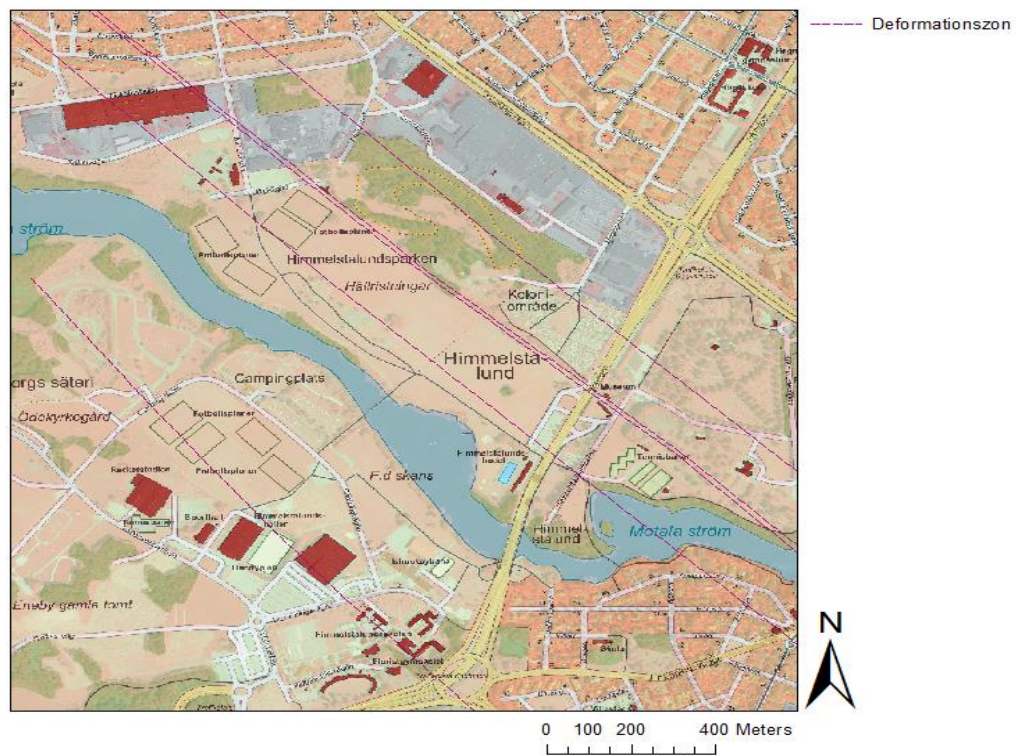
*Grundvattennivåer erhållna från SGU:s brunnarkiv. (2017)

C. FÖRORENINGSHALTER

Tabell C1 Uppmätta halter PCE, TCE, cis-1,2-DCE samt VC i grundvatten.

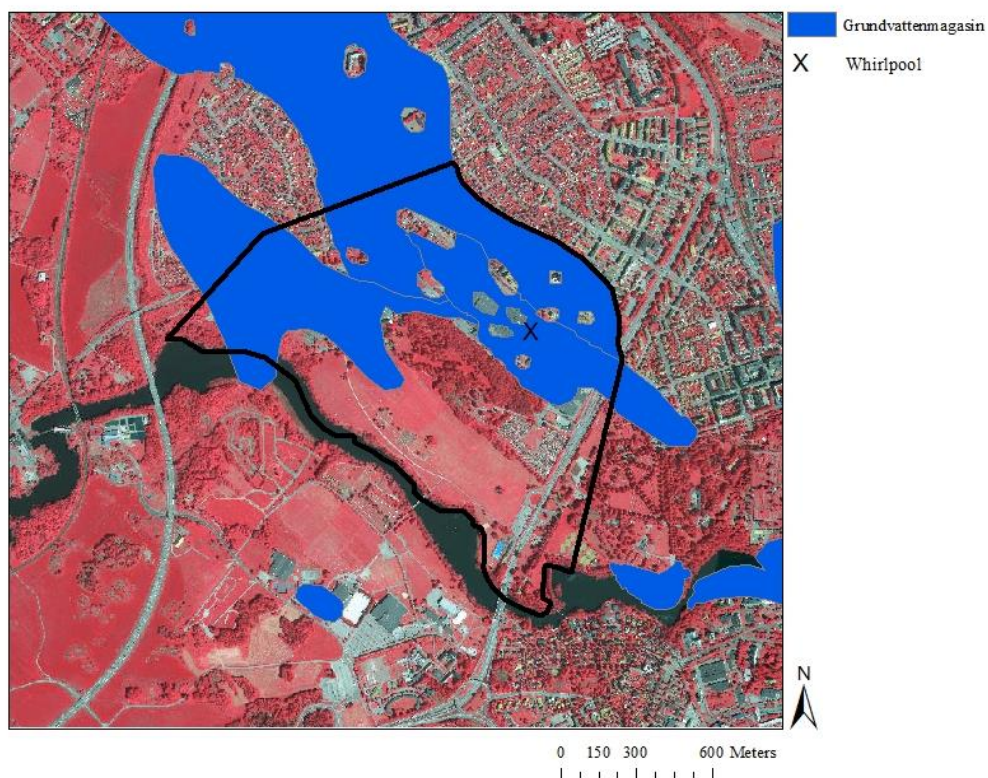
Provpunkt	PCE [$\mu\text{g/l}$]	TCE [$\mu\text{g/l}$]	cis-1,2-DCE [$\mu\text{g/l}$]	VC [$\mu\text{g/l}$]
W1501	0.7	20.7	0.22	1
15WP56	0.2	0.1	0.1	1
15WP57	0.2	0.1	6.08	1
14WM214	0.1	0.42	17	10
14WM215	0.2	0.6	11.4	9
14WM08	0.1	0.1	0.1	0.2
PP104	0.2	0.1	0.1	1
PS1	0.1	43	30.6	0.01
PS2	77.6	93.3	254	10.8
PS4	0.1	0.05	0.05	0.01
PS5	0.1	16.2	10.2	0.01
PS6	0.1	0.05	0.05	0.01
PS7	0.1	7.66	23.2	1
PS8	0.32	0.05	0.05	0.01
PS9	0.1	0.05	0.05	0.01
PS1	0.1	349	1520	14.9
PS2	1250	464	872	211
PS5	0.1	10	9.66	0.01
PS7	0.1	7.58	26.6	0.01
M24	0.1	0.05	0.05	0.01
MIP26	0.23	2.87	0.05	0.01
MIP13	2.29	728	14.8	1.6

D. DEFORMATIONSZON



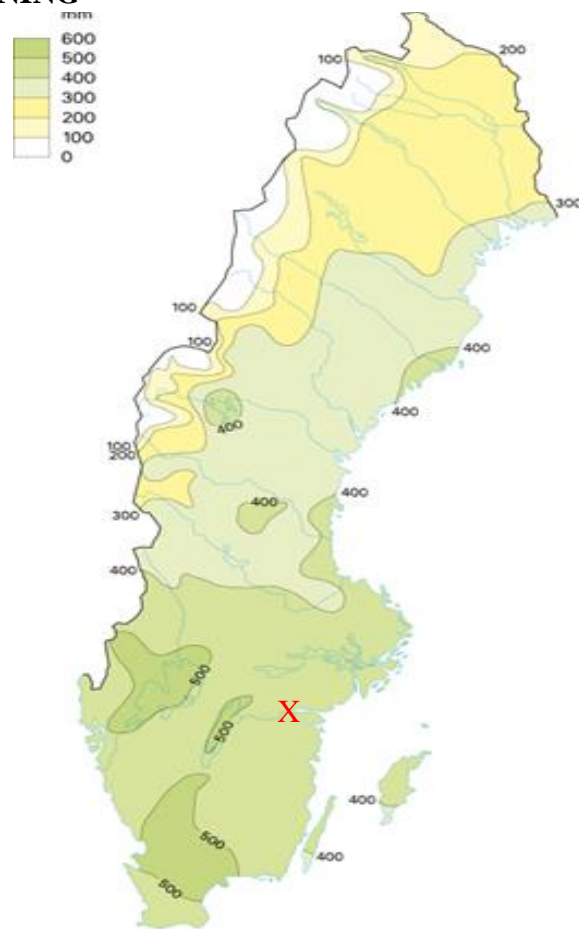
Figur D1 Deformationszoner i området kring Whirlpool baserad på Lantmäteriets tätortskarta GSD–Tätort, raster och SGU:s karta över Berggrund 1:50 000–1:250 000. © Lantmäteriet och SGU

E. GRUNDVATTENMAGASIN



Figur E1 Grundvattenmagasin med underliggande GSD–Ortofoto och GSD–Ortofoto25. © Sveriges geologiska undersökning och Lantmäteriet.

F. ÅRSAVDUNSTNING



Figur F1 Genomsnittlig avdunstning i Sverige erhållen från SMHI. (2017)

G. POROSITET

Tabell G1 Porositet för några vanliga jordarter.

Material	Porositet [%] ¹	Porositet [%] ²
Fingrus	30–40	25–50
Grovsand	30–40	25–50
Mellanand	30–35	25–50
Finsand ¹	30–35	25–50
Grov silt	30–40	30–60
Finmo–mjåla (silt)	40–50	30–60
Morän	20–30/40–55 om sprickor	15–45
Lerig morän	20–30/ 40–55 sprickor skikt	25–50
Lera	60–80	45–75
Sandig morän ³	–	15–45

¹ (Espeby & Gustafsson, 1998) (Knutsson & Morfeldt, 1995)

² (Sundberg, 1991)

³ Permeabilitet (Larsson, 2008)

H. K_{oc}

Adsorption av ett löst ämne till fast material beror av mängden organiskt kol i marken vilket kunde påvisas av Karickhoff et al. (1979). Förhållandet mellan adsorptionsfaktorn och mängden organiskt kol kan beskrivas enligt ekvation (H).

$$K_d = K_{oc} * f_{oc} \quad (H)$$

Där K_{oc} = Fördelningskoefficient oktanol vatten [m^3kg^{-1}]
 f_{oc} = fraktion organiskt kol [-]

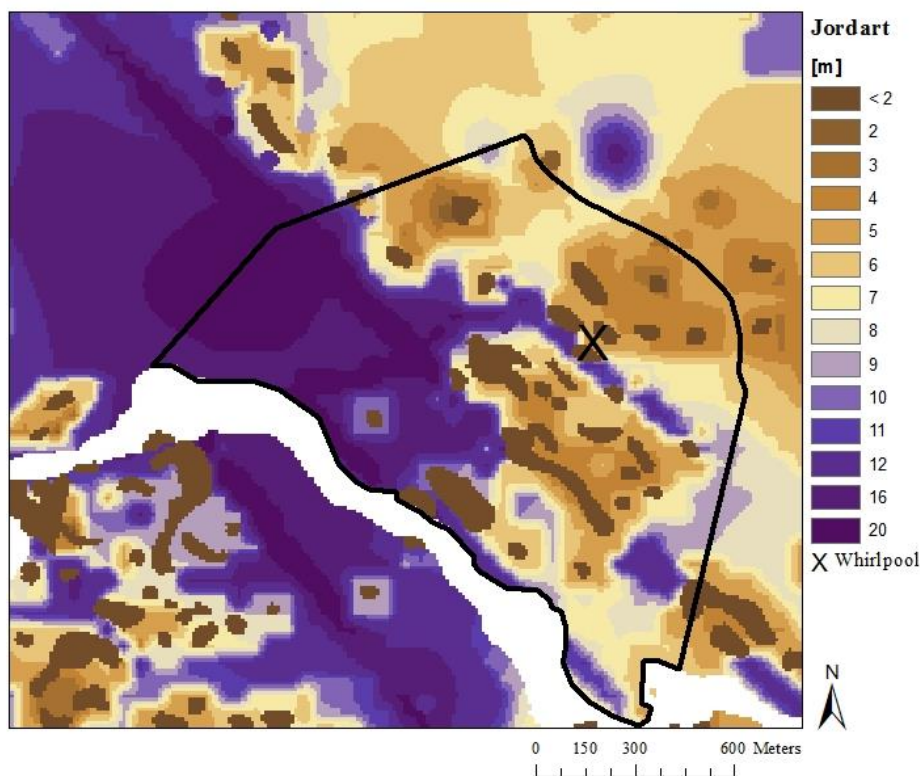
Fraktionen organiskt kol kan vanligen antas vara större än 0,01 (Shaerlaekens et al., 1999). Adsorption konstaterades även bero av jordart där grövre jordmaterial såsom sand är mindre effektiva beträffande adsorption relativt finare material som lera (Karickhoff et al., 1979).

Detta användes för att beräkna K_d då endast K_{oc} var känd.

Tabell H1 Beräkning av K_d baserat på K_{oc} samt $f=0,01$ [-]. (Wiedemeier et al., 1996)

K_{oc} [m^3kg^{-1}]	K_d [m^3kg^{-1}]
$2,09 \cdot 10^{-7}$	$4,18 \cdot 10^{-9}$
$1,07 \cdot 10^{-9}$	$2,14 \cdot 10^{-9}$
$6,46 \cdot 10^{-8}$	$1,3 \cdot 10^{-9}$
$4,00 \cdot 10^{-10}$	$8 \cdot 10^{-12}$

I. JORDDJUP



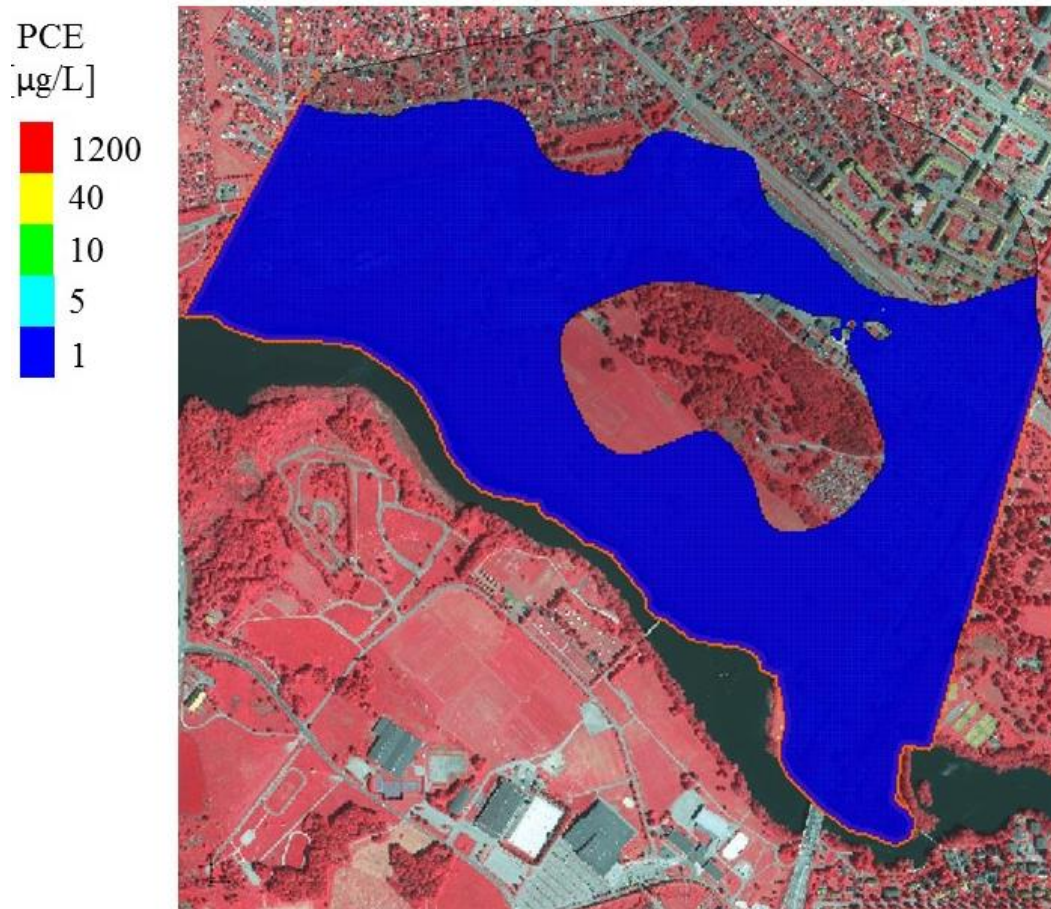
Figur I1 Jorddjupskarta baserad på Sveriges geologiska undersökning och Lantmäteriets Jorddjupskarta skala 1:50 000 med ovanliggande modellområde. © Sveriges geologiska undersökning och Lantmäteriet

J. KÄNSLIGHETSANALYS GRUNDVATTENMODELL

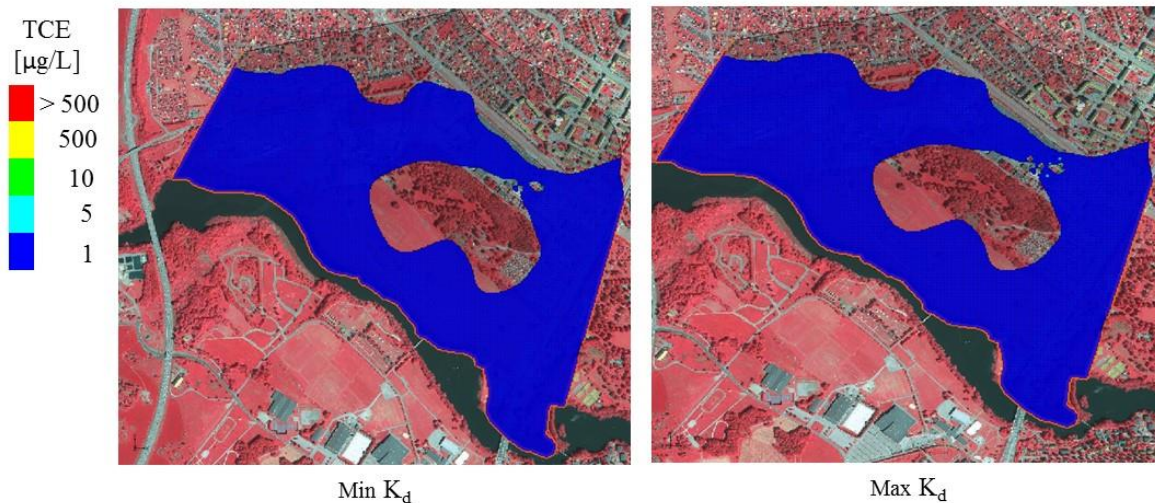


Figur J1 Grundvattennivåer vid ansats av minimal hydraulisk konduktivitet för silt, 10^{-9} m/s, till vänster, samt maximal hydraulisk konduktivitet för silt, 10^{-5} m/s, ses till höger med underliggande GSD–Ortofoto och GSD–Ortofoto25. © Lantmäteriet

K. KÄNSLIGHETSANALYS TRANSPORTMODELL



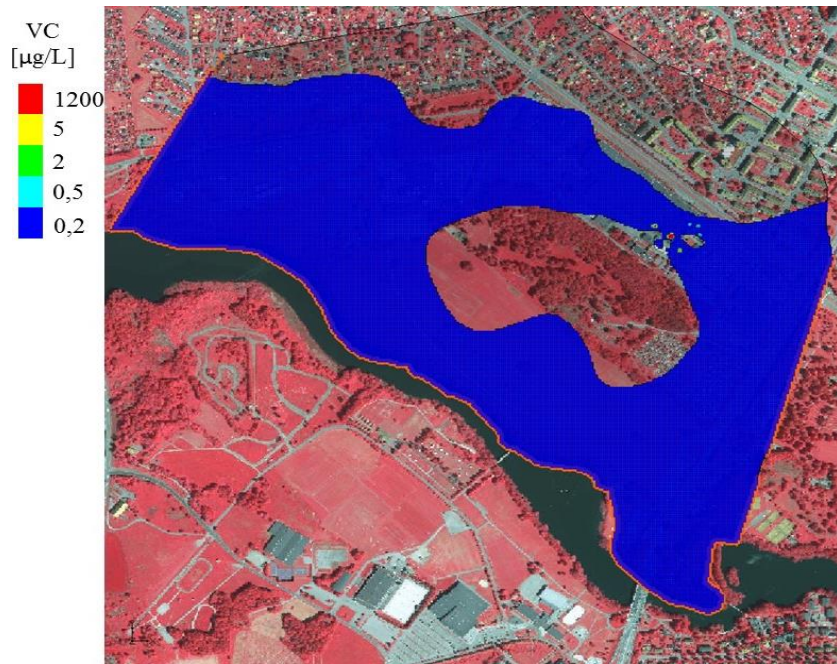
Figur K1 Spridning av PCE vid ansats av maximal K_d med underliggande GSD–Ortofoto och GSD–Ortofoto25 © Lantmäteriet



Figur K2 Spridning av TCE efter ett år vid ansats av olika adsorptionsparametrar och medelvärdet av reaktionsparametrarna med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25 © Lantmäteriet

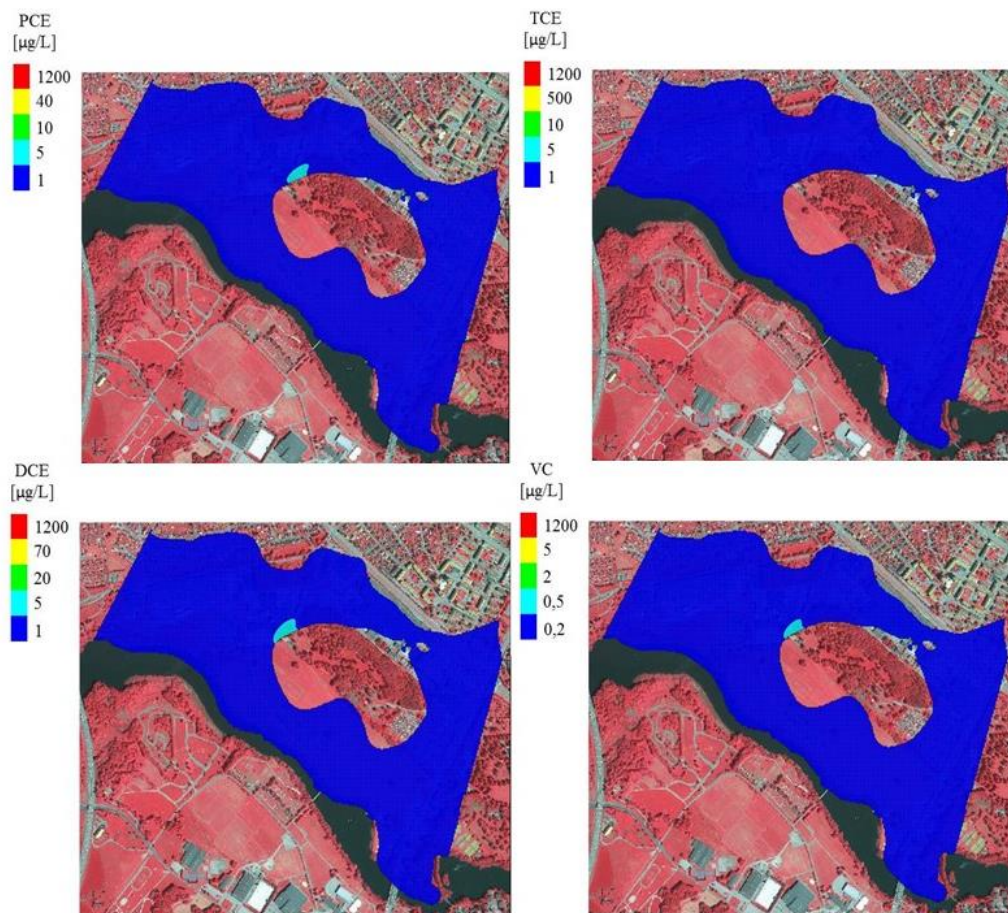


Figur K3 Spridning av DCE efter ett år vid ansats av olika adsorptionsparametrar och medelvärdet av reaktionsparametrarna med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25 © Lantmäteriet



Figur K4 Spridning av VC vid ansats av maximal K_d med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25 © Lantmäteriet

L. VÄRSTA SCENARIO



Figur L1 Spridning av PCE, TCE, DCE samt VC efter två månader vid ansats av initial koncentration från den peristaltisk pump samt maximal hydraulisk konduktivitet med underliggande GSD-Ortofoto och GSD-Ortofoto25. © Lantmäteriet