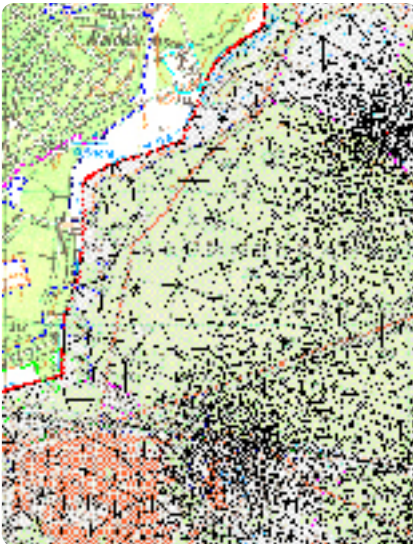
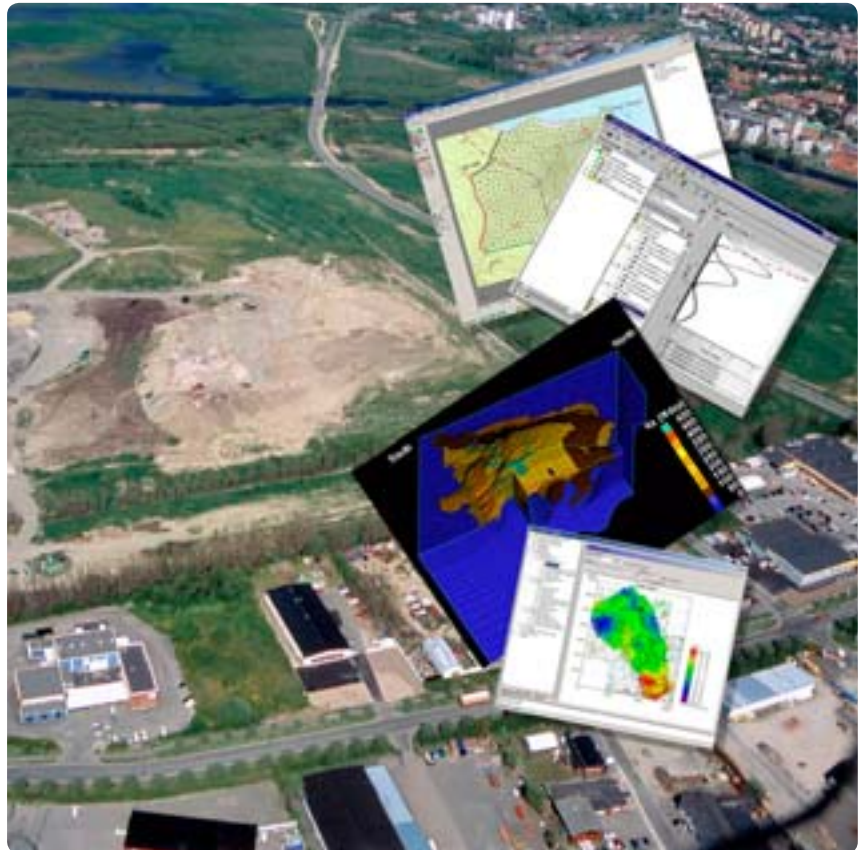


Datormodeller för föroreningsspredning fas 2

RAPPORT 5676 • FEBRUARI 2007



Kunskapsprogrammet



Datormodeller för föroreningsspredning fas 2

Lars-Göran Gustafsson, DHI Water & Environment
Anders Refsgaard, DHI Water & Environment

Beställningar

Ordertel: 08-505 933 40

Orderfax: 08-505 933 99

E-post: natur@cm.se

Postadress: CM-Gruppen, Box 110 93, 161 11 Bromma

Internet: www.naturvardsverket.se/bokhandeln

Naturvårdsverket

Tel 08-698 10 00, fax 08-20 29 25

E-post: natur@naturvardsverket.se

Postadress: Naturvårdsverket, SE-106 48 Stockholm

Internet: www.naturvardsverket.se

ISBN 91-620-5676-X.pdf

ISSN 0282-7298

© Naturvårdsverket 2007

Elektronisk publikation

Omslagsfoto: Tony Pearce. Flygbild över Härlövstippen i Karlstad

Förord

Ett av riksdagens miljömål är Giftfri miljö. I arbete för att nå målet ingår att efterbehandla och sanera förorenade områden. Brist på kunskap om riskerna med förorenade områden och hur de bör hanteras har identifierats som hinder för ett effektivt saneringsarbete. Naturvårdsverket har därför initierat kunskapsprogrammet Hållbar Sanering.

Den här rapporten redovisar projektet Utvärdering av datormodeller för förorenings-spridning – fas 2. Projektet påbörjades med fas 1 i augusti 2004, som slutfördes i mars 2005. Fas 2 påbörjades i oktober 2005 och slutfördes december 2006.

Rapporten från fas 1 berörde olika datormodellers begränsningar och lämplighet vid riskbedömning av förorenings-spridning och ger på så vis en överblick över tillgängliga modeller. I fas 2 har två utvalda datormodeller använts på tre olika praktikfall och problemställningar. Vid beräkningarna har olika modellparametrar och förutsättningar varierats och analyserats. Detta har lett till en rad rekommendationer för användning av datormodeller i samband med riskbedömning under svenska förhållanden.

Projektet har bedrivits av en arbetsgrupp huvudsakligen bestående av Lars-Göran Gustafsson, Anders Refsgaard, Michael Kristensen, Ann-Marie Gustafsson och Mona Sassner, samtliga vid DHI Water & Environment. Författarna vill rikta ett stort tack till C4-Teknik Kristianstads kommun och Svensk Kärnbränslehantering AB, som bidragit med värdefull indata till de studerade praktikfallen. Ivars Neretnieks, KTH, har varit Hållbar Sanerings kontaktperson för arbetet.

Naturvårdsverket har inte tagit ställning till innehållet i rapporten. Författarna svarar ensamma för innehåll, slutsatser och eventuella rekommendationer.

Naturvårdsverket februari 2007

Innehåll

FÖRORD	3
SAMMANFATTNING	7
SUMMARY	10
1 BAKGRUND	13
2 SYFTE OCH METODIK	14
3 MODELLERINGSMETODIK	15
3.1 Påverkande faktorer vid förorenings spridning	15
3.1.1 Föroreningskällan	15
3.1.2 Vattnets rörelse	16
3.1.3 Transport och avskiljningsprocesser	17
3.2 Modelleringsprinciper	19
3.2.1 Allmänna principer	19
3.2.2 Vanliga förenklingar	20
3.3 Modellers begränsningar och lämplighet	21
3.3.1 Kalibrering av flödes- och transportmodeller	21
3.3.2 Osäkerheter	23
3.3.3 Modellbegränsningar och lämplighet	25
3.4 Studerade modellsystem	25
3.4.1 Visual MODFLOW Pro	26
3.4.2 MIKE SHE	28
3.4.3 Darcy Tools	30
4 PRAKTIKFALL	32
4.1 Härlövs Ängar i Kristianstad	32
4.1.1 Bakgrund och problemställning	32
4.1.2 Geohydrologi	34
4.1.3 Numerisk modell	35
4.2 Djupförvar av kärnbränsle i Forsmark	37
4.2.1 Bakgrund och problemställning	37
4.2.2 Geohydrologi	38
4.2.3 Numerisk modell	38
4.3 Ytlig deponi i ett morän/urbergsområde	41
4.3.1 Bakgrund och problemställning	41
4.3.2 Geohydrologi	42
4.3.3 Numerisk modell	43
5 GENOMFÖRDA BERÄKNINGAR	44
5.1 Härlövs Ängar i Kristianstad	44
5.2 Djupförvar av kärnbränsle i Forsmark	46

5.3	Ytlig deponi i ett morän/urbergsområde	48
6	BERÄKNINGSRESULTAT	49
6.1	Härlövs Ängar i Kristianstad	49
6.1.1	Övergripande resultat	49
6.1.2	Ythydrologins betydelse	52
6.1.3	Avskiljningsprocessers betydelse	53
6.1.4	Betydelse av numerisk upplösning	54
6.2	Djupförvar av kärnbränsle i Forsmark	57
6.2.1	Jämförelse av Darcy Tools och MIKE SHE	57
6.2.2	Ythydrologins betydelse	59
6.2.3	Dispersionens betydelse	65
6.2.4	Sorptionens betydelse	69
6.3	Ytlig deponi i ett morän/urbergsområde	73
6.3.1	Jämförelse av MIKE SHE och MODFLOW	73
6.3.2	Betydelse av geologisk och tektonisk tolkning	74
7	DISKUSSION	77
7.1	Modellkomplexitet avseende ythydrologin	77
7.2	Transport och spridningsprocesser	78
7.3	För- och nackdelar med modellkoncepten	79
7.4	Slutsatser och förslag till fortsatt arbete	80
8	REFERENSER	83
BILAGA 1	- EKVATIONER FÖR FLÖDE OCH TRANSPORT AV LÖSLIGA ÄMNEN	87
1	Introduktion	87
2	Grundvattenflöde	87
3	Flöde i den omättade zonen	90
4	Transport i grundvatten	91
5	Transport i den omättade zonen	93
6	Källor och sänkor	93
6.1	Transport i spruckna media	94
6.2	Sorptionsprocesser	94
6.3	Nedbrytning	96
6.4	Växtupptag	97
6.5	Monod-liknande reaktioner	97
6.6	Geokemiska och övriga reaktioner	97
BILAGA 2	- BEGREPP, TERMER OCH FÖRKORTNINGAR	99
	Begrepp och termer	99
	Förkortningar	104

Sammanfattning

Användning av datormodeller i förbindelse med riskbedömning av förorenings-spridning i mark- och grundvatten har på senare tid ökat. Modellerna blir mer och mer avancerade och komplexa och som redskap utmärker de sig genom att kunna sammanställa data, som framkommer som underlag på ett konsistent och sammanhängande sätt.

För att korrekt simulera transport och utspädning av lösliga ämnen krävs en korrekt beskrivning av hydrologin. Eftersom flödesförhållandena ofta varierar stort och med stora rumsliga variationer, rekommenderas fysiskt baserade modeller med begränsad rumslig och begreppsmässig förenkling av parametrar vid detaljerade riskbedömningar. Förutom beskrivning av flödesförhållanden, påverkas transporten av lösliga ämnen av den effektiva porositeten, dispersionen och de kemiska och geokemiska egenskaperna hos jorden och de lösliga ämnena.

Användning av modeller för förutsägelse av transport och omsättning av olika ämnen innebär alltid utveckling av en strömningsmodell och en efterföljande transportmodellering. För att etablera och bygga upp pålitliga modeller för simulering av flöde och transport krävs en stor mängd indata med rumslig och tidsmässig variation, t.ex. jordegenskaper, hydrologiska och meteorologiska egenskaper, hydrogeologiska egenskaper (hydraulisk konduktivitet och porositet), externa och interna randförhållanden samt kalibreringsdata, men även lösliga ämnens egenskaper gällande dispersion i jord, nedbrytning, geokemi, biogeokemi och diffusion.

Genom att endast etablera en modell, sker en kvalitetssäkring och bearbetning av data och information, men en strömningsmodell kräver även en kalibrering och validering, och en känslighetsanalys rekommenderas, för att kunna kvantifiera osäkerhetsnivån i modellen. Denna nivå kommer sedan att reflekteras i resultaten från den efterföljande transportmodelleringen. Det är dock ofta svårt att kalibrera – och validera – en modell på grund av sparsamt dataunderlag, men det är avgörande, att erhållna modellresultat eller prognoser sammankopplas med en osäkerhet.

Modellbegränsningar bidrar till resultatens osäkerhet. Det är därför uppenbart att man måste överväga lämpligheten hos en viss modell vid en viss riskbedömning. Valet av modellverktyg i förbindelse med genomförandet av ett modelleringsprojekt kommer typiskt att avgöras av vilka strömningsmässiga och ämnes-transportmässiga förhållanden som ska beskrivas med modellerna, vilket i sin tur ställer en rad krav på modellen. Det finns många alternativ gällande modellsystem som kan användas i samband med riskbedömningar kring grundvattenföroreningar.

Detta projekts övergripande syfte har varit att värdera olika modellsystems relevans, lämplighet och förmåga att beskriva strömning, transport och omsättning av ämnen i jord och grundvatten, och därmed dess lämplighet och förmåga att skapa underlag till en riskbedömning. Delmomenten i denna fas 2 har varit att testa två utvalda modellers lämplighet till att beskriva problemställningarna vid tre praktikfall, analysera effekten av osäkerheten i olika modellparametrar på resultaten och ge rekommendationer omkring användningen av datormodeller vid riskbedömning av grundvattenförorening.

De två utvalda modellsystemen är Visual MODFLOW Pro och MIKE SHE. MODFLOW är troligtvis det idag mest etablerade och använda modellsystem för simulering av grundvatten och erkänt som en industristandard för grundvattenmodellering. MODFLOW simulerar tredimensionellt grundvattenflöde genom att använda en finit differenstechnik för lösning av de styrande flödesekvationerna. MIKE SHE är ett integrerat hydrologiskt modellsystem som simulerar hela markdelen av den hydrologiska cykeln. MIKE SHE är därför inte enbart en tredimensionell, numerisk grundvattenmodell. Den inkluderar även moduler för avdunstning, ytavrinning, omättat flöde, transport av lösliga ämnen, geokemi, jordbruk. Modellresultaten från de två modellerna har jämförts med modellresultaten från en modell, som heter DarcyTools, som är ett datorprogram främst utvecklat för simulering av flöde och salttransport i sprickigt kristallint berg, men även poröst medium, t.ex. jordlager ovan sprucket berg, kan simuleras. DarcyTools är ett generellt program för grundvattenströmning, men tillämpningar som rör analyser av förvar för uttjänt kärnbränsle står i fokus.

Två av de tre praktikfallen är tagna ifrån pågående undersökningar dels vid Kristianstad gällande riskbedömning av en avfallsdeponi dels ifrån Forsmark gällande risker kopplade till djupförvaring av använt kärnbränsle. Utgående från de geohydrologiska förhållandena i Forsmark, har dessutom en tänkt problemställning konstruerats, med potentiell förorenings-spridning från en ytlig deponi mot en grundvattentäkt för ett mindre samhälle.

Modellerna har använts till att undersöka betydelsen av olika modellkomplexiteter, vad gäller bl.a. betydelsen av att beskriva ythydrologin på olika vis, betydelsen av att inkludera sorption och nedbrytning samt betydelsen av att använda en simpel partikelmodell kontra att använda en advektions-dispersions modell. Betydelsen av numerisk upplösning och dispersion har också undersökts. Dessutom har de använda modellsystemen värderats och jämförts med varandra. Således har ett stort antal modellsimuleringar genomförts, med många viktiga delresultat, som kan användas i det dagliga arbetet med riskbedömning. Slutligen är resultaten sammanfattade i ett antal rekommendationer:

- Riskbedömning av föroreningsfall som domineras av transport i djupa grundvattenmagasin, kan beskrivas under antagande om stationära förhållanden.
- Riskbedömning av föroreningsfall som domineras av transport i marknära grundvattenmagasin bör inkludera dynamiska randförhållanden i form av ”full ythydrologi”.
- Inledande partikelberäkningar kan rekommenderas för att snabbt få fram en bild av transportvägarna och uppehållstiderna.
- Var observant på numerisk dispersion vid val av beräkningsnät om en AD-modell används, speciellt i vertikal riktning.
- Inkludera om möjligt sorptions- och nedbrytningsprocesser i riskbedömningen.
- Inkludera information om sprickzoner i berg så långt som möjligt.

- Genomför känslighetsanalys av förhållanden som är osäkert bestämda.
- Den initiella placeringen av partiklar i en PT-simulering kan ha betydelse för resultaten och en känslighetsanalys bör genomföras som analyserar denna osäkerhet.
- MIKE SHE bör användas i situationer då ythydrologin har avgörande betydelse för riskbedömningen.
- Vid enklare analyser är MODFLOW snabbare att arbeta med än MIKE SHE, men det omvända förhållandet gäller då det handlar om komplexa, heterogena problemställningar.

Rekommendationerna ovan gäller under generella förhållanden, men en lång rad av delresultat med tillhörande kommentarer som återges i denna rapport, kan ge ytterligare inspiration och mer detaljerad information om hur datormodeller används vid riskbedömning.

Detta projekt har även påvisat en rad svagheter med dagens modellkoncept som man bör ta hänsyn till i en konkret riskbedömning. Speciellt gäller detta spridningen av reaktiva föroreningar. Vidare forskning och utveckling av metoder och modeller rekommenderas därför inom detta område för att minska osäkerheterna. Praktiska erfarenheter från mätningar och provtagning i fält bedöms också vara sparsamma, varför även detta ska beaktas.

För konkreta projekt som handlar om riskbedömning av reaktiva ämnen föreslås att både föroreningskomponenter i källan och deras nedbrytningsprodukter kartläggs, samt att även redoxförhållanden försöker kartläggas och vägas in vid riskbedömningen. Det är här också av extra stor betydelse att osäkerheterna i de mest betydande parametrarna bedöms och att en känslighetsanalys genomförs för dessa. Om vissa förhållanden utesluts i bedömningen, ska detta dokumenteras och innebörden kvantifieras.

Slutligen understryks att modellprognoser av ämnestransport kan innehålla stora osäkerheter, speciellt när sorption, nedbrytning och/eller andra geokemiska reaktioner är inblandade. Modellerna bör därför användas med yttersta försiktighet och respekt.

Summary

The use of computer models in connection with projects including environmental risk assessment has recently increased. Models have generally become more advanced and are excelling in the handling of data used as basis in modelling.

It is important to accurately describe the hydrology of the sub-surface system to correctly simulate the transport and attenuation of solutes. Flow conditions are often highly dynamic and with large spatial variations. Therefore, it is recommended to apply physically based models with as little lumping of parameters as possible in connection with detailed environmental risk assessments. In addition to the flow conditions, the transport of solutes in the sub-surface system depends on the effective porosity, dispersion conditions and the chemical and geochemical characteristics of the soil and solutes.

The application of models for prediction of transport and fate of solutes, always require the development of a flow model and a succeeding transport model. A large amount of spatially and temporally varying input data is required to develop a reliable model for simulation of flow and transport. For example, soil properties, hydrogeological properties, boundary conditions, calibration data and dispersion characteristics of solutes in the soils, degradation of solutes, geochemical characteristics, biochemical reactions and diffusion in and out of stagnant zones.

Through the development of the flow model, input data is pre-processed and quality controlled. However, to be able to quantify the inaccuracy of the model, a calibration and validation of the model is required along with a recommended sensitivity analysis. The flow model inaccuracy will be reflected in the succeeding transport modelling and in the model results. Conclusively, model results should always be associated with an inaccuracy.

Model limitations in a way add to the uncertainty of the model results. Therefore, it is important to consider the suitability of a certain model in a certain risk assessment study. The choice of modelling system should in general be decided by the governing flow and transport conditions in the study. Today, there are numerous models available for risk assessment of groundwater pollutions.

The general purpose of this project has been to evaluate different models suitability and ability to simulate flow and transport of solutes in the sub-surface system. The purpose of this second phase of the project has been to test two selected modeling systems and their ability to describe and analyze the effect of parameter uncertainty under three case studies. Furthermore, the results of this exercise should lead to a number of recommendations regarding the use of simulation models for risk assessment studies.

The two selected modeling systems are the Visual MODFLOW Pro and the MIKE SHE modeling systems. MODFLOW is probably today the most used modeling system for simulation of groundwater flow and solute transport and as such the industry standard for groundwater modeling. MODFLOW simulates three-dimensional groundwater flow using finite-difference techniques for solving the governing flow equations. MIKE SHE is an integrated hydrological modeling system that simulates the entire land phase of the hydrological cycle. As such MIKE

SHE is not only a three-dimensional groundwater model. It includes also modules for the description of evaporation, evapotranspiration, infiltration unsaturated flow, surface flow and river flow. Furthermore, the modeling system includes modules for description of solute transport including geochemical various processes in the different parts of the hydrological cycle. Model results from the two models are compared with simulations carried out with the DarcyTools model code. This code is developed for flow and salt transport in fractured media but may also handle porous top soils.

Two of the case studies are taken from on-going investigations namely the one close to Kristianstad concerning risk assessment of leachate from a municipal waste disposal site and the one at Forsmark concerning risk assessment in connection with deposit of nuclear waste. The hydrogeological conditions at Forsmark have been used to construct a case with a potential pollution from a surface deposit.

The models have been used to investigate the effect of different model complexity including surface hydrology and infiltration description, sorption and degradation, and different solute transport descriptions i.e. particle tracking versus advection-dispersion. Furthermore, the effect of different discretisations and dispersion parameters were analyzed as well as a comparison between the different modeling systems. As such a large number of model simulations has been carried out leading to many important results that can be used in the daily risk assessment work. Finally, the results are boiled down to a number of recommendations:

- Risk assessments that is dominated of transport in deep, confined groundwater aquifers may well be described assuming stationary condition;
- Risk assessments that is dominated of transport in phreatic shallow aquifers should include dynamic boundary conditions so that the transient groundwater recharge is described as an integrated process
- Initial particle tracking simulations are recommended in order to get a quick picture of the transport paths and travel times.
- Be aware of numerical dispersion when applying and advection-dispersion model when the model discretisation is determined especially in the vertical direction.
- If possible include sorption and degradation descriptions in the solute transport simulations in the risk assessment.
- Include information about fracture zone as much as possible.
- Include sensitivity analyses to include parameter uncertainty in risk assessments.
- The initial location of particles in a particle tracking simulation may be significant for the results and a sensitivity analyses should be carried out to address this uncertainty.
- MIKE SHE should be applied under such conditions where the surface hydrology has significant influence on the risk assessment.

- Visual MODFLOW is easier to use than MIKE SHE under homogeneous and stationary conditions while the opposite is the case under complex, heterogeneous conditions.

The recommendations are valid under general conditions, but a huge amount of results including comments are also described in this report for further inspiration and detailed information about the application of simulation models in risk assessment.

This project has also proven a number of weaknesses with the modelling systems being used today, which must be taken to consideration when a concrete risk assessment is carried out. This should be given particular attention when it comes to spreading of reactive pollutants. Further research and development of methods and models within the area is therefore recommended to reduce the uncertainties. Practical experiences from outdoor measurements and sampling are until now very rare, which also should be considered.

For practical projects concerning risk assessment for reactive solutes it is proposed that compounds of pollutants, both from the solutes at the source and from the decay components, are mapped, and that also the redox conditions are included in the risk assessment. It is also of utmost importance that uncertainties for the most significant parameters are estimated and that sensitivity analyses are carried out for these parameters. If certain conditions are excluded in the appraisal, this should be documented and the significance must be quantified.

Finally, it is emphasized that model predictions regarding transport of solutes may contain large uncertainties, especially when sorption, decay and/or other geochemical reactions are involved. The models should therefore be used with utmost caution and respect.

1 Bakgrund

Användning av modeller i förbindelse med riskbedömning av förorenings spridning i mark- och grundvatten har stigit betydligt genom det senaste årtiondet, och modellerna blir mer och mer avancerade och komplexa. Som redskap utmärker modellerna sig genom att kunna sammanställa de flesta, eller alla data, som framkommer som underlag på ett konsistent och sammanhängande sätt. Genom att endast etablera en modell, sker en kvalitetssäkring och bearbetning av data och information.

Användning av modeller för förutsägelse av transport och omsättning av olika ämnen innebär alltid utveckling av en strömningsmodell. Strömningsmodellen ska kalibreras och valideras och en känslighetsanalys bör genomföras för att kunna kvantifiera strömningsmodellens osäkerhetsnivå till förutsägelse/simulering av olika strömningsförhållanden. Det är avgörande för den efterföljande transportmodelleringen att strömningsmodellen är så säker som möjligt – men också avgörande att man kan kvantifiera osäkerheten och jämföra denna med prognoser baserade på simuleringar med transportmodellen.

Lika viktigt är det att kunna kalibrera och validera transportmodellen samt kunna kvantifiera osäkerhetsnivån i modellen. Det är dock ofta svårt att kalibrera – och validera – modellen på grund av sparsamt dataunderlag, men det är avgörande, att erhållna resultat sammankopplas med en osäkerhet.

Valet av modellverktyg i förbindelse med genomförandet av ett projekt kommer typiskt att avgöras av vilka strömningsmässiga och ämnestransportmässiga förhållanden som ska beskrivas med modellerna. Typiskt etableras först en konceptuell modell, både för geologi och hydrogeologi, för att beskriva relevanta strömningsprocesser och geologiska formationer som ska tas med i strömningsmodellen. Detta ger anledning till en rad krav på modellen, t.ex. ska den omrättade zonen inkluderas i strömningsmodellen och/eller kan man nöja sig med att arbeta med en stationär ”ren” grundvattenmodell. Likaledes bör en konceptuell modell utarbetas för transport och omsättning av relevanta ämnen i riskbedömningen. Detta leder igen till en rad krav på transportmodellens egenskaper, ska den t.ex. innehålla möjligheten att beskriva nedbrytning och vilken slags nedbrytning är det då tal om, eller ska densitetsbetingad transport (och strömning) kunna beskrivas med modellen. Dessa krav kan i slutändan gå tillbaks och ställa krav på strömningsmodellen, om det t.ex. är nödvändigt med en kopplad beräkning av strömning och transport på grund av t.ex. densitetsbetingade strömningsförhållanden.

2 Syfte och metodik

Det finns en lång rad modellsystem som kan användas i samband med riskbedömningar kring grundvattenföroreningar. Projektets övergripande syfte är att värdera dessa olika modellsystems relevans, lämplighet och förmåga att beskriva strömning, transport och omsättning av ämnen i jord och grundvatten, och därmed dess lämplighet och förmåga att skapa underlag till en riskbedömning.

Under projektets första fas (Gustafsson, et al, 2005) har ett stort antal tillgängliga modeller för riskbedömning utvärderats. I första omgången har modellerna prioriterats efter deras användbarhet och lämplighet. Därefter har utvalda modeller utvärderats mer i detalj.

Modeller av olika komplexitet används till kvantifiering av olika ämnens transport, både i förbindelse med frigörelsen i föroreningskällan, i den omättade zonen och i grundvattnet. Man kommer ovillkorligen få olika resultat med olika modeller, då förutsättningarna och datahanteringen kan vara mycket olika.

I den andra fasen, som avrapporteras här, har därför några utvalda modellsystem använts praktiskt på ett par konkreta problemställningar. Modellsystemen har använts med olika detaljeringsgrad avseende beskrivning av transport och processmekanismerna, för att ytterligare kunna värdera behoven av olika modellkomplexitet.

I samband med detta har vi fokuserat på modellernas lämplighet till att beskriva de fysiska förhållandena vid utvalda områden, skillnaden i hur indata hanteras, presentation av resultat och användarvänlighet. Slutligen har resultaten generaliserats så de kan användas för val av lämplig modellkomplexitet under olika förhållanden.

Projektet innefattar följande delmoment:

- 1) Val av områden för praktisk tillämpning och insamling av tillgängliga data från dessa
- 2) Etablering och användning av utvalda modeller för varje område
- 3) Diskussion och generalisering av resultat, bl.a. med avseende på val av modellkomplexitet

3 Modelleringsmetodik

3.1 Påverkande faktorer vid förorenings-spridning

Koncentrationen av ett ämne i en viss punkt och vid en viss tidpunkt styrs av en stor mängd faktorer. Dessa kan grovt indelas i:

- Föroreningskällans art och karaktär
- Vattnets rörelse och strömningsmönster
- Transport och avskiljningsprocesser för det aktuella ämnet

3.1.1 Föroreningskällan

Föroreningskällans utbredning är naturligtvis av stor betydelse vid en riskbedömning. Här talar man ofta om diffusa källor och punktkällor, se figur 1. En punktkälla är väldefinierad i rummet och har en begränsad utbredning, t.ex. vid en trafikolycka eller en läckande behållare. Diffusa källor är däremot, precis som namnet antyder, mer svårdefinierbara och är utbredda över ett större område, t.ex. läckage från jordbruksmark. Av naturliga skäl är det därför oftast enklare att beskriva spridningen av en punktkälla än en diffus källa.

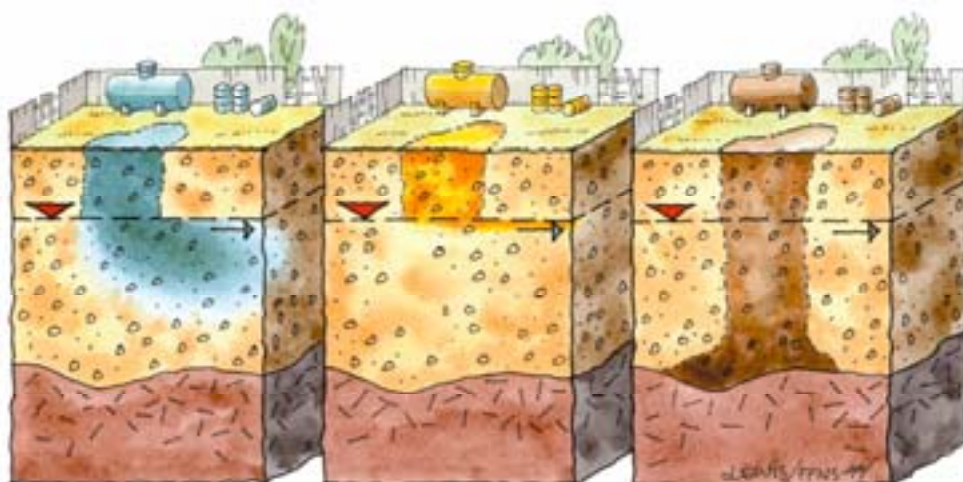


Figur 3-1. Exempel på diffusa källor (överst) och punktkällor (nederst).

Föroreningskällans djupläge är en annan viktig faktor. Om föroreningen sker direkt på markytan, kan den vid regn röra sig både via ytavrinning och infiltration, beroende på topografiska och jordartsmässiga förhållanden. Om föroreningen sker i marken, men fortfarande i den övre omättade zonen, urlakas den successivt vid infiltration. Vid gynnsamma jordartsförhållanden kan detta dock ta relativt lång tid.

Om föroreningen däremot sker nära eller till och med under grundvattenytan, transporteras den direkt vidare med den grundvattenström som finns på platsen.

Slutligen kan typen av föroreningsämne vara avgörande för hur spridningen sker, se figur 3-2. Om ämnet är vattenlösligt (t.ex. salter, syror och baser) så följer det i stort sett vattnets rörelse. Om ämnet däremot är svårlösligt och lättare än vatten (t.ex. bensin och olja), så kommer det att lägga sig på grundvattenytan och röra sig med den ytligaste vattenströmningen. Om ämnet slutligen är svårlösligt och tyngre än vatten (t.ex. klorerade lösningsmedel), så kommer det att ”falla” till botten och slutligen kanske lägga sig i urbergsvackor. De senare exemplen med svårlösliga ämnen berörs inte vidare i denna rapport.

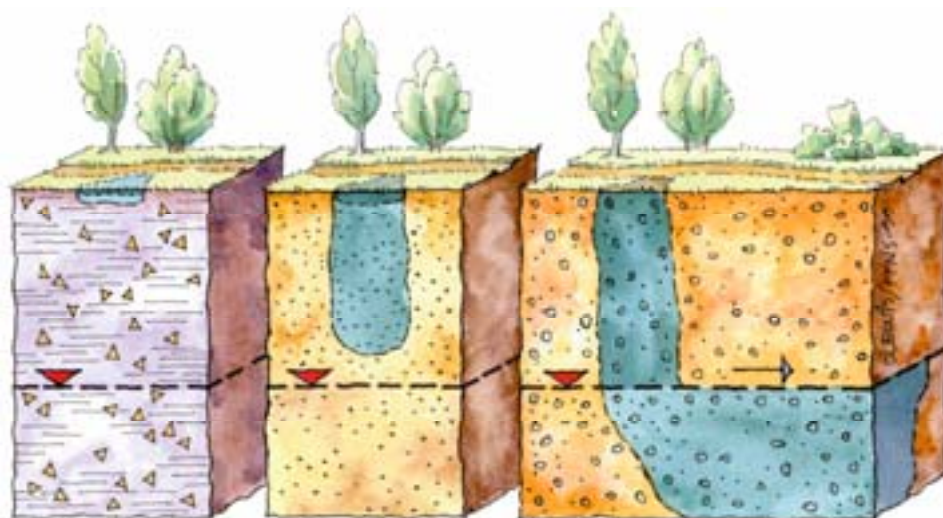


Figur 3-2. Principiell spridning beroende på om ämnet är vattenlösligt (vänster), svårlösligt och lätt (mitten), eller svårlösligt och tungt (höger).

3.1.2 Vattnets rörelse

För vattenlösliga ämnen är således vattnets rörelse avgörande för hur ämnet kommer att spridas. Påverkansfaktorerna för de olika delarna av vattnets rörelse sammanfattas nedan:

- *Nettonederbörden* (dvs exkl avdunstningen) är den övergripande drivande faktorn och styrs främst av jordartens vattenhållande förmåga och vegetationen.
- Fördelningen mellan *ytavrinning* och *infiltration*, som styrs av nettonederbördens storlek, topografi (i makro- och mikroskala, t.ex. plogfårornas riktning, längs med eller tvärs en sluttning), jordartens genomsläpplighet och grundvattenytans läge.
- Rörelse genom *omättad zon*, som styrs av jordartens genomsläpplighet och vattenhållande egenskaper, samt aktuellt vatteninnehåll.
- Rörelse genom *mättad zon*, som styrs av olika lagers konduktivitet och mäktighet, samt rådande tryckgradienter (in- eller utströmning).



Figur 3-3. Exempel på skillnader i spridning av ett ämne i en lermorän (vänster), siltig finsand (mitten) och sandig grus (höger).

Jord- och bergarters hydrauliska egenskaper har alltså ha en avgörande betydelse för hur snabbt ett ämne sprids med vattnets rörelse, se exempel i figur 3-3 ovan. Men även andra faktorer är av stort intresse för att klarlägga sårbarheten i en viss punkt eller område:

- Den omättade zonens mäktighet och hydrologiska egenskaper
- Den omättade zonens vatteninnehåll (årstid)
- Tryckgradienter i grundvattnet (in- eller utströmning)

3.1.3 Transport och avskiljningsprocesser

Transporten av lösta ämnen i den mättade zonen styrs av:

- advektion
- dispersion
- diffusion

Den *advektiva transporten* bestäms av den verkliga vattenhastigheten i hållrummen mellan jordpartiklarna. Denna påverkas förutom av tryckgradienter och hydraulisk konduktivitet, också av den effektiva porositeten. För att kunna bestämma den verkliga grundvattenhastigheten, divideras alltså grundvattenflödet för en viss tvärsnittsarea med den effektiva porositeten (θ_{eff}), se figur 3-4 nedan.

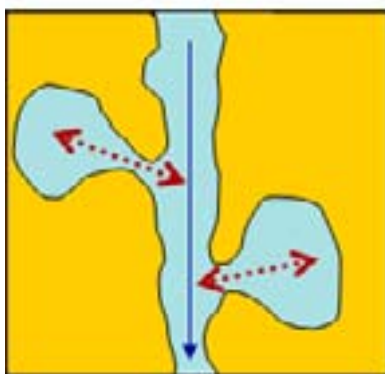
$$v = \frac{K \cdot I}{\theta_{\text{eff}}}$$

Figur 3-4. Illustration av förhållandet mellan verklig grundvattenhastighet (v) och grundvattenflödet för en viss tvärsnittsarea ($K \cdot I$).

Dispersion står för spridandet av lösliga ämnen som inte är inkluderad i de simulerade medelflödes hastigheterna, dvs i advektionen. Desto noggrannare man beskriver den rumsliga variationen för den advektiva hastigheten, desto mindre dispersiviteter kan användas i modellen.

Transporten av lösta ämnen i den omättade zonen styrs också, i analogi med ovanstående, av advektion och dispersion.

I vissa jord- och bergmaterial (t.ex. sprickigt berg) kan *diffusionen* mellan transportzoner (mobila zoner) och omgivande porsystem vara betydelsefull för transporten av ämnen, se figur 3-5.



Figur 3-5. Illustration av diffusion mellan mobila och immobile zoner.

Under ämnets transport i vattnet kan olika typer av avskiljningsprocesser pågå. Exempel på sådana processer är

- sorption, som är en geokemisk reaktion där ämnet binds till jord/bergmaterialets yta genom elektrostatiska krafter
- biologisk nedbrytning
- utfällning
- radioaktiv avklingning
- växters upptag

Avskiljningens storlek styrs främst av:

- porositet
- jorddensitet
- andel organiskt mtrl
- vattenmättnad
- jordtemperatur
- syretillgång
- ämne

3.2 Modelleringsprinciper

3.2.1 Allmänna principer

För att korrekt simulera transport och utspädning av lösliga ämnen krävs en **riktig** beskrivning av hydrologin. Förhållandena i den omättade zonen är ofta komplexa och grundvattnets bildning varierar ofta stort, både rumsligt och tidsmässigt. De drivande variablerna i det hydrologiska systemet är de meteorologiska förhållandena och grundvattnets strömning styrs av de hydrauliska egenskaperna hos de geologiska formationerna samt av de hydrauliska randförhållandena. Mänskligt styrda påverkningar på grundvattnet i form av grundvattenuttag och återinfiltration kan också styra grundvattnets strömningsmönster.

Flödesförhållanden varierar ofta stort och med stora rumsliga variationer. Därför rekommenderas fysiskt baserade modeller med begränsad rumslig och begreppsmässig förenkling av parametrar. Detta betyder att fysiska mätningar direkt kan användas som indata till modellen. Trots detta behövs dock kalibrering mot t.ex. uppmätta grundvattennivåer, markfuktighet och nivåer i vattendrag/sjöar samt randförhållanden för att säkerställa kvaliteten för en vidare transportmodellering.

I tillägg till de flödesförhållanden som beskrivs ovan, så beror transporten av lösliga ämnen på den effektiva porositeten, dispersionen och de kemiska och geokemiska egenskaperna hos jorden och de lösliga ämnena. Sådan information kan ofta vara svår att tillgå men en kalibrering mot uppmätta koncentrationer förbättrar modellens pålitlighet.

Tillämpning av grundvattenmodeller för simulering av flöden och transport är dock det enda sättet varav flödes- och transportfenomen kan analyseras för att ta fram rehabiliteringsscenarier för grundvattenföroreningar. Även om många modellparametrar associeras med stora osäkerheter, så kan denna typ av analys ge svar på många tänkbara frågor och scenarier.

För att etablera och bygga upp pålitliga modeller för simulering av flöde och transport krävs en stor mängd indata. Flöde i den omättade zonen beräknas traditionellt med Richards ekvation (Maidment, 1992 eller Bilaga 1), som beskriver förhållandet mellan vattenflöde, markfuktighet och hydraulisk konduktivitet. Randförhållandena är vanligtvis i form av infiltration i den övre delen av grundvattenytan. Det antas ofta att flödet i den omättade zonen är vertikalt, dvs. modellering i en dimension. Grundvattenflödet är ett masskonserverat och tredimensionellt fenomen som styrs av Darcys lag (Maidment, 1992 eller Bilaga 1).

För att beskriva och simulera dessa processer behövs följande indata med rumslig och tidsmässig variation:

- jordegenskaper, t.ex. pF-diagram och relationskurva mellan mätnad och hydraulisk konduktivitet
- hydrogeologiska egenskaper, t.ex. hydraulisk konduktivitet och porositet
- externa randförhållanden, t.ex. vattendrag, sjöar och andra vattenkroppar
- interna randvillkor, t.ex. grundvattenuttag och återinfiltration

- kalibreringsdata, t.ex. uppmätta grundvattennivåer, uppmätta nivåer i vattendrag och sjöar och profiler över markfuktighet.

Transport av reaktiva lösliga ämnen är också ett mycket dynamiskt och rumsligt varierande fenomen. Den styrs av ekvationen för advektion-dispersion kompletterad med reaktionsparametrar som svarar för förändringar i koncentration orsakad av biogeokemiska reaktioner (se Bilaga 1).

Modeller för simulering av lösta ämnens transport kräver insamling, uppskattning och bearbetning av följande tidsmässiga och rumsligt varierande indata:

- lösliga ämnens egenskaper gällande dispersion i jord
- lösliga ämnens nedbrytning
- geokemiska egenskaper
- biogeokemiska egenskaper
- diffusion, in och ut från stagnerande zoner i grundvattnet
- kalibreringsdata, t.ex. uppmätta koncentrationer i grundvattnet.

3.2.2 Vanliga förenklingar

Av ovanstående beskrivning framgår att modellering alltid innehåller ett visst mått av förenkling av den verklighet och den problemställning man har för avsikt att beskriva. Ibland väljs ett större mått av förenklingar, medan andra fall beskrivs med alla tänkbara och tillgängliga detaljer. Det är oftast, av t.ex. resursmässiga skäl, önskvärt att förenkla beskrivningen så långt som möjligt. Å andra sidan finns det då en uppenbar risk att man missar betydande aspekter, som påverkar den slutliga riskbedömningen. Av detta skäl är det av stort intresse att utvärdera hur olika vanligen förekommande förenklingar påverkar det slutliga resultatet för olika områden och vid olika frågeställningar. De förenklingar man vanligen gör kan indelas i följande kategorier:

- tidsvariationen (dynamisk eller stationär beskrivning)
- randvillkor för grundvattenzonen
- koppling mellan ytvatten och grundvatten
- variabilitet för geologi och hydrauliska egenskaper
- numerisk representation (skaleffekter)
- dispersionsbegreppet
- biogeokemiska ämnesegenskaper

Det är mycket vanligt att man vid grundvattenmodellering bortser från förekommande tidsvariationer, dvs genomför rent stationära beräkningar. Vid denna typ av modellering ansätts oftast grundvattenbildningen som ett konstant randvillkor för grundvattenzonen. Många gånger baserat på schablonvärden, utan att dessförinnan beräknas. I dessa fall hanteras också eventuell koppling mot ytvatten på ett statiskt sätt, utan tidsvariationer, t.ex. via fasthållna tryck. I vissa fall, då t.ex. den dynamiska effekten av mänskliga ingrepp ska studeras (t.ex. till följd av konstruktionsarbeten), körs dynamiska beräkningar trots konstanta randvillkor.

Detta för att enklare kunna urskilja t.ex. influensområden av kortvariga grundvattensänkningar, som annars skulle överskuggas av den normala hydrologiska variationen.

Graden av förenklingar vid beskrivning av variationerna i geologiska och hydrauliska egenskaper styrs oftast av tillgången till geofysisk information. Kalibreringsprocessen resulterar sedan ofta i ett ”schackbräde” av egenskaper, formade efter tillgången till grundvattenobservationer. Av beräkningstekniska skäl (beräkningshastighet) lockas man ofta till användning av grova beräkningsnät. Detta är rationellt och oftast försvarbart, men det är viktigt att hänsyn tas till de skaleffekter som kan erhållas. T.ex. medelvärdesbildning av grundvattentryck som sedan ska tolkas mot grundvattenobservationer i en specifik punkt. Tolkningsproblem kan då t.ex. uppstå vid stora gradienter.

Ett alltför grovt numeriskt beräkningsnät kan speciellt ge problem vid spridningsberäkningar inklusive dispersion. Så kallad numerisk dispersion kan då uppstå, vilket kan skapa mycket oönskade effekter, med alltför diffusa föroreningsfronter som följd. Vid spridningsberäkningar som baseras på partikelbanor, som endast styrs av den advektiva transporten, slipper man denna typ av problem. Partikelberäkningar ger å andra sidan inte samma möjligheter till realistisk beskrivning av föroreningsplymers spridning. Ett finare beräkningsnät krävs då. Samtidigt ska man ha klart för sig att dispersionsprocessen i sin definition är ett empiriskt och fysikaliskt förenklat sätt att beskriva ett ämnes verkliga rörelsemönster.

Olika ämnens biogeokemiska processegenskaper beskrivs vanligen med makroparametrar, t.ex. retardationskoefficienter och nedbrytningskonstanter. Dessa beror ofta på fysiska egenskaper i jord och hos ämnet. Sorptionen beskrivs t.ex. ofta som förhållandet mellan upplöst ämne och i jorden adsorberat ämne (K_d). Likaså beskrivs ofta ett ämnes nedbrytning eller avklingning med en enkel halveringstid. Denna typ av parametrar återfinns ofta i litteratur för specifika ämnen under olika markförhållanden. Denna typ av makroparametrar är naturligtvis en kraftig förenkling av de verkliga biogeokemiska processerna, men det saknas ofta tillräckligt med data för en mer detaljerad och korrekt beskrivning av de geokemiska processerna. Detta förhållningssätt kan dock ge helt felaktiga resultat i en konkret riskbedömning. Litteraturvärden bör därför justeras genom kalibrering mot uppmätta koncentrationer och för aktuella parametrar bör det genomföras känslighetsanalyser.

3.3 Modellers begränsningar och lämplighet

3.3.1 Kalibrering av flödes- och transportmodeller

Tillämpning av numeriska modeller kräver generellt uppskattning av modellparametrar. Rumsligt förenklade, konceptuella modeller innefattar konceptuella parametrar som är relaterade till aggregerade beskrivningar av hydrologiska processer. Dessa kan i allmänhet inte bestämmas utifrån ett områdes fysiska egenskaper och

därmed behöver dessa modeller kalibrering. Gällande så kallade distribuerade och fysiskt baserade modeller, så ska modellparametrar i princip kunna samlas in från uppmätta data. I praktiken är det dock omöjligt att bestämma modellparametrar för varje individuell beräkningscell på grund av skalproblem (skillnader mellan uppmätt skala och den skala där de algoritmiska processbeskrivningarna härrör ifrån) liksom experimentella hinder. Av detta kan man dra slutsatsen att även distribuerade och fysikaliskt baserade modeller är i behov av kalibrering.

Vid kalibrering av rumsligt förenklade och konceptuella modeller, justeras parametrar för att simulerad data ska motsvara uppmätta data. Mycket forskning har fokuserats på att uppveckla automatiska procedurer för kalibrering av rumsligt förenklade och konceptuella modeller. Begränsad erfarenhet är dock dokumenterad från automatisk parameteruppskattning för distribuerade och fysiskt baserade modeller.

En rigorös modellparametrisering eller konceptualisering är avgörande för en korrekt kalibrering av en distribuerad och fysiskt baserad modell. Denna aspekt är av ännu större betydelse när automatiska procedurer tillämpas för parameterestimering. En annan viktig aspekt som bör övervägas för parameterestimering i distribuerade modeller är användandet av kalibreringsdata. Ett ramverk för en korrekt modellkalibrering med automatisk parameterestimering innefattar följande:

- modellparametrisering och val av kalibreringsdata
- specificering av kalibreringskriterier
- val av optimeringsalgoritm.

Den tillgängliga fältdatan, t.ex. geologiska beskrivningar från borrhållsloggar och tolkade kartor, pumptest, meteorologisk information etc., bör användas i modellparametriseringen för att definiera rumsliga mönster hos modellparametrarna för att i sin tur beskriva de mest betydelsefulla variationerna. Detta görs ofta genom att definiera en konceptuell modell med lämpliga grupper av parametrar för geologiska enheter etc. För varje grupp fastställs sedan vissa parametrar direkt från fältdata medan andra parametrar genomgår kalibrering. Utmaningen ligger i att formulera en relativt enkel modellparametrisering i syfte att skapa en representativ kalibrering, samtidigt som den hålls tillräckligt distribuerad för att fånga den rumsliga variationen hos nyckelparametrarna. I den initiala parametreringsprocessen kan en känslighetsanalys utföras för att utreda känsligheten hos parametrarna och därmed identifiera vilka som vidare kan förfinas med kalibrering.

I ett objektiva sammanhang kan modellkalibrering generellt utföras på följande grunder:

- flertal variabla mätningar, t.ex. grundvattennivåer, flöde (vattendrag) och vattenhalt i den omättade zonen
- flertal mätplatser, t.ex. flertal mätplatser, för samma variabel, distribuerad inom avrinningsområdet

- flertal reaktionstillstånd, t.ex. objektiva funktioner som mäter olika hydrologiska processers reaktioner såsom generell vattenbalans och maximala vattennivåer.

Det bör noteras att modellparametrisering och modellkalibrering är en iterativ process. Om kalibreringen resulterar i dåligt definierade parametervärden, bör man ompröva parametriseringen och definiera en enklare konceptuell modell som inkluderar färre kalibreringsparametrar. Om modellen däremot inte är kapabel att tillräckligt beskriva den rumsliga variation som reflekteras i observationer, bör man överväga att distribuera nyckelparametrar eller inkludera andra processbeskrivningar i kalibreringen.

Det bör också noteras att även om modellen är väl kalibrerad, så kan den ändå vara fysiskt inkorrekt med hänsyn till dess konceptuella uppbyggnad. Det är faktiskt mer vanligt med skillnader på sättet som modellen fungerar i jämförelse med de fysiska egenskaperna i systemet.

En modell är endast giltig med en uppsättning variabler under kalibreringsperioden. En modell som kalibreras under stationära förhållanden kan inte användas att förutspå förändringar gällande flödesriktning beroende på rumsliga och säsongsmässiga variationer i grundvattenmönstret.

3.3.2 Osäkerheter

Ett antal osäkerheter är involverade vid riskbedömning gällande grundvattenförorening. Osäkerheter kan delas in i osäkerheter som härrör från beskrivningen av de gällande fysiska förhållandena och osäkerheter som härrör ifrån användandet av numeriska verktyg för att simulera flöde, transport och fördröjning av vatten och lösliga ämnen. Rubin (2003) hävdar generellt att två typer av osäkerheter existerar: verklig variabilitet och osäkerhet gällande kunskap. De verkliga variabiliteterna är de som är naturliga, t.ex. slumpmässiga ostadigheter i egenskaper och miljömässiga effekter. Dessa variabiliteter kan inte reduceras. Osäkerheter gällande kunskap representerar brist på kunskap som kommer av vårt val av förenklade eller idealiserade modeller och från databrist. Denna typ av osäkerhet kan reduceras genom användandet av mer förfinade modeller eller genom insamling av ytterligare indata.

De fysiska förhållandena beskrivs ofta utifrån en skrivbordsstudie kombinerat med fältmätningar av olika detaljgrad. Med fysiska förhållanden menas geologi, hydrologi, hydrogeologi och förorenings-situation inom området. Osäkerheter är relaterade till:

- De geologiska förhållandena i området; vilka jordarter som är representerade, vilken är jordskiktningen i den omättade zonen, var finns berggrunden, hur impermeabel är berggrunden, finns det sprickor och vilka är deras huvudriktningar och storlek, hur heterogent är systemet i den omättade zonen m.m.
- De hydrogeologiska förhållandena i området; vilka är de hydrauliska egenskaperna hos de geologiska formationerna (hydraulisk konduktivitet,

magasinskoefficient, porositet, makroporer), finns det några linser med lägre permeabilitet där lösliga ämnen kan transporteras in och ut beroende på en diffusionsprocess, vilket är det hydrauliska trycket och förhållandena för grundvattennivån i de olika akvifererna och akvitarderna, vilken är gradienten för grundvattennivån och åt vilken riktning lutar den, vilka är de temporala variationerna m.m.

- De hydrologiska förhållandena i området; nederbörd, evapotranspiration, infiltration, vattendrag, sjöar eller liknande som påverkar flödesförhållandena, vilka är de temporala variationerna m.m.
- Vattenkvalitet; vilken halt och mängd har föroreningen vid källan, hur länge har föroreningen läckt ner till grundvattensystemet, vilka är förhållandena för adsorption och nedbrytning för varje typ av förorening, densitetsberoende flöde och transport, DNAPLS/NAPLS, vilka är förhållandena för dispersion m.m.

Dessa förhållanden är i stor utsträckning ofta uppskattade från existerande kunskap, erfarenhet från tidigare studier och möjligtvis även ett litet antal borrhål och vattenprov.

En modell kan användas för att förutspå visst grundvattenflöde eller föroreningstransport. Modellen kan också användas för att utvärdera olika åtgärdsalternativ, (t.ex. hydraulisk inneslutning, uppumpning och rehabiliterande behandling eller naturlig utspädning) men också som ett verktyg vid riskbedömning. För att kunna utföra detta måste modellen, oavsett om den är en flödesmodell för grundvatten eller en transportmodell för föroreningar, vara tillräckligt korrekt, vilket demonstreras under kalibreringsfasen. Men eftersom även en välkalibrerad modell är baserad på otillräcklig data eller överförenklingar, så kommer det att finnas fel och osäkerheter i en flödes- eller transportanalys. Detta innebär i sin tur att ett modellresultat eller en prognos inte kommer att vara bättre än en uppskattning. Av denna anledning bör alla modellresultat eller prognoser anges i ett intervall, för att reflektera osäkerheten hos modellparametrarnas värden och för att beskriva och kvantifiera den aktuella osäkerheten hos de erhållna resultaten.

Det valda modellsystemet kan ge upphov till osäkerheter i de uppnådda resultaten:

- numeriska fel såsom numerisk dispersion, grov diskretisering, trunkering
- modellkoden kan inte beskriva det konceptuella problemet, t.ex. beskrivs ett spricksystem i en kontinuum modell eller i sprickmodeller som förenklar spricksystemet, stationära modeller som tillämpas att beskriva problem av transient karaktär, konservativa modeller som tillämpas för att beskriva migration av DNAPLS/NAPLS eller densitetsberoende transportfenomen, diffusion in och ut från jordmatrisen i ett sprucket system eller i heterogena formationer m.m.

- modellsystemet klarar inte av att beskriva biogeokemiska reaktioner korrekt; många modeller beskriver komplexa biokemiska reaktioner genom första gradens ekvation för nedbrytning, jämvikt eller kinetiska processer, tillväxt av biomassa m.m.

Många faktorer påverkar osäkerheten i modellering vid riskbedömning. Som beskrivs ovan kan vissa metoder användas för att inkludera t.ex. geologisk heterogenitet och osäkerhet i modeller, men det kvarstår dock en stor forskning för att utveckla verktyg som kan användas i praktiken. Det finns även en tendens att fokusera på ett element osäkerhet åt gången, t.ex. geologi.

3.3.3 Modellbegränsningar och lämplighet

Som beskrivs ovan, så bidrar modellbegränsningar till resultatens osäkerhet. Det är därför uppenbart att man måste överväga lämpligheten hos en viss modell vid en viss riskbedömning.

Enkla modeller och sparsamma fältundersökningar kan ändå vara väldigt användbara för att undersöka det ungefärliga transportbeteendet hos föroreningar i grundvatten. Sådana modeller kan också användas för att definiera övervakningsprogram dvs. placering av brunnar, djup och frekvens för provtagning. De kan till och med användas för att utvärdera nödvändiga åtgärdsalternativ.

De stora investeringar som krävs för att genomföra återställande aktiviteter och åtgärder under långa perioder kan dock inte baseras på modeller som har en eller flera tydliga brister. De kan inte heller baseras på begränsad kunskap om förhållandena i fält. I sådana fall är det absolut nödvändigt med intensiva övervakningsprogram kombinerat med utvecklingen och tillämpningen av komplexa flödes- och transportmodeller kopplade till biogeokemiska modeller. I detta avseende är det också uppenbart att man måste uppskatta osäkerheterna i systemet och dess påverkan på de beslut som tas.

3.4 Studerade modellsystem

Under projektets första fas (Gustafsson, et al, 2005) har ett stort antal tillgängliga modeller för riskbedömning utvärderats. I första omgången har modellerna prioriterats efter deras användbarhet och lämplighet. Därefter har vissa utvalda modellsystem utvärderats mer i detalj. Av dessa framstod följande modellsystem som mest heltäckande. En mycket kortfattad beskrivning av respektive systems egenskaper ges nedan.

- FEMWATER
kapabelt system som inkluderar omättad zon och densitetsdriven strömning
mindre användbarhet med svårigheter i användargränssnittet
främst utvecklat för stationära problem

- Visual MODFLOW Pro, (Groundwater Vistas och GMS)
svaga (inga) kopplingar till omättad zon och ytvatten
god användbarhet med lätt användarvänligt gränssnitt
främst utvecklat för stationära problem
- MODFLOW SURFACT
kapabelt system som inkluderar omättad zon och densitetsdriven strömning
god användbarhet med lätt användarvänligt gränssnitt (Visual MODFLOW Pro)
främst utvecklat för stationära problem
- MIKE SHE
kapabelt system som inkluderar full ythydrologi och vattendrag helt integrerat
hög användbarhet med stark fysisk grund
för transienta problem anses systemet vara det bästa

Två av dessa system, Visual MODFLOW Pro och MIKE SHE, har använts i föreliggande projekt på tre olika problemställningar och områden. Dessa modellsystem beskrivs mer i detalj nedan. För en av problemställningarna har dessutom jämförelser gjorts med resultat från modellsystemet DarcyTools. Även detta system beskrivs kortfattat nedan.

3.4.1 Visual MODFLOW Pro

MODFLOW är troligtvis det idag mest etablerade och använda modellsystem för simulering av grundvatten och erkänt som en industristandard för grundvattenmodellering. MODFLOW simulerar tredimensionellt grundvattenflöde genom att använda en finit differenssteknik för lösning av de styrande flödesekvationerna.

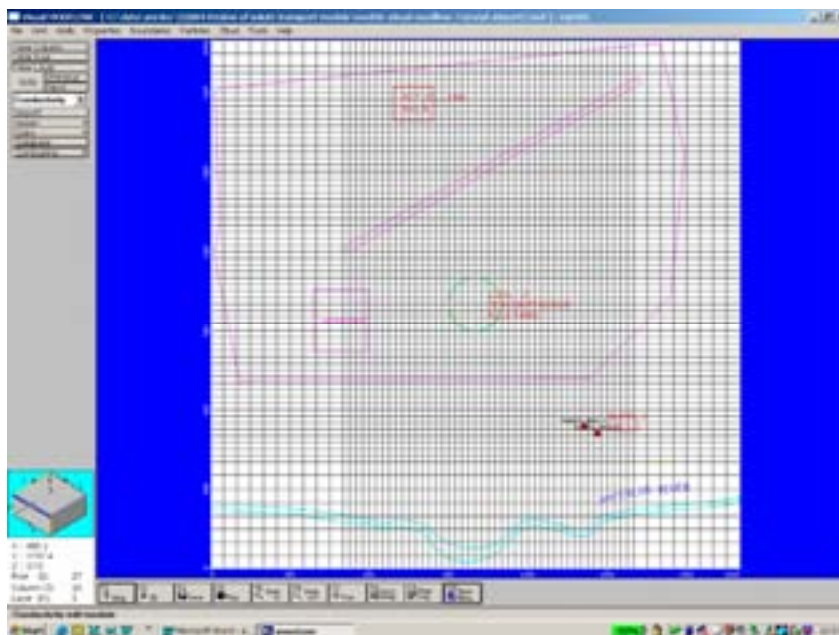
MODFLOW hanterar ekvationer för flöden i både öppna och slutna system/akviferer och simulerar därmed grundvattensystem under både naturlig och mänsklig påverkan. MODFLOWs grundmodell kan representera variationer hos de hydrauliska egenskaperna i porösa media, naturlig och artificiell vattenbildning, vattenföring (t.ex. nederbördsinfiltration, infiltration från eller vattenföring till vattendrag, grundvattenuttag eller återföring via brunnar) och olika randförhållanden. En akvifer indelas i ett ortogonalt nät av celler där akviferens egenskaper och hydrologisk påverkan definieras i varje cell. I varje cells mittpunkt beräknas grundvattnets tryck och variation. Randförhållanden kan definieras i varje cell (specifikt tryck, specifikt flöde eller ett tryckberoende flöde). Flöde in och ut ur modellen kan simuleras genom användandet av externa käll- eller sänktermer. Flöde mellan celler (både horisontellt och vertikalt) beräknas genom Darcys lag. Ett flertal textbaserade och grafiska verktyg för analys och bearbetning av indata och resultat finns tillgängliga.

Randförhållanden i originalversionen av MODFLOW behöver kännedom om skede och/eller infiltrationshastighet i ytvattensystemet. Dessa randförhållanden erbjuder inte heller ett sätt att automatiskt uppdatera skedet allt eftersom vatten fluktuerar in och ut ur vattenkroppar (Rumbaugh, 1999). Dock har moduler tagits

fram för att adressera vissa av dessa problem gällande interaktionen mellan ytvatten och grundvatten. Exempel på sådana moduler är:

- Vattendragsmodul: denna modul innehåller rutiner för att beräkna flöde mellan vattendrag och underliggande akvifer baserad på tryckdifferensen och konduktansen i sedimenten. Vertikalt flöde begränsas när vattenytan understiger vattendragets botten.
- Vattendrag-”routing”-modul: denna modul är en förlängning av vattendragsmodulen. Det är ingen riktig modell för simulering av flöde i vattendrag. Snarare är det ett beräknande program som kontrollerar flöde i en eller flera vattendrag som interagerar med grundvattnet. Om vattenmängden i vattendraget är lika med noll, då hindras följaktligen infiltration. Programmet tillåter två eller flera biflöden att sammanföras till ett vattendrag där flödet är summan av flödet i respektive biflod. Programmet tillåter även diversion från vattendrag (Prudic, 1989; ESI, 1999). Modulen inkluderar även en begränsad möjlighet att beräkna transienta vattennivåer i ett vattendrag baserad på Mannings ekvation och en rektangulär tvärsektion.
- Sjömodul: denna modul är baserad på ovanstående modul. Det innehåller rutiner för att beräkna vattenbalans för en sjö som sträcker sig över många grundvattenceller. Modulen uppdaterar vattennivån i sjön, volymen och arealer som ett resultat av den beräknade vattenbalansen. Detta program är av värde vid prognostisering av effekten hos vattenkroppar vid underjordisk påverkan, t.ex. uppumpning av vatten eller gruvdrift (Council, 1999; Konikow, 2000).

Flödessimuleringar kan kopplas till program för transportmodellering av lösta ämnen (t.ex. MOC3D, RT3D och MT3DMS) och program för partikelspårning (t.ex. MODPATH). Eftersom MODFLOW är erkänd som en standard inom grundvattenmodellering, har många verktyg för analys och bearbetning av indata och resultat utvecklats för användning tillsammans med MODFLOW. Bland de mest kända finner vi Groundwater Vistas, Visual MODFLOW och GMS (Groundwater Modelling System). De flesta av dessa program inkluderar även användandet av GIS i hantering och bearbetning av indata till MODFLOW samt kopplingar till transportmodellerna nämnda ovan (Camp Dresser och McKee, 2001).



Figur 3-6. Visual MODFLOWs gränssnitt – ett exempel från självstudierna i Visual MODFLOW.

3.4.2 MIKE SHE

MIKE SHE är ett integrerat hydrologiskt modellsystem som simulerar hela markdelen av den hydrologiska cykeln. MIKE SHE är därför inte enbart en tredimensionell, numerisk grundvattenmodell. Den inkluderar även numeriska modeller för avdunstning, ytavrinning, omättat flöde, transport av lösliga ämnen, geokemi, jordbruk. MIKE SHE kan även kopplas till vattendragsmodellen MIKE 11 och rörmodellen MOUSE för en fullt numerisk modell för integrerade modellstudier mellan ytvatten/grundvatten och dräneringssystem/grundvatten. MIKE SHE erhåller kontinuerligt utmärkta betyg vid oberoende utvärderingar (http://www.dhisoftware.com/general/Wateres_Overview.htm).

MIKE SHE är mycket mer än bara ett användargränssnitt för en grundvattenmodell. MIKE SHE är en komplett modellmiljö som tillåter användaren att inkludera de hydrologiska processerna i markdelen oberoende av varandra med stor flexibilitet. Användargränssnittet tillåter en snabb etablering av en konceptuell modell – helt oberoende av den numeriska modellen. Den datacentrerade metodiken tillåter användaren att utforska resultatens känslighet i förhållande till modellens struktur. För presentation av resultat finns kraftfulla verktyg för visualisering.

MIKE SHE - egenskaper och fördelar:

- unik – simulerar alla styrande processer i markdelen av den hydrologiska cykeln
- flexibel – tillämpbar på olika skalor, anpassas efter modelleringsprojektets behov

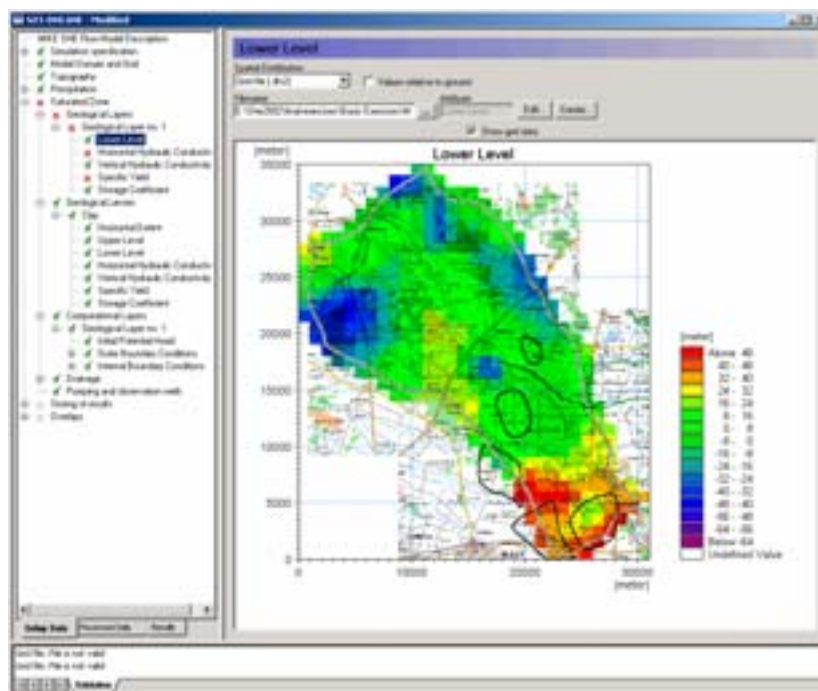
- effektiv – enkla och avancerade processbeskrivningar kan kombineras efter modelleringens behov och tillgänglig beräkningskapacitet
- datahantering – skapar kopplingar till originaldata (inklusive GIS-data) för att minimera datafel och maximera flexibiliteten
- accepterad – använd för hundratals konsult- och forskningstillämpningar världen över.

MIKE SHE inkluderar moduler för:

- simulering av tredimensionellt grundvattenflöde genom finit differensmetod; inklusive dränering till ytvattenkroppar
- simulering av tvådimensionell ytavrinning genom finit differensmetod, för distribuerat vattenflöde i våtmarker och under intensiva regntillfällen
- simulering av fullt dynamiskt och endimensionellt flöde i vattendrag
- simulering av endimensionellt flöde i omättad zon
- simulering av sofistikerad bevattning, applikation styrd av vattenunderskott
- beräkning av avancerad evapotranspiration med hänsynstagande till en distribuerad rotzon i omättad zon
- AUTOCAL – ett generaliserat verktyg för estimering av parametrar och känslighetsanalyser.

Ovanstående moduler är tillgängliga i olika komplexitetsgrader (DHI Water & Environment, Modeling the World of Water, Product Catalog 2004).

Moduler för simulering av transport av lösliga ämnen, inkluderande reaktiva processer, finns tillgängliga för analyser av integrerade problem (ytvatten, omättad zon och grundvatten).



Figur 3-7. MIKE SHEs gränssnitt – ett exempel från självstudierna i MIKE SHE.

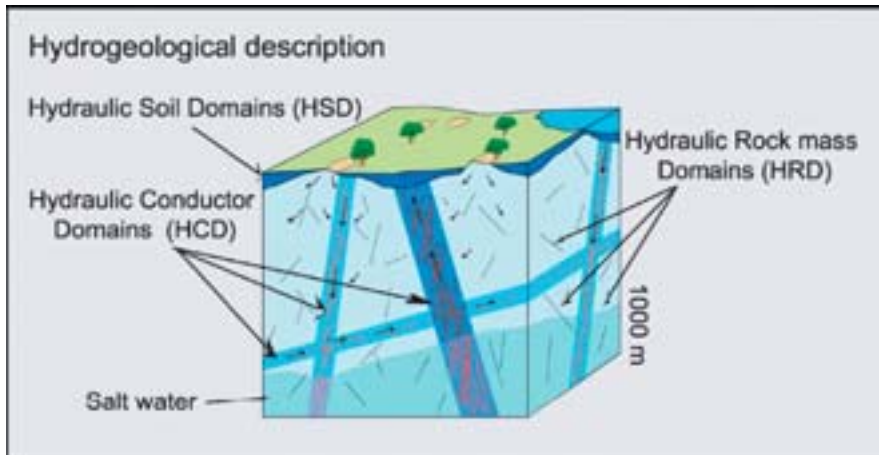
3.4.3 Darcy Tools

DarcyTools är ett datorprogram främst utvecklat för simulering av flöde och salttransport i sprickigt kristallint berg, men även poröst medium, t.ex. jordlager ovan sprucket berg, kan simuleras. DarcyTools är ett generellt program för grundvattenströmning, men tillämpningar som rör analyser av förvar för uttjänt kärnbränsle står i fokus. Detaljerad beskrivning av funktionaliteten i Darcy Tools återfinns i Svensson, et al, 2004. Utvecklingen av Darcy Tools har finansierats av SKB.

Ett antal nya koncept och metoder utgör hörnstenar i DarcyTools. Den kanske mest fundamentala av dessa rör metoden för att representera hydrauliska egenskaper i beräkningsnätet. Metoden bygger på en direkt representation av ett spricknätverk, som kan innefatta upp till en miljon sprickor. Tanken är att denna metod ska ge en god beskrivning av bergets anisotropi och sprickors konnektivitet.

En väsentlig skillnad mellan Darcy Tools och de två andra modellsystemen är också att Darcy Tools kan ta hänsyn till densitetsberoende grundvattenströmning, t.ex. till följd av mer salthaltigt havsvatten.

Darcy Tools kan också ta hänsyn till diffusivt utbyte av lösta ämnen (t.ex. salt) mellan strömmande vatten och stagnanta områden. Denna process kan vara betydelsefull i en del fall, men försummas ofta i flertalet modellsystem. MIKE SHE kan dock till viss del ta hänsyn till detta genom diffusion mellan en mobil och en immobil fas.



Figur 3-8. Typiska hydrogeologiska enheter vid modellering med Darcy Tools.

4 Praktikfall

En riskbedömning gällande grundvatten ska användas för att bedöma om en förorening i jord och/eller grundvatten ger ett oacceptabelt bidrag av föroreningar till grundvattenresursen. Som grund till en riskbedömning finns det ett antal fördefinierade kriterier gällande grundvattenkvalitet. Dessa ska normalt uppfyllas i hela grundvattenmiljön (Miljøstyrelsen, 1998). Det föreslås att riskbedömningen utförs under flera steg. Initiellt görs en enkel bedömning. Om denna bedömning inte tillräckligt kan påvisa avsaknaden av risker så utförs mer avancerade beräkningar. I dessa beräkningar kan det ingå fokus av adsorption, dispersion och nedbrytning av föroreningar. Bedömningen kring grundvattnets påverkan används dessutom till att utföra en riskbedömning i förhållande till recipienter (Miljøstyrelsen, 1998).

Sverige eller Danmark saknar traditioner gällande användning av numeriska beräkningsmodeller i samband med riskbedömningar. Den primära orsaken är att vägledningen inom området inte påpekar detta. Den danska miljöstyrelse påpekar, enligt ovan, att det genomförs en enkel bedömning och först därefter mer avancerade modellberäkningar utan att gå i detalj kring vad detta beräkningsmässigt innebär. Det finns ofta inte en ekonomisk grund för att genomföra avancerade modellberäkningar, även om det i en senare fas visar sig kunna spara pengar i förbindelse med åtgärder för att hindra ytterligare spridning av föroreningar.

Få exempel finns därför på praktiska projekt. Två områden och problemställningar där modellering har tillämpats vid riskbedömning presenteras i följande kapitel. Modellberäkningarna har genomförts med olika verktyg och med varierande komplexitet för att kunna värdera behoven av detaljeringsgrad, effekter av förenklingar samt verktygens förmåga och användbarhet. Detta beskrivs närmre i kapitel 5.

Ett exempel är taget ifrån Kristianstad gällande riskbedömning av en avfallsdeponi och ett ifrån Forsmark gällande risker kopplade till djupförvaring av använt kärnbränsle. Dessa exempel har valts utifrån önskan att inkludera ett område med sedimentära avlagringar och ett område med kristallin berggrund, då båda dessa typer av geologi återfinns i Sverige. Utgående från de geohydrologiska förhållandena i Forsmark, har dessutom en tänkt problemställning konstruerats, med potentiell förorenings-spridning från en yttlig deponi mot en grundvattentäkt för ett mindre samhälle.

Områden och problemställningar beskrivs i följande kapitel.

4.1 Härlövs Ängar i Kristianstad

4.1.1 Bakgrund och problemställning

Mitt emot Kristianstads centrum, på andra sidan Helge å, ligger ”Härlövs ängar”, se figur 4-1 nedan. Området avgränsas i öster och norr av Helge å, i söder av stadsdelen Vilan/Långebro och i väster av bebyggelsen utmed Lillövägen. Området är

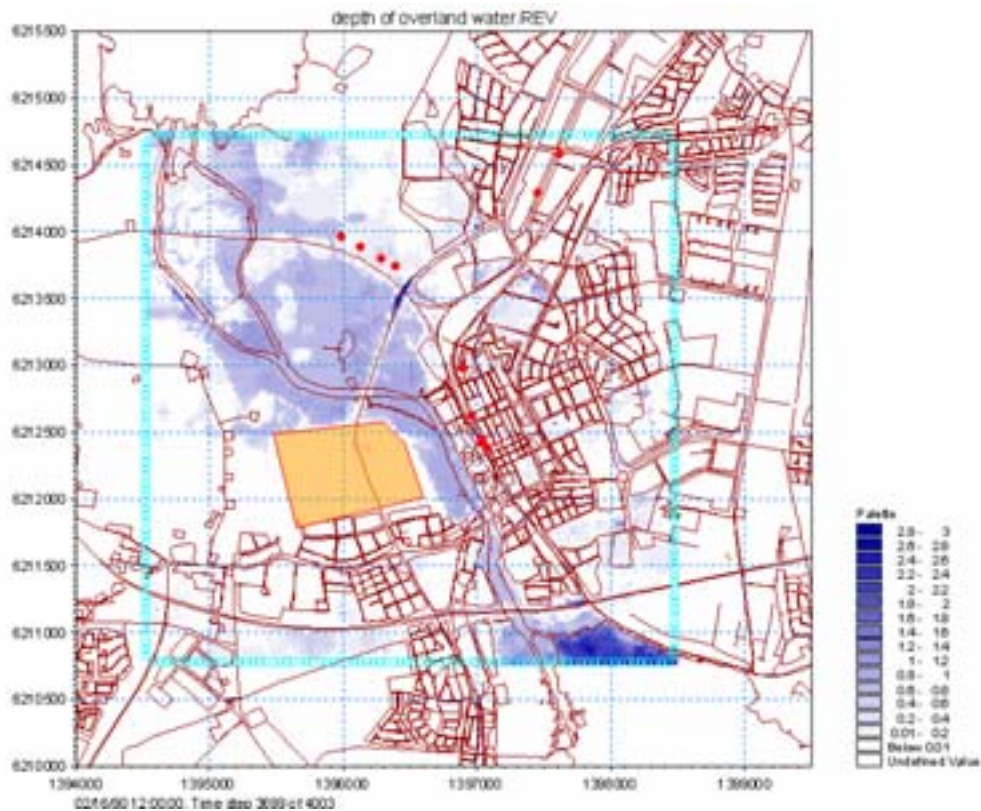
till större delen taget i anspråk för deponering av sopor vilket inleddes på 1950-talet och avslutades 2002. Den östra delen (öster om trafikleden) har inte använts sedan mitten av 1970-talet med undantag för anläggandet av ett dag- och lakvattensystem i början av 1990-talet. Området ligger i direkt anslutning till Helge å-området som är ett Natura 2000-område, våtmarksområde enligt Ramsarkonventionen, riksintresse för naturvård, naturreservatet Isternäset m m.



Figur 4-1. Flygfoto över deponin (inramat område till höger) vid Härlövs Ängar i Kristianstad.

På den västra delen pågår idag arbete med schaktmassor, och under de närmaste 5-10 åren kommer detta område att behöva täckas. Det troliga är att ett lertäcke ska läggas på och däröver ett par andra skikt, överlagrat av ett minst en meter tjockt skyddsskikt av schaktmassor. Cirka 6 ha är redan täckta på ungefär detta sätt. Övriga 28 ha är bara delvis täckta. Kommunens åsikt är att detta område ska utformas ganska kuperat, även i mindre skala, för att säkra en god ytavrinning. För den östra delen på cirka 22 ha finns det inga uttalade myndighetskrav, eftersom den formellt sett är avslutad.

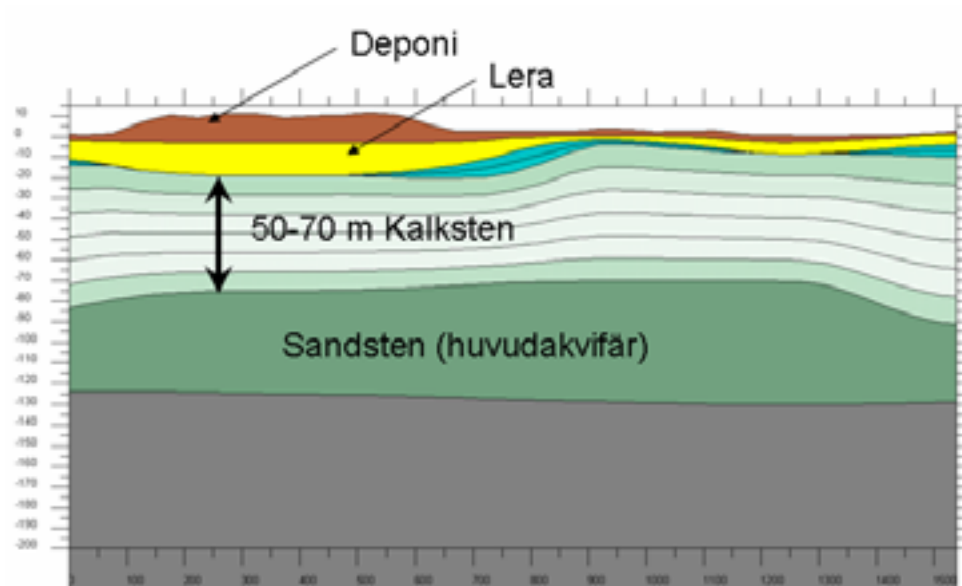
Vattennivån i Helgeå fluktuerar ganska kraftigt under året och har ett antal gånger stigit till över +2 möh. Vattenytan når då ända fram till deponiområdet. I figur 4-2 visas beräknad vattenyta i februari 1990, då vattennivån låg på ca +1.1 möh. Speciellt den östra delen av deponin är utsatt för höga nivåer i Helgeå. En stor andel lakvatten kommer från detta område, varför kommunen nyligen har låtit anlägga en palissad utmed Helge å. Fortfarande bildas mycket lakvatten här, varför ytterligare tätning troligen behöver ske. De befintliga dag- och lakvattendikena, som skär sönder området yta, måste bevaras i sin funktion, men kan troligen täckas över på ett lämpligt sätt. Tätning och lakvattenbildning är speciellt viktiga frågor med tanke på att de kommunala vattentäkterna är belägna 500-1000 meter från deponiområdena.



Figur 4-2. Beräknad vattenyta vid högt vattenstånd i Helgeå (feb 1990 med +1.1 möh).

4.1.2 Geohydrologi

Deponimassorna underlagras av ett lerskikt, som under den västra delen är relativt mäktigt (10-15m), men under den östra delen är betydligt tunnare. På sina ställen, i den nordöstra delen, är lertäcket så tunt att det möjligen till och med saknas inom begränsade områden. Lertäcket underlagras delvis av morän, men i övrigt av en mäktig kalkstensformation på ca 50-70m. Under denna finns huvudakvifären, bestående av den mycket vattenförande sk glaukonitsandstenen, där bl.a. kommunen tar sitt vatten. I figur 4-3 visas en väst-östlig profil genom deponin.



Figur 4-3. Geologisk profil i väst-östlig riktning genom deponin.

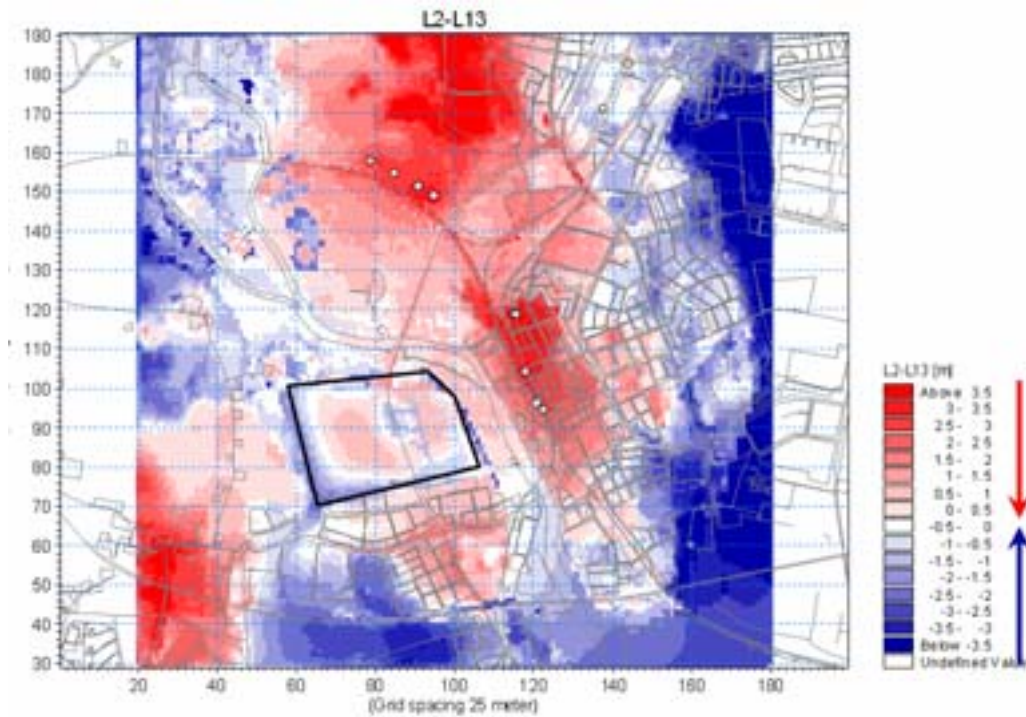
Sandstenen har sina naturliga inströmningsområden längs med ränderna i väster. Området längs Helgeå och stora delar av Kristianstadsslätten är naturliga utäckageområden från sandstenen, dvs med en uppåtriktad grundvattenströmning. Beroende på de större grundvattenuttag (kommunala, industrier och för bevattning) som nu sker inom vissa delar på slätten, är grundvattenströmningen nu ombytt, med ett nedåtgående inläckage från grundvatten i de ytliga jordlagren. Så är fallet inom stora delar av centralorten och kring deponin. I figur 4-4 nedan visas beräknad tryckdifferens mellan jordlagren och sandstenen. Inom de röda områdena sker en nedåtgående grundvattenströmning.

4.1.3 Numerisk modell

Modellsystemet MIKE SHE har använts för beskrivning av detta område. Modellområdet täcker en yta av ca 16 km², se inramning i figur 4-2. Modellen har i grundutformningen en horisontella upplösning på 25 m och är indelad i 14 vertikala beräkningslager, varav 6 beskriver olika jordlager, 6 beskriver kalkstenen, 1 beskriver sandstenen och 1 beskriver det underliggande urberget.

Randvillkoren för denna modell hämtas från simuleringar med en regional geohydrologisk modell som finns uppsatt för hela Kristianstadsslätten i modellsystemet MIKE SHE (Kristianstads kommun, 2000), se figur 4-5. Den regionala modellen har en horisontell upplösning på 500 m och är indelad i 5 vertikala beräkningslager, varav 2 är jordlager och resterande är olika berglager.

Beräknade tryck och grundvattennivåer inom och omkring deponiområdet har stämts av mot mätningar. Likaså har beräknade lakvattenmängder stämts av mot förekommande flödesmätningar.



Figur 4-4. Tryckdifferens mellan jordlager och sandstensakvifären. Svart ram visar deponis område och vita prickar visar läge för kommunens grundvattenbrunnar. Inom röda områden strömmar grundvattnet nedåt.



Figur 4-5. Den regionala modellens utbredning och området som nu modelleras omkring deponin (inom svart ram).

4.2 Djupförvar av kärnbränsle i Forsmark

4.2.1 Bakgrund och problemställning

Kärnavfall i Sverige hanteras av Svensk Kärnbränslehantering AB, SKB. Inom SKB:s program för förvaltning av använt kärnbränsle, finns ett koncept gällande den slutliga förvaringen, där använt kärnbränsle kommer att placeras i en gjutjärnsinsats inuti kopparkapslar. Dessa deponeras sedan i ett slutförvar i mättat granitiskt berg och på ett ungefärligt djup av 500 m. Kapslarna omsluts slutligen av bentonitlera.

När SKB söker tillstånd för att få bygga inkapslingsanläggningen och djupförvaret kommer det att krävas en analys med uppgift att utreda den långsiktiga säkerheten för djupförvaret (SKB, 2004b). Utgångspunkten i säkerhetsanalysen blir att noggrant beskriva hur djupförvaret för använt kärnbränsle ser ut när det har byggts och förslutits. Därefter kommer förhållandena i förvaret att förändras. Många förlopp är oundvikliga och vissa har samband med hur grundvattnet strömmar. Matematiska modeller blir ett ovärderligt verktyg i beskrivningen av förvaret idag och tänkbara scenarier i framtiden.

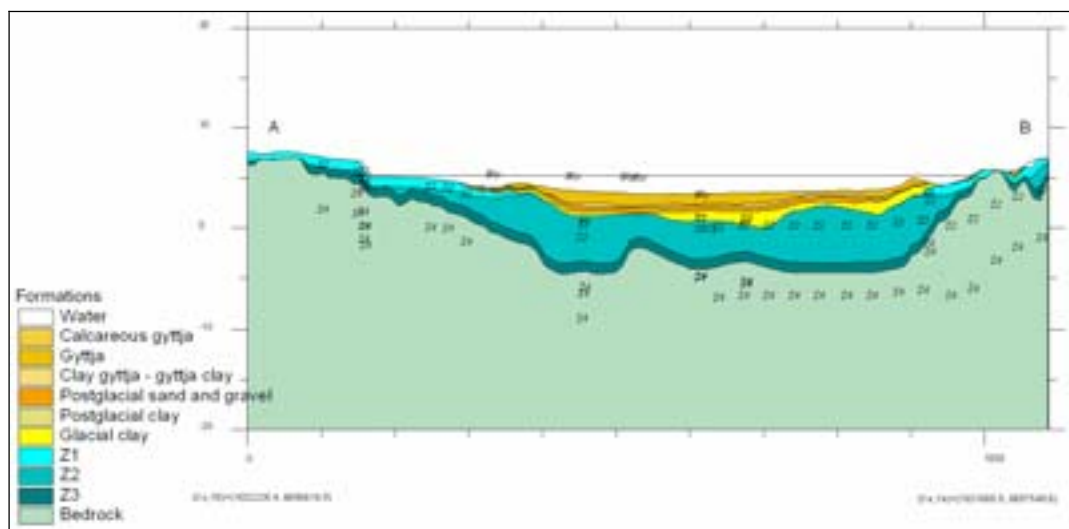
SKB ägnar sig för närvarande åt mark/platsundersökningar för ett möjligt djupförvar i bl a Forsmark i Östhammar kommun. Det aktuella området visas i figur 4-6.



Figur 4-6. Område i Forsmark för möjligt djupförvar av kärnbränsleavfall.

4.2.2 Geohydrologi

Forsmarksområdet är ett relativt flackt kustområde, med ett flertal sjöar och våtmarksområden. Jordlagren består huvudsakligen av morän, som varierar stort i mäktighet. Den ytliga moränen är sandig och relativt genomsläpplig. I kontakten med det underliggande urberget är moränen också mer genomsläpplig än den mellanliggande, som är lite tätare. Under sjöarna återfinns yngre sediment, typiskt bestående av, ovanifrån, gyttja, sand och lera. I figur 4-7 visas en typisk profil för jordlagren och urberget under en sjö.



Figur 4-7. Geologisk profil genom Eckarfjärden i Forsmarksområdet.

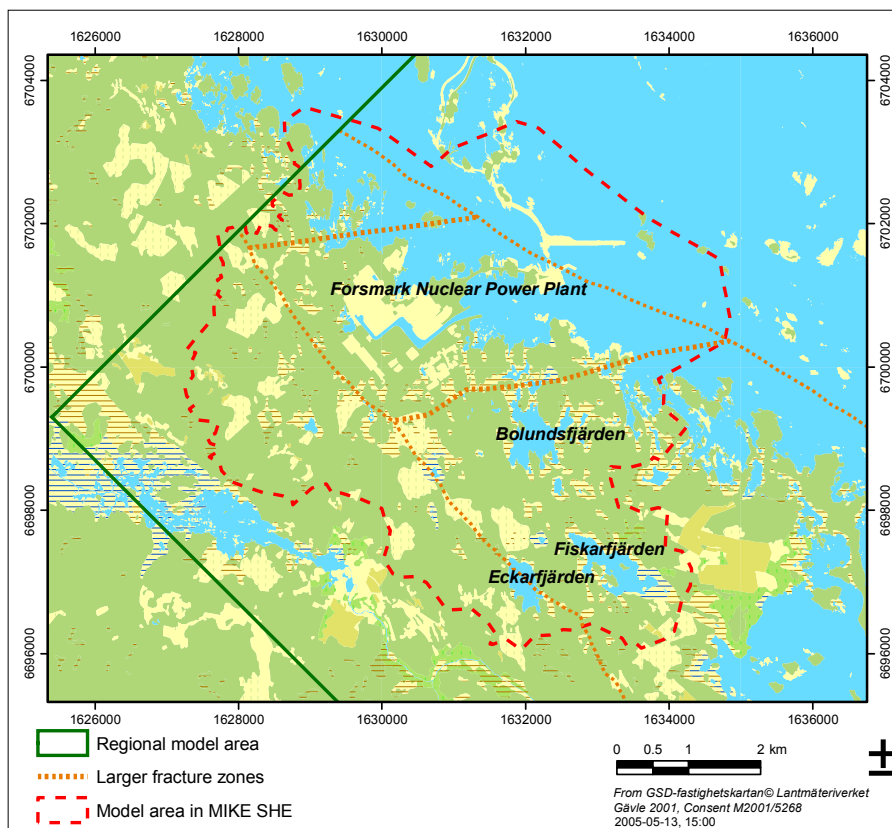
Grundvattenströmningen i berget är huvudsakligen uppåtgående ut mot havet. Strömningen är koncentrerad till ett antal större sprickzoner, se figur 4-8 nedan. Grundvattenytan ligger mycket nära markytan inom stora delar av området. Omkring sjöarna och våtmarksområdena återfinns svaga utströmningsområden, som under högfördessituationer kan vända till inströmningsområden.

4.2.3 Numerisk modell

SKB har en omfattande verksamhet kring geohydrologisk modellering, dels för s.k. platsmodellering, dels som underlag för miljöriskbedömning. Det hydrologiska modellsystemet MIKE SHE har använts för att främst beskriva strömning och transport i de övre berg- och jordlagren, samt kontakten med förekommande ytvatten. I Forsmark har modellering med MIKE SHE genomförts i ett regionalt avrinningsområde med en storlek på ca 38 km², se figur 4-8.

Den modellering av området som gjorts hittills har inte kunnat kalibreras mot platsspecifika data. Huvudsakligen beror detta på att mätserier inte förrän nu är tillräckligt långa för att det ska vara meningsfullt. Den befintliga MIKE SHE modellen är baserad på data enligt ”datafrysen” Forsmark 1.2 (från den 31 juli 2004). Kring årsskiftet 2006/2007 kommer ny data att arbetas in i modellen och

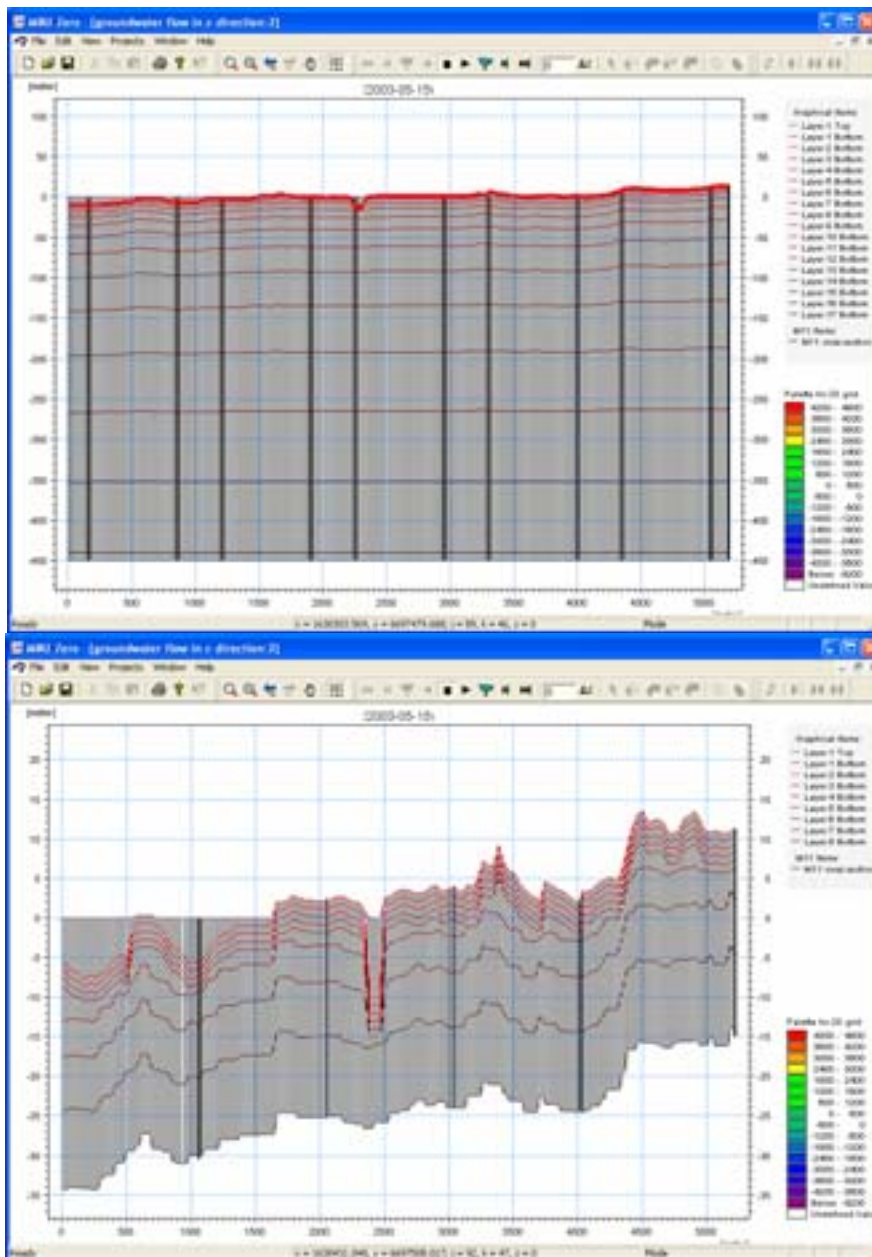
kalibrering kommer att ske under våren 2007. Innan arbetet med den nya modellversionen påbörjas, kommer lämplig kalibreringsmetodik och kritiska modellparametrar utvärderas under hösten 2006.



Figur 4-8. Modellområde i MIKESHE (röd linje).

Den geologiska modellen består av 3 lager för kvartära avlagringar och 8 lager för urberget (SKB, 2005). Sjösedimenten har förenklats till tre linsformationer som komplement till de geologiska lagren. Den hydrauliska beskrivningen av urberget är tagen från modellering med modellverktyget DarcyTools (SKB, 2004a). I den modell som använts i detta projekt, har dessutom data från ytterligare 4 djupare liggande urbergslager lagts in (enligt modell i DarcyTools), så att modellen sträcker sig ner till nivån -450 möh.

Den horisontella numeriska upplösningen är 40 m, medan den vertikala upplösningen varierar med djupet, med mäktigare lager på djupet, se figur 4-9. Totalt används 17 beräkningslager, varav det nedersta är ett tunnare randlager där en tryckrand ansatts enligt den regionala modelleringen med DarcyTools. Denna tryckrand skapar inflöden (uppåtriktade) och utflöden (nedåtriktade) enligt de regionala beräkningarna med DarcyTools.



Figur 4-9. Vertikala beräkningslager i modellen (MIKE SHE) över Forsmark. Den övre bilden täcker hela djupet, medan den nedre täcker in jordlager och de fyra översta berglagren.

Ytvattendelaren för området (se figure 4-8) antas överensstämma med grundvattendelaren. Därför har en tät rand ansatts runt modellen, förutom i havet, där en tryckrand ansatts. Denna är satt till noll över hela vattenytan i det översta lagret och längs med randen ute i havet i de djupare lagren. Modellranden har dragits så långt ut i havet så att trycket bedömts vara noll även på djupet (enligt modellering med DarcyTools). Utbredningen av modellen i DarcyTools visas i figur 4-10.

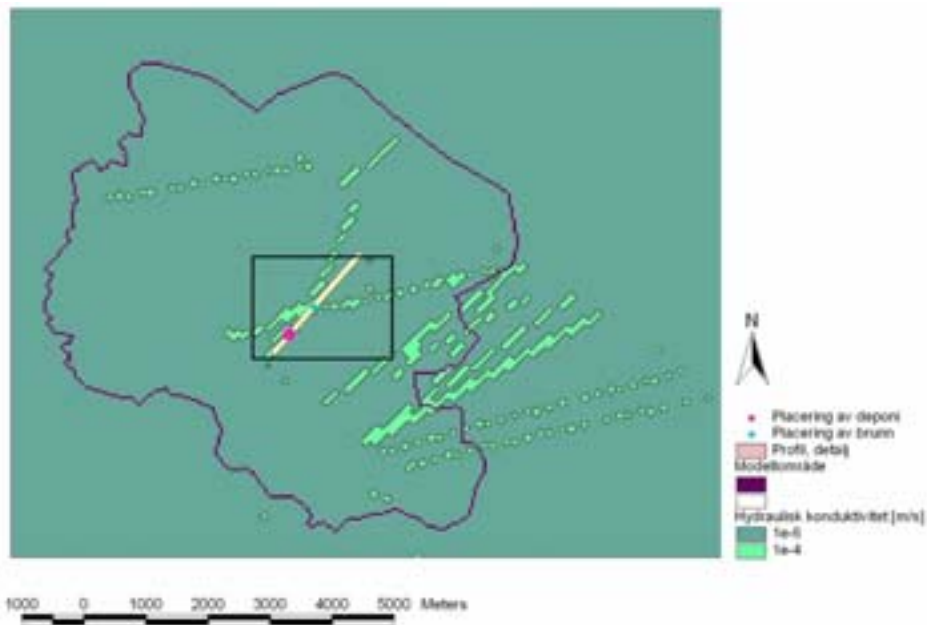


Figur 4-10. Regional modell i DarcyTools (röd) och modell i MIKESHE (svart).

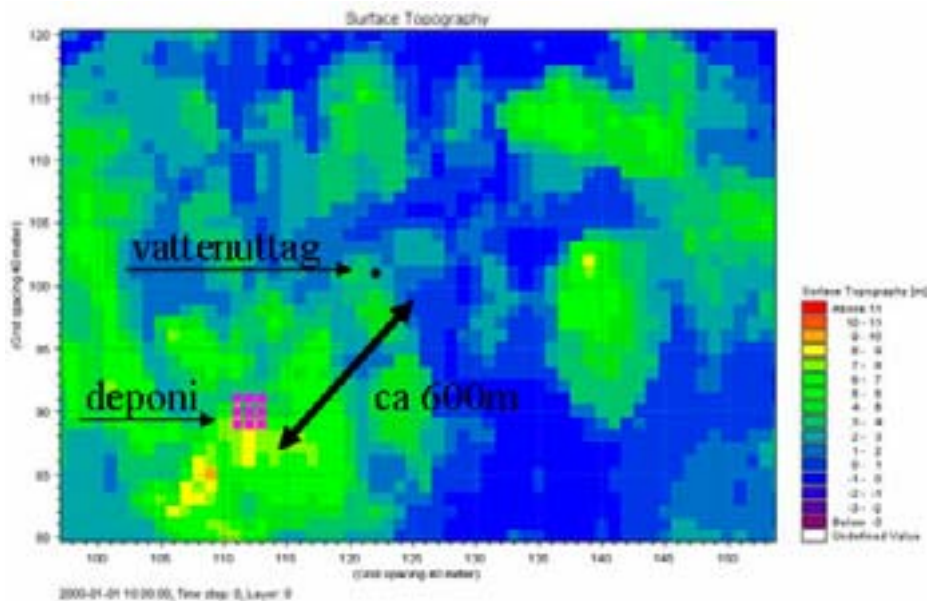
4.3 Ytlig deponi i ett morän/urbergsområde

4.3.1 Bakgrund och problemställning

Detta är inte ett verkligt, utan ett tänkt fall, som ska illustrera en ganska vanlig problemställning, en mindre ytdeponi med en relativt närliggande bergborrad vattenbrunn. De geohydrologiska grundförutsättningarna är tagna från forsmarksområdet, som beskrivits i kapitel 4.2. I figur 4-11 visas med inramning vilken del av Forsmarksområdet som studerats. I figur 4-12 visas dels placeringen av den tänkta deponin inom området, dels var den tänkta vattenbrunnen är placerad, ca 600 m nordost om deponin. Uttagsflödet i vattenbrunnen är satt till ca 400 m³/dygn (motsvarande ett litet samhälle på ca 2500 invånare).



Figur 4-11. Det studerade områdets läge i Forsmarksmodellen.

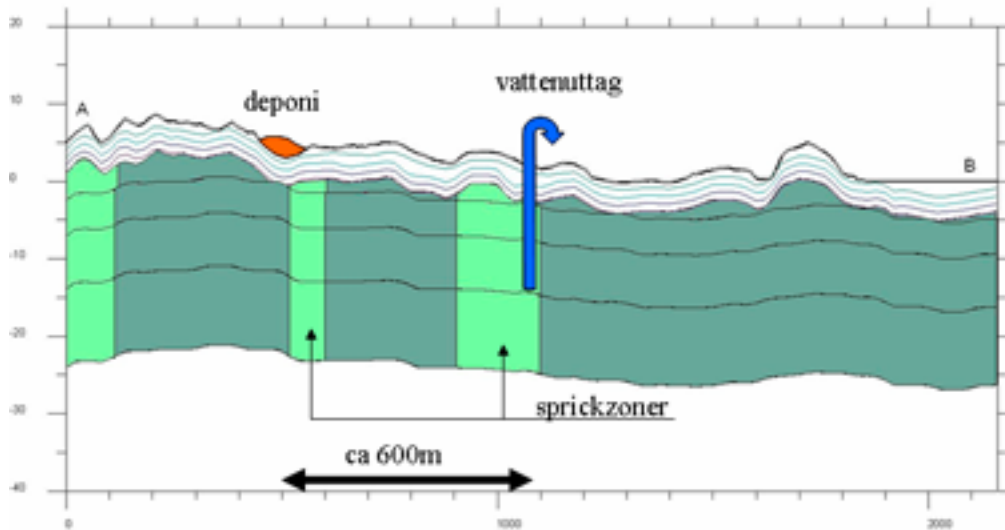


Figur 4-12. Topografi för studerat område med placering av den tänkta deponin och vattenbrunnen.

4.3.2 Geohydrologi

De geohydrologiska förutsättningarna är tagna från Forsmarksområdet, som i det aktuella området kan sammanfattas med ett relativt tunt moränlager på ca 4 m, ovanpå ett urberg med kraftiga sprickzoner, se figur 4-13. Sprickzonerna har förstärkts något i förhållande till de verkliga förutsättningarna i forsmarksområdet. Konduktiviteten i sprickzonerna är här satt till $1e-4$ m/s i både horisontell och

vertikal riktning. Konduktiviteten för berget i övrigt är satt till $1e-6$ m/s, också samma i båda riktningarna.



Figur 4-13. Längdprofil för en linje genom den tänkta deponin och vattenbrunnen.

4.3.3 Numerisk modell

Samma horisontella och vertikala numeriska upplösning som för Forsmarksmodellen har använts, dock har endast de 8 översta beräkningslagren inkluderats vid beräkningen. Berget under dessa lager antas vara tätt.

5 Genomförda beräkningar

Vid beräkningarna har metodiken för att beskriva följande aspekter varierats på olika sätt:

- Spridningsförloppet
- Yhydrologin (dvs det övre randvillkoret för grundvattenzonen)
- Numerisk upplösning

Följande varianter och olika komplexitetsnivå för beskrivning av spridningsförloppet har studerats i en eller annan omfattning för de olika problemställningarna:

- Transport via advektion (sk partikelbanor)
- Transport via advektion och dispersion
- Transport via advektion och dispersion, inklusive hänsyn till sorption
- Transport via advektion och dispersion, inklusive hänsyn till sorption och nedbrytning

Följande varianter för beskrivning av yhydrologin har utvärderats i olika omfattning för olika tillämpningarna:

- Fast grundvattenyta
- Konstant infiltration
- Full yhydrologi (inkl avdunstning, ytavrinning och omättad zon)

Slutligen har det horisontella och vertikala beräkningsnätet varierats för ett av områdena.

Detaljer kring hur ovanstående aspekter varierats i de tre olika tillämpningarna beskrivs nedan. Både MIKE SHE och Visual MODFLOW Pro har använts i olika omfattning. Dessutom har resultat från beräkningar med DarcyTools inkluderats i ett av fallen.

5.1 Härlövs Ängar i Kristianstad

De beräkningsfall som studerats vid denna tillämpning beskrivs i tabell 5-1. I samtliga fall har MIKE SHE använts. Beräkningarna inkluderar olika komplexitet avseende både spridningsförlopp, yhydrologi och numerisk diskretisering. Denna tillämpning är dock den enda där den numeriska diskretiseringen varierats.

Tabell 5-1. Beräkningsfall för deponin Härlövs Ängar i Kristianstad.

Nr	Numerisk diskretisering	Ythydrologi	Spridningsprocesser
K1	25m gridnät och 14 lager	Konstant infiltration med stationärt strömningsfält	Advektion/dispersion i grundvattenzonen
K2a	25m gridnät och 14 lager	Full ythydrologi med dynamiskt strömningsfält för 1 år	Advektion/dispersion i grundvattenzonen
K2b	25m gridnät och 14 lager	Full ythydrologi med dynamiskt strömningsfält för 10 år	Advektion/dispersion i grundvattenzonen
K3	25m gridnät och 14 lager	Full ythydrologi med dynamiskt strömningsfält för 10 år	Advektion/dispersion i grundvattenzonen och för ytvatten
K4a	25m gridnät och 14 lager	Full ythydrologi med dynamiskt strömningsfält för 10 år	Advektion/dispersion i grundvattenzonen, inklusive sorption
K4b	25m gridnät och 14 lager	Full ythydrologi med dynamiskt strömningsfält för 10 år	Advektion/dispersion i grundvattenzonen, inklusive sorption och nedbrytning
K5	50m gridnät och 7 lager	Konstant infiltration med stationärt strömningsfält	Advektion/dispersion i grundvattenzonen
K6	25m gridnät och 21 lager	Konstant infiltration med stationärt strömningsfält	Advektion/dispersion i grundvattenzonen

Vid fallen med konstant infiltration har ett värde på 175 mm/år använts för hela området, utom inom tätorten där infiltrationen reducerats med avseende på bedömd hårdgjord yta, där regnavrinningen avleds direkt till Helgeå. Detta värde motsvarar ca ett medelvärde för de 10 år som studerats i flera av de andra beräkningsfallen. Vid fallet med konstant infiltration har också en dräneringsfunktion lagts in strax under markytan, för att undgå orimliga grundvattentryck i det övre beräkningslagret.

Dispersionen har beskrivits som isotrop, med 2.0m och 0.1m för longitudinell respektive transversal dispersivitet. Detta är mycket små dispersiviteter, som understiger storleken på det numeriska beräkningsnätet. Den numeriska dispersionen torde därför vara avgörande jämfört med inverkan av angivna dispersiviteter.

I de fall sorptionsprocesser aktiverats, har denna beskrivits med enkel linjär equilibrium teori, utan hysteresis, med ett K_d på $2,2e-6 \text{ m}^3/\text{g}$ för jordlagren och $5e-8 \text{ m}^3/\text{g}$ för berglagren. Med typiska effektiva porositeter för jord- och berglagren, ger detta ett retardationstal (R) på 70 för jordlagren och 2 för de sedimentära berglagren.

Vid beräkningsfallet med nedbrytning har en enklare konceptuell beskrivning baserat på angiven halveringstid använts. Halveringstiderna har här (förenklat) ansatts till ca 2 år för både jord- och berglagren. Denna halveringstid överensstämmer ungefär med värden för ämnet benzen under mättade (anaeroba) förhållanden.

Vid fallen med olika diskretisering har en vertikala lagerindelning enligt tabell 5-2 använts.

Tabell 5-2. Vertikal lagerindelning vid de olika beräkningsfallen

Geologiskt lager	Beräkningslager för de olika beräkningsfallen		
	K6	K1 – K4	K5
Torv/deponi	1	1	1
Sand/övre lera	2	2	2
Lera	3	3	
	4		
Grus/övre morän	5	4	3
Morän	6	5	
	7	6	
Kalksten	8	7	4
	9		
	10	8	
	11		
	12	9	
	13		
	14	10	5
	15		
	16		
	17	11	
18			
19	12		
Sandsten	20	13	6
Urberg	21	14	7

Föroreningskällan, bestående av lakvatten inom deponiområdet, har beskrivits som en infiltrationskälla till grundvattenzonen. Detta innebär att infiltrerat vatten inom deponiområdet erhåller en viss angiven källkoncentration (1000 g/m³).

5.2 Djupförvar av kärnbränsle i Forsmark

De beräkningsfall som studerats vid denna tillämpning beskrivs i tabell 5-3. Beräkningarna inkluderar olika komplexitet avseende spridningsförlopp och ythydrologi. Både MIKE SHE och Visual MODFLOW Pro har använts, vilket också angivits i tabellen nedan. Ett av de studerade fallen baseras dock på resultat från simulering med DarcyTools.

Vid fallet med fast grundvattenyta har grundvattentrycket i det översta beräkningslagret lagts fast i nivå med markytan, utom i havet där trycket angivits till 0 möh. Vid fallet med konstant infiltration har ett schablonvärde på 74 mm/år använts för hela området. I detta fall har också en dräneringsfunktion lagts in strax under markytan, för att undgå orimliga grundvattentryck i det övre beräkningslagret.

Tabell 5-3. Beräkningsfall för djupförvar av kärnbränsle i Forsmark.

Nr	Modellsystem	Yhydrologi	Spridningsprocesser	Källtyp
F1	DarcyTools	Fast grundvattenyta	Advektion (partikelbanor) i grundvattenzonen	1 partikel/cell, inom ett tänkt förvarsområde
F2a	MIKE SHE	Fast grundvattenyta	Advektion (partikelbanor) i grundvattenzonen	1 partikel/cell, inom ett tänkt förvarsområde
F2b	MIKE SHE	Fast grundvattenyta	Advektion (partikelbanor) i grundvattenzonen	1 partikel/cell, i hela botten
F3	MODFLOW	Konstant infiltration med stationärt strömningsfält	Advektion (partikelbanor) i grundvattenzonen	1 partikel/cell, i hela botten
F4	MIKE SHE	Full yhydrologi med dynamiskt strömningsfält för 1 år	Advektion (partikelbanor) i grundvattenzonen	1 partikel/cell, i hela botten
F5a	MIKE SHE	Full yhydrologi med dynamiskt strömningsfält för 1 år	Advektion/dispersion i grundvattenzonen	1 gram/cell, i hela botten initialt
F5b	MIKE SHE	Full yhydrologi med dynamiskt strömningsfält för 1 år	Advektion/dispersion i grundvattenzonen	1 gram/m ³ , i hela botten konstant i tiden
F6	MIKE SHE	Full yhydrologi med dynamiskt strömningsfält för 1 år	Advektion/dispersion i grundvattenzonen, inklusive sorption	1 gram/m ³ , i hela botten konstant i tiden

Dispersionen har beskrivits som isotrop, med 0.2m och 0.01m för longitudinell respektive transversal dispersivitet. Detta är mycket små dispersiviteter. Ännu mindre än i fallet med deponin i Kristianstad. Även här torde alltså den numeriska dispersionen vara avgörande jämfört med inverkan av angivna dispersiviteter.

Vid beräkningsfallet med sorptionsprocesser aktiverade, har denna beskrivits med enkel linjär equilibrium teori, utan hysteres, med ett Kd på 1e-7 m³/g för jordlagren och 1e-10 m³/g för berglagren. Med typiska effektiva porositeter för jord- och berglagren, ger detta ett retardationstal (R) på ca 4 för jordlagren och 2 för berglagren.

Spridningsberäkningarna har genomförts baserat på en tänkt källa i botten av modellen, på nivån -400 möh. Vid beräkningsfall F1 och F2a har denna källa begränsats till ett visst rektangulärt område motsvarande ett tänkt förvarsområde. Vid övriga beräkningsfall täcker källan hela modellområdet. Källan har beskrivits på tre olika sätt, beroende på använd spridningsmodell och vilka jämförelser beräkningarna syftar till:

- En initial källkoncentration motsvarande 1 partikel per beräkningscell läggs in i botten av modellen (fall F1 – F4).
- En initial källkoncentration motsvarande 1 g per beräkningscell läggs in i botten av modellen (fall F5a).
- En i tiden konstant källkoncentration på 1 g/m³ läggs in i botten av modellen (fall F5b – F6).

5.3 Ytlig deponi i ett morän/urbergsområde

De beräkningsfall som studerats vid denna tillämpning beskrivs i tabell 5-4. Beräkningarna inkluderar framförallt jämförelse av spridningsberäkning med de två modellsystemen MIKE SHE och Visual MODFLOW Pro. Dessutom görs jämförelser av beräkningar där den fullständiga beskrivningen av sprickzoner och andra inhomogeniteter i berget förenklas kraftigt till ett homogent berg.

Vid fallet med konstant infiltration har ett schablonvärde på 74 mm/år använts för hela området.

Tabell 5-4. Beräkningsfall för ytlig deponi i ett morän/urbergsområde.

Nr	Modellsystem	Yhydrologi	Spridningsprocesser	Bergbeskrivning
D1	MIKE SHE	Full yhydrologi med dynamiskt strömningsfält för 1 år	Advektion/dispersion i grundvattenzonen	Inklusive sprickzoner
D2	MODFLOW	Konstant infiltration med stationärt strömningsfält	Advektion/dispersion i grundvattenzonen	Inklusive sprickzoner
D3	MODFLOW	Konstant infiltration med stationärt strömningsfält	Advektion/dispersion i grundvattenzonen	Homogent berg utan sprickzoner

Dispersionen har beskrivits på samma sätt som i den andra tillämpningen med modellen för Forsmark, se kapitel 5.2.

Föroreningskällan, bestående av lakvatten inom deponiområdet, har beskrivits som en infiltrationskälla till grundvattenzonen. Detta innebär att infiltrerat vatten inom deponiområdet erhåller en viss angiven källkoncentration (1 g/m³).

6 Beräkningsresultat

6.1 Härlövs Ängar i Kristianstad

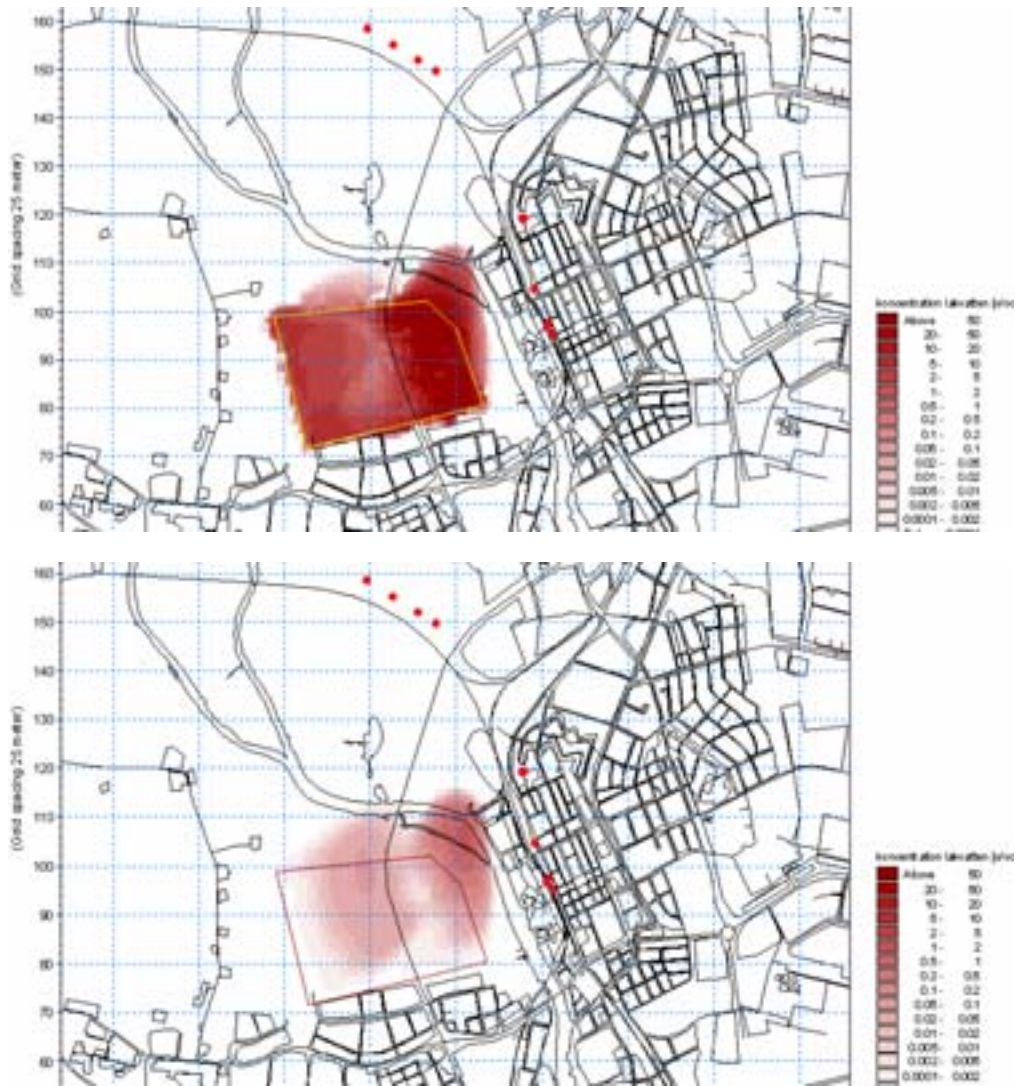
6.1.1 Övergripande resultat

I figur 6-1 visas dagens förväntade utbredning av föroreningar i de olika geologiska lagren. Det syns här att den horisontella, och även den vertikala, transporten av föroreningar är begränsad i de geologiska lager där det inte sker något vattenuttag. Inom vissa delar av deponin, bl.a. längs den västra och södra kanten, och i mitten, är det en uppåtriktad gradient från de djupare lagren. Av naturliga skäl sker ingen neråtgående föroreningstransport här.

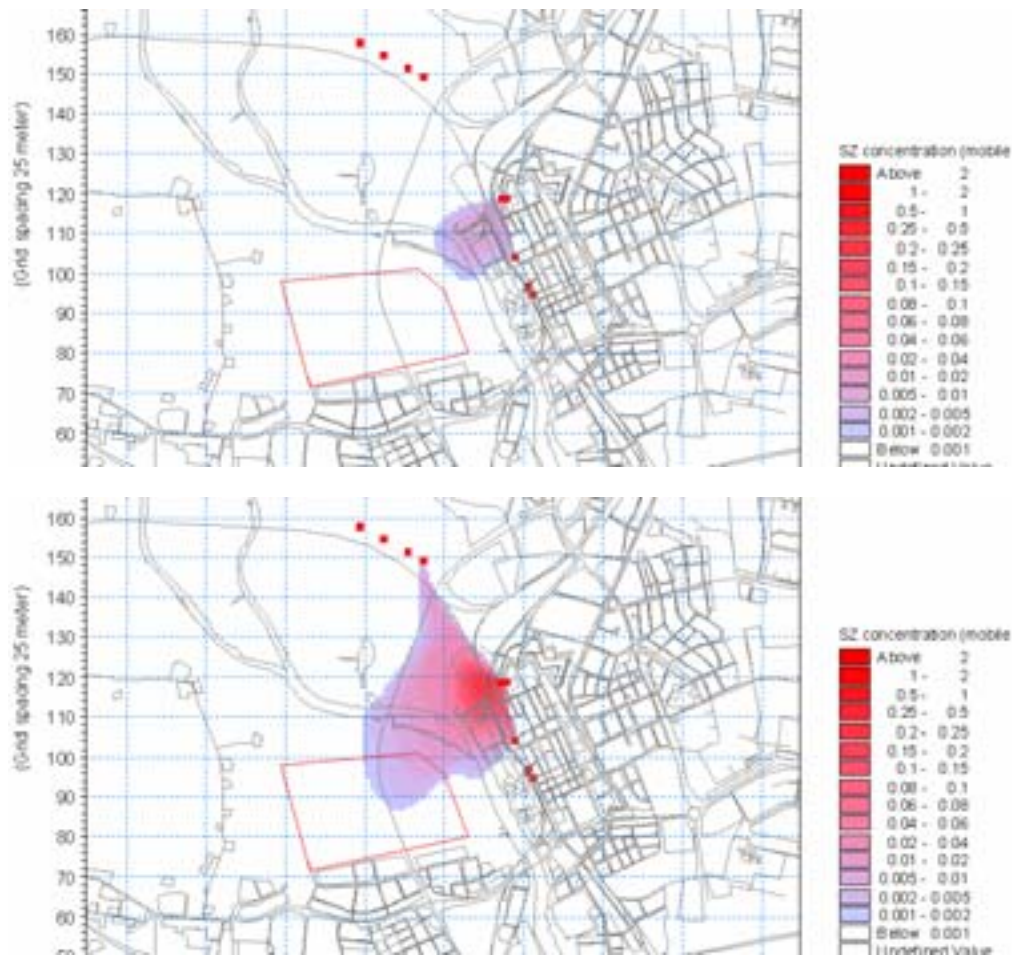
Däremot är föroreningsspridningen betydligt större i glaukonitsandstenen. Beroende på stora vattenuttag i detta lager har en avsänkningstratt skapats, som får föroreningen att spridas snabbare, och då mot brunnsfälten nordväst om Kristianstad, där de största uttagen sker.

Runt deponin finns ett dräneringssystem som samlar upp huvuddelen av det lakvatten som bildas, men trots detta sker en viss transport nedåt och ut från området till följd av de rådande gradienterna. Helgeå fungerar då som en kraftig dränering i området och mottar den större delen av den förorening som inte samlas upp av lakvattendikena. En mindre del rör sig dock nedåt och i nord-östlig riktning under Helgeå, och utgör därmed en potentiell risk för Kristianstads vattenförsörjning.

I figur 6-2 visas den förväntade utbredningen i glaukonitsandstenen om 60 år. Brunnsfältet nordväst om Kristianstad förväntas således kunna påverkas av föroreningar om ca 60 år, om inte förhållandena förändras, medan brunnsfältet i centrum, nära Kanalhuset, redan nu inom snar framtid kan bli påverkat av lakvatten.

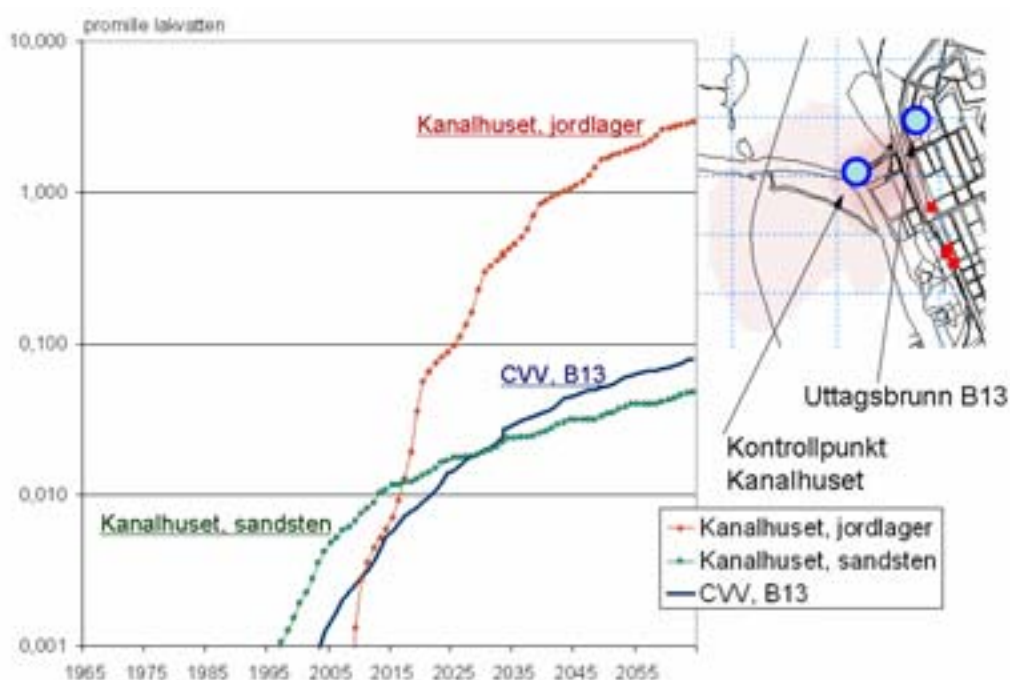


Figur 6-1. Beräknad spridning av lakvatten för dagens situation. Den övre bilden visar förhållanden under leran, den undre bilden visar förhållanden i den undre delen av kalkstenen.



Figur 6-2. Beräknad spridning av lakvatten i glaukonitsandstenen (huvudakvifären). Den övre bilden visar dagens situation, den undre bilden visar förhållanden om 60 år.

Transporten av föroreningar kan också beskrivas genom att se på genombrottskurvor vid olika platser, se figur 6-3. Av figuren framgår att transporten i jordlagren är långsammare än i sandstensakvifären, men å andra sidan är utspädningen och dispersionen väsentligt mindre. Detta medför att ett genombrott av föroreningen sker senare, men koncentrationen av ämnet förväntas bli större i jordlagren än i de djupare avlagringarna. Uttagsbrunn B13, som tar vatten i sandstenen, förväntas i dagsläget ha en lakvattenkoncentration på 0.001 promille lakvatten, vilket förväntas stiga till 0.1 promille över de kommande 60 åren.



Figur 6-3. Beräknad lakvattenkoncentration vid Kanalhuset och i vattenbrunn B13.

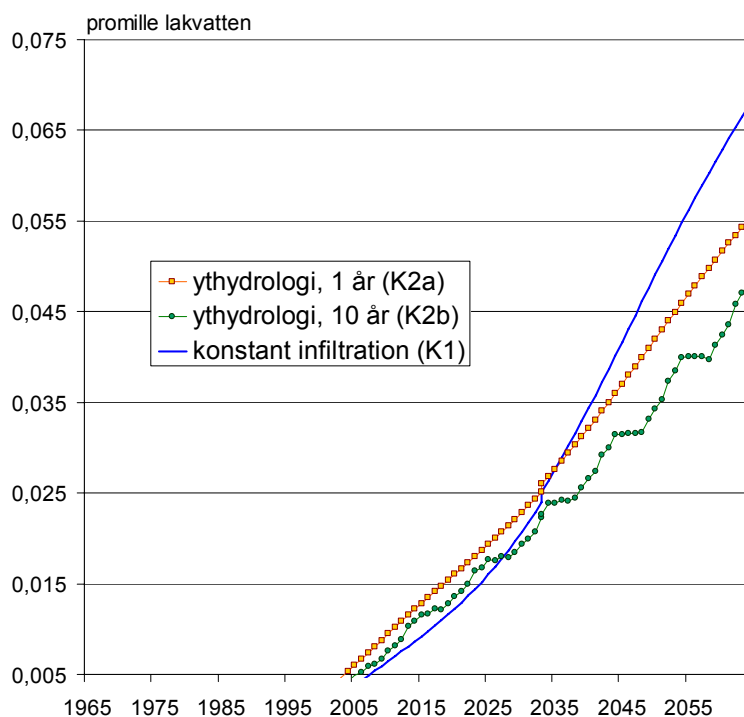
6.1.2 Ythydrologins betydelse

Resultaten för värdering av ythydrologins betydelse visas som genombrottskurvor i en punkt vid Kanalhuset för de 3 beräkningsfallen. Modellen har simulerat en period på 100 år och koncentrationen visas i figur 6-4.

Av simuleringen där beräknat strömningsmönster under en 10-årsperiod använts cykliskt under de 100 åren, framgår att det är en tydlig variation mellan de olika årens strömningsmönster. Detta förhållande kan av skalskäl inte ses när endast 1 år använts cykliskt vid beräkningen.

Användning av 1 och 10 års strömningscykel ger, om övrigt är lika, anledning till större dispersion/spridning av föroeningen och därmed mindre koncentrationer. Detta beror på att variationer i strömningsriktningar medtas och plymen rör sig mer oregelbundet baserat på dessa variationer. Det kunde också förväntas ett något snabbare genombrott till följd av ovanstående, men att detta inte syns så tydligt kan bero på att de minsta koncentrationerna inte visas i figur 6-4.

Användning av konstant infiltration över området och ett och samma strömningsmönster genom hela beräkningen ger i stort sett samma resultat som vid varierande strömningsmönster. I princip erhålls samma genombrott, men då spridningen i denna simulering är något mindre, blir koncentrationerna större mot slutet av beräkningsperioden. Det är dock mycket små olikheter mellan de genomförda beräkningarna, så i situationen vid Kristianstad är det uppenbarligen av mindre betydelse om ythydrologin tas med eller inte. Det bör dock noteras att både ansatt infiltration och vattenuttag valts med omsorg för att representera ett medelvärde för de 10 studerade åren. En mindre eller större infiltration skulle av naturliga skäl ge andra resultat. Det kan argumenteras huruvida medelinfiltrationen över ett område kan bedömas på ett säkert sätt utan någon form av ythydrologisk beräkning.



Figur 6-4. Beräknad lakvattenkoncentration vid Kanalhuset.

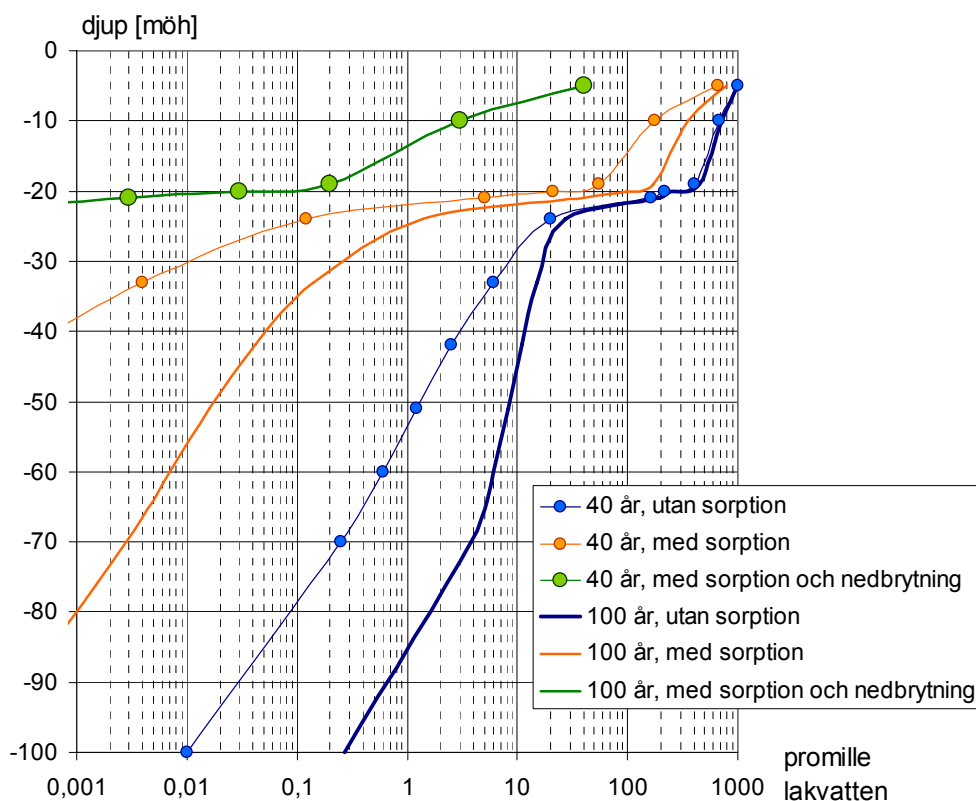
6.1.3 Avskiljningsprocessers betydelse

Det har genomförts 3 beräkningsfall för att undersöka effekten av avskiljningsprocesser och resultaten i form av maximala koncentrationer på olika djup visas i figur 6-5. Vid beräkningen har sorptionstal och nedbrytningstal för benzen använts.

Av resultaten syns att maxkoncentrationerna i de övre jordlagren kan variera upp till ca en tiopotens beroende på om sorption inkluderas eller ej. I de djupare berglagren kan variationen vara så stor som 2 till 3 tiopotenser.

Nedbrytning ger anledning till långt mindre maximalkoncentrationer än i de andra två fallen utan nedbrytning. I de övre jordlagren är det ca 2 till 4 tiopotensers skillnad och i de djupare berglagren är det ännu större skillnad, där koncentrationerna är mycket små i fallet med nedbrytning.

I situationen utan sorption har jämvikt uppstått i de övre jordlagren efter 40 år, medan det fortfarande är en förändring av föroreningsbilden i de djupare lagren. I modellen med nedbrytning har jämvikt uppstått i hela grundvattenzonen efter 40 år, då koncentrationerna efter 40 år och 100 år är i stort identiska.



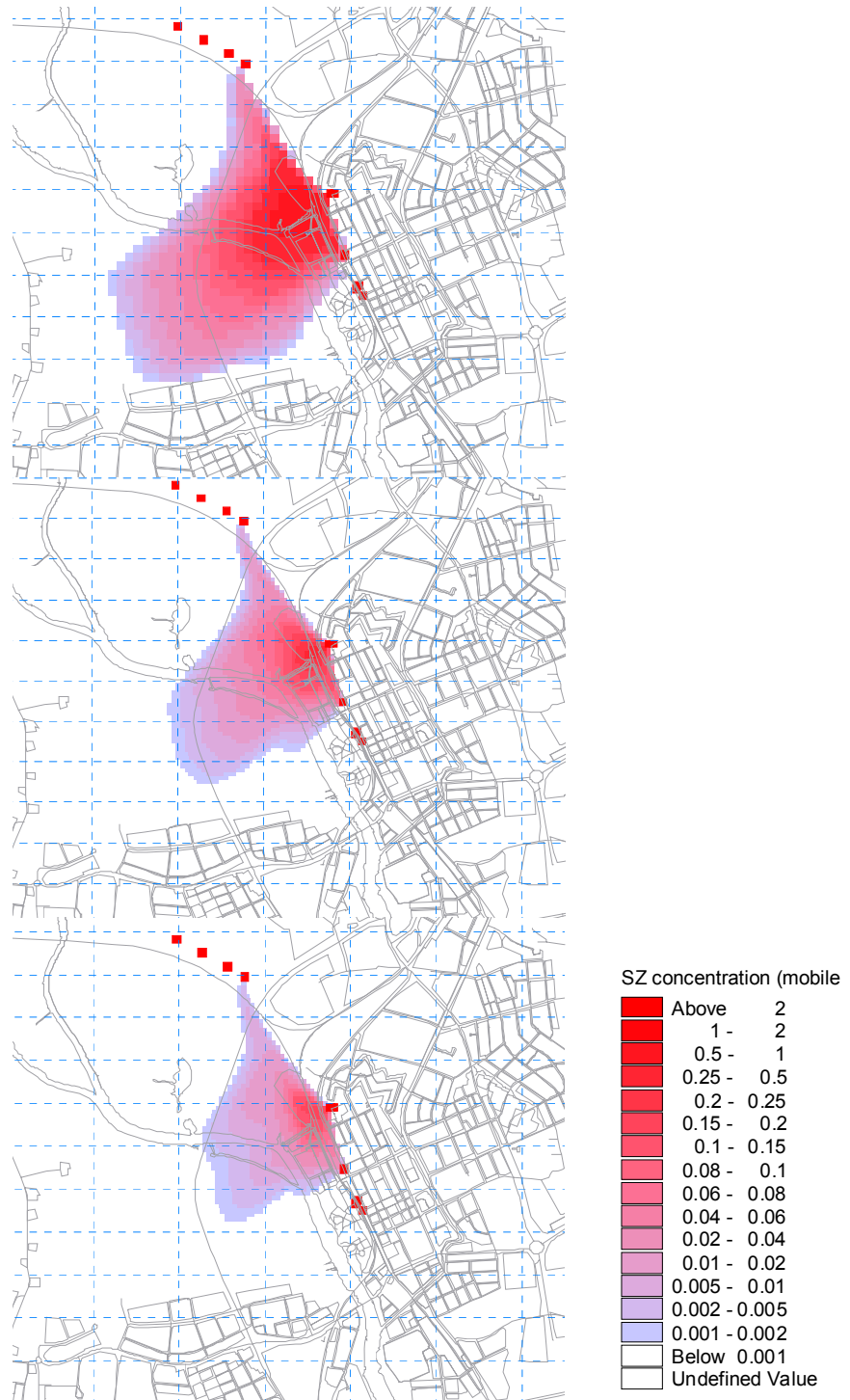
Figur 6-5. Beräknad maxkoncentration av lakvatten (benzen) på olika djup.

Som framgår av ovanstående, kan avskiljningsprocessernas betydelse för transport och spridning av föroreningar vara helt avgörande för om föroreningen i sig själv utgör en risk. Det är därför av avgörande betydelse att beskriva dessa förhållanden korrekt. I många fall bör laboratorietest genomföras för att bestämma korrekta nedbrytnings- och spridningsparametrar under aktuella förhållanden.

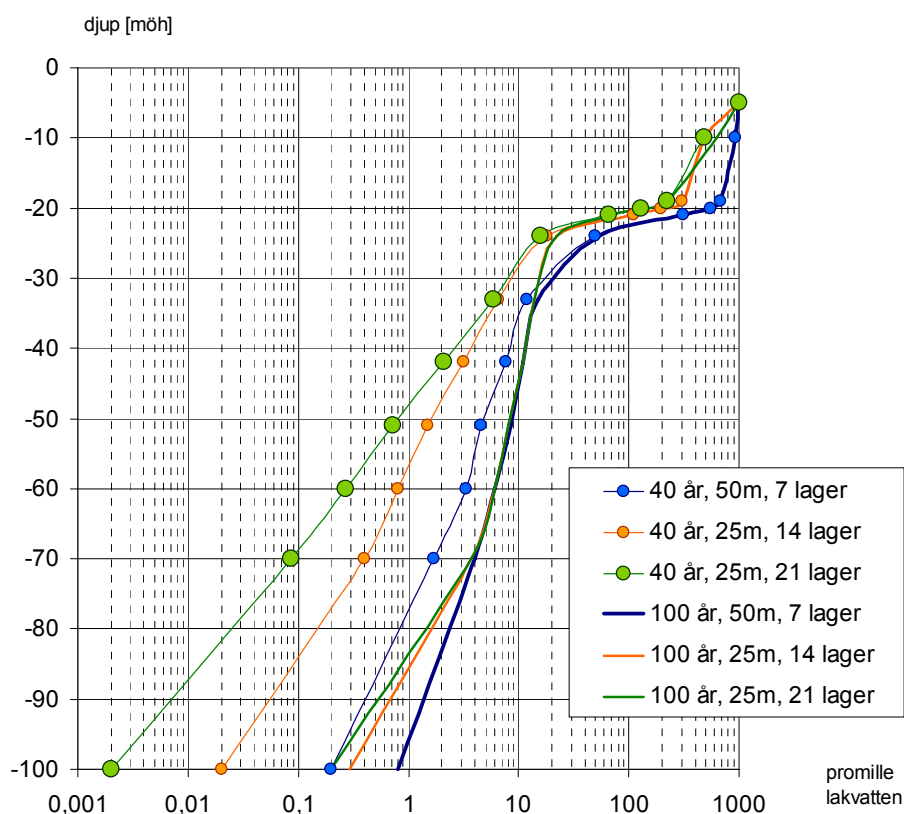
6.1.4 Betydelse av numerisk upplösning

Tre beräkningsfall har studerats med varierande vertikal upplösning: 7, 14 respektive 21 beräkningslager. I fallet med 7 beräkningslager har en horisontell i upplösning på 50m använts, medan upplösningen i de andra två fallen har satts till 25m. I tabell 5-2 (kapitel 5.1) visas hur beräkningslagren fördelas över de olika geologiska lagerheterna.

Större beräkningsselement kommer generellt, förutsett att allt annat är lika, att resultera i större numerisk dispersion, både i vertikal och horisontell riktning. Detta framgår också tydligt av figur 6-6, där den horisontella utbredningen i sandstenen efter 100 år (60 år från nu) visas, och av figur 6-7, där den vertikala utbredningen av maxkoncentrationer visas efter 40 år (nu) och efter 100 år (om 60 år).



Figur 6-6. Beräknad lakvattenkoncentration i sandstenen år 2065, baserat på olika numerisk upplösning. Den övre baseras på 7 lager (fall K5), den i mitten baseras på 14 lager (fall K1) och den undre baseras på 21 lager (fall K6).

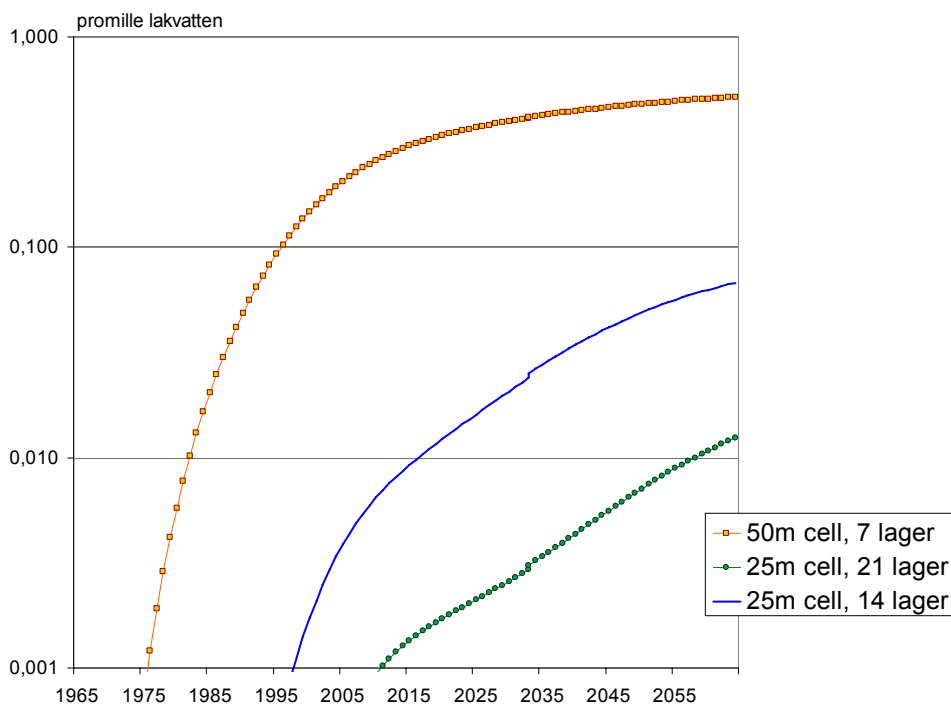


Figur 6-7. Beräknad maxkoncentration av lakvatten på olika djup, baserat på olika numerisk upplösning.

Skillnaden mellan 7 och 14 beräkningslager är markant och det är typiskt i den vertikala riktningen man ser en stor betydelse av diskretiseringen. Situationen efter 100 år i figur 6-7 är dock mindre intressant, då jämvikt nästan uppstått, med samma maxkoncentrationer i de flesta lagren, dock inte i det nedersta sandstenslagret.

I figur 6-8 visas genombrottskurvor i sandstenen vid Kanalhuset för de tre olika beräkningsfallen. Här ses att koncentrationsnivån på 0.01 promille av lakvatten kan förväntas vid Kanalhuset efter ca 20 år från starten om modellen är diskretiserad i ett 50m nät med 7 beräkningslager. Med ett 25m nät och 14 beräkningslager nås denna koncentrationsnivån ca 35 år senare, och med 21 beräkningslager först ytterligare ca 40 år senare.

Om det hade varit en betydande variabilitet i hydraulisk konduktivitet inom området, kunde man förvänta sig en snabbare transport och högre koncentrationer i en genombrottskurva med mindre beräkningselement jämfört med större beräkningselement, där variabiliteten jämnas ut. Detta fenomen syns dock inte i figur 6-8, snarare tvärtom. I det aktuella fallet är även de grövre beräkningselementen tillräckligt små för att täcka in den rumsliga variationen i hydrauliska parametrar. Skillnaderna i figur 6-8 kan därför uteslutande förklaras med numerisk dispersion, och då huvudsakligen i vertikal riktning.



Figur 6-8. Beräknad lakvattenkoncentration vid Kanalhuset, baserat på olika numerisk upplösning.

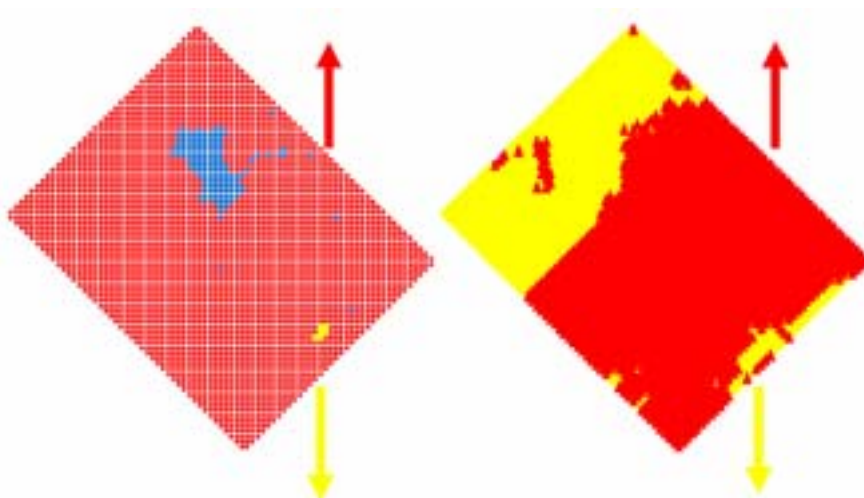
Resultaten från beräkningarna ovan visar med all tydlighet att den numeriska upplösningen, dvs beräkningselementens storlek, är av stor betydelse vid beräkning av spridningsförloppet då dispersionsprocesser är inkluderade. Spridningsförloppets känslighet med avseende på beräkningselementens storlek bör därför alltid utvärderas från fall till fall, då dispersion inkluderas vid beräkningen. Av praktiska skäl tvingas man dock ofta till avkall på noggrannheten, då beräkningselementens storlek naturligtvis påverkar de praktiska simuleringstiderna. I det aktuella fallet tog beräkningen med det finare beräkningsnätet ca 20 gånger längre tid än med det grövsta beräkningsnätet.

6.2 Djupförvar av kärnbränsle i Forsmark

6.2.1 Jämförelse av Darcy Tools och MIKE SHE

Med en regional modell över Forsmarksområdet i Darcy Tools (figur 4-10) har SKB beräknat partikelbanor från ett tänkt förvarsområde (fall F1). Baserat på data från denna regionala modell har sedan en mindre modell etablerats i MIKE SHE för en del av detta modellområde, se figur 4-10 och kapitel 4.2.3 för detaljer. Så långt som möjligt bygger de båda modellerna på samma data. Randvillkoren till MIKE SHE, bestående av tryck längs de horisontella ränderna och i botten av modellen, har tagits från beräknade tryck i Darcy Tools. I Darcy Tools har det övre randvillkoret ansatts till ett tryck motsvarande markytan (respektive havets nivå). I beräkningsfall F2a med MIKE SHE har samma övre randvillkor använts för att

partikelberäkningarna ska bli så likvärdiga som möjligt. Trots detta ger de två modellsystemen helt olika resultat. I figur 6-9 visas det rektangulära område inom vilket partiklar injicerats på nivån -400 möh. Med olika färger visas om partiklarna rör sig uppåt eller nedåt. Som synes ger MIKE SHE att huvuddelen av partiklarna rör sig uppåt, medan Darcy Tools ger ett helt annat resultat med en mycket större andel nedåtgående partiklar. I figur 6-10 visas slutdestinationen efter 1000 år för de partiklar som rört sig uppåt till de övre jordlagren. Långt fler partiklar når markytan i fallet med MIKE SHE jämfört med Darcy Tools, vilket naturligtvis är en följd av de skillnader i partikelriktningar som visas i figur 6-9.



Figur 6-9. Jämförelse av strömningsriktning i bottenlager (-400 möh). Darcy Tools med fast grundvattenyta (F1) och MIKE SHE med fast grundvattenyta (F2a). Röd färg markerar uppåtgående strömning, gul färg markerar neråtgående strömning och blå färg markerar partiklar som inte förflyttats.



Figur 6-10. Jämförelse av slutdestination för partiklar som nått de övre jordlagren efter 1000 år. Darcy Tools med fast grundvattenyta (F1) och MIKE SHE med fast grundvattenyta (F2a). Det grå området visar det område där partiklarna introducerades på nivån -400 möh.

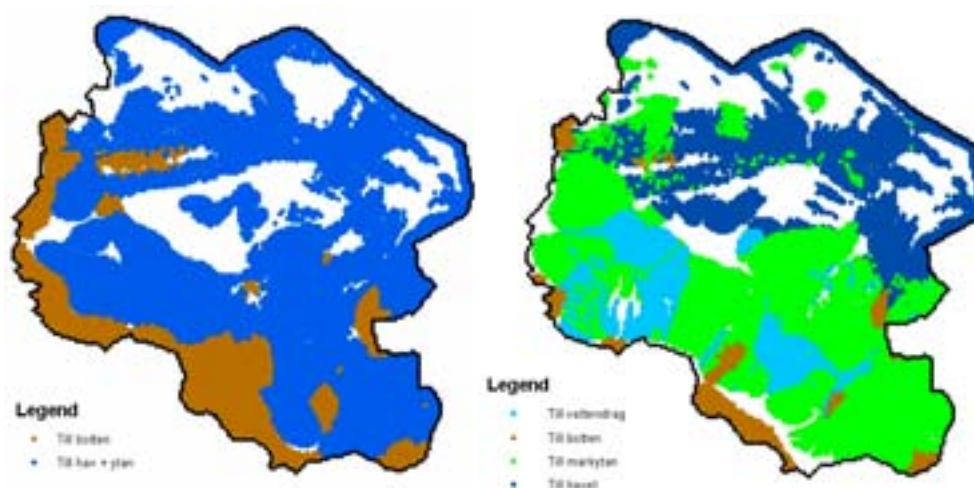
De tryck som hämtats från Darcy Tools i de nedersta lagren ger en uppåtgående gradient. Det är därför naturligt att i princip samtliga partiklar rör sig uppåt i beräkningen med MIKE SHE. Anledningen till att beräkningen med Darcy Tools inte ger samma resultat i partikelrörelser som med MIKE SHE, är att Darcy Tools tar hänsyn till densitetsskillnader i vattnet, här till följd av olika saltvattenhalt. En uppåtgående tryckgradient behöver då nödvändigtvis inte innebära att vattnet rör sig i den riktningen. Tryckskillnaden måste då även övervinna eventuella densitetsskillnader i vattnet. I det aktuella fallet är tryckskillnaderna ganska små mellan lagren, vilket gör att eventuella densitetsskillnader kan ha avgörande betydelse för vattnets strömningsriktning på dessa djup.

6.2.2 Ythydrologins betydelse

6.2.2.1 FAST GRUNDVATTENYTA KONTRA FULL YTHYDROLOGI

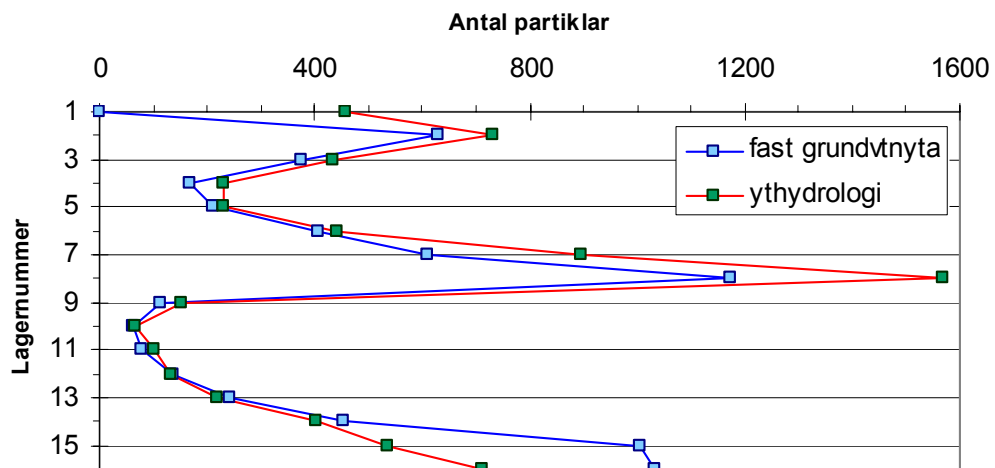
I detta kapitel jämförs två beräkningar av partikelbanor med MIKE SHE. I det ena fallet (F2b) används en fast grundvattenyta som övre randvillkor (dvs samma som i kapitlet ovan). I det andra fallet (F4) används en fullständig beskrivning av ythydrologin, dvs inklusive omättad zon, avdunstning, ytavrinning och vattendrag.

En av fördelarna med att inkludera full ythydrologi vid denna typ av spridningsberäkningar är att det möjliggör en mer detaljerad värdering av partiklarnas slutdestination. Förutom att skilja på olika områden (t.ex. land och hav), är det då möjligt att beräkna vilka som hamnar i specifika vattendrag och sjöar. I figur 6-11 visas startpositionen för partiklar med olika destination. Bruna partiklar har rört sig nedåt. Partiklar inom vita områden har efter 200 år ännu inte lämnat modellen. Partiklar med andra färger har lämnat modellen i markytan på olika sätt.

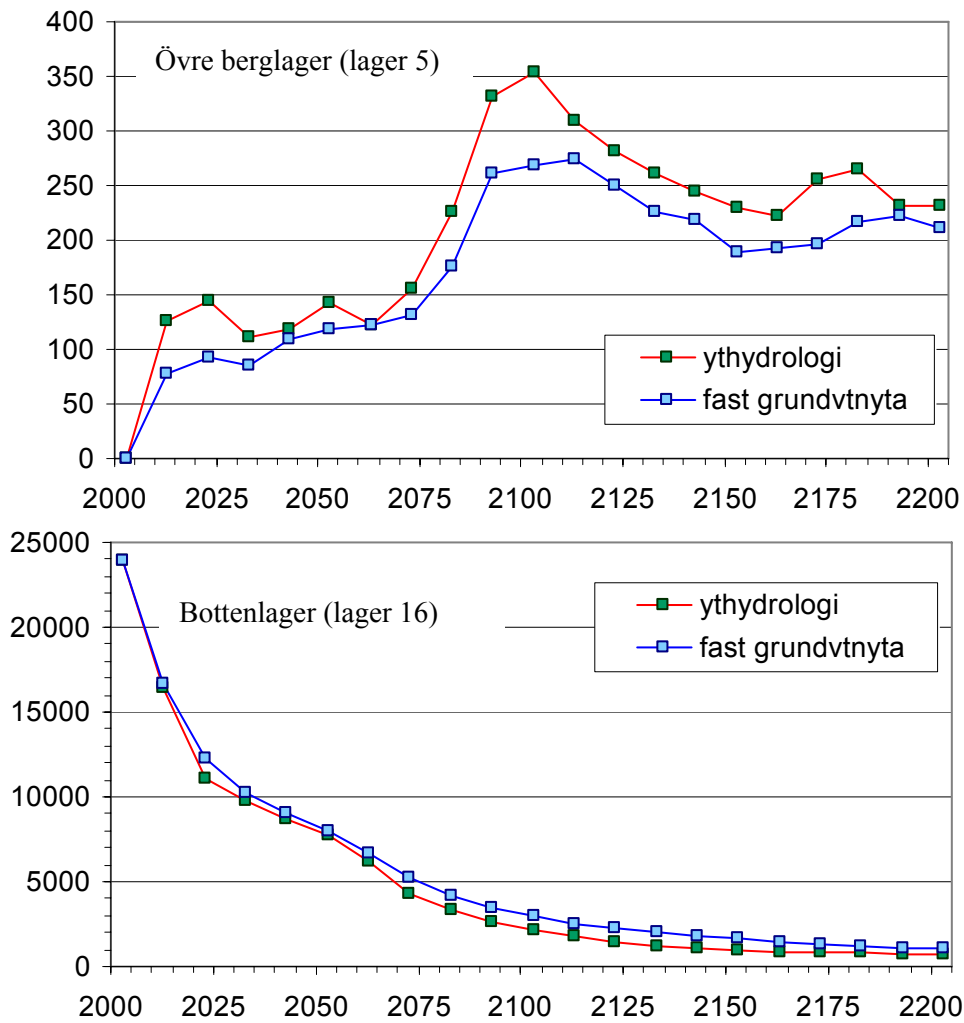


Figur 6-11. Typ av destination för partiklarna efter 200 år. Till vänster beräknat med fast grundvattenyta (F2b) och till höger beräknat med full ythydrologi (F4). Bruna partiklar går nedåt.

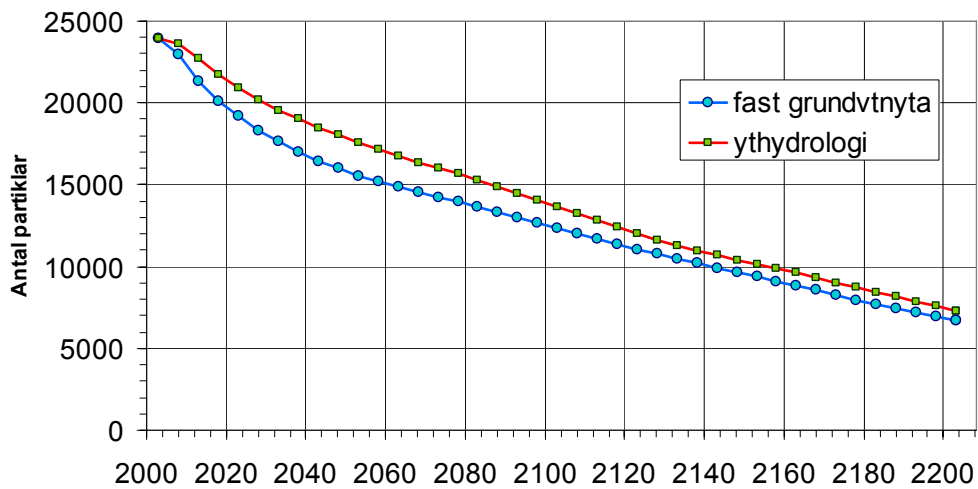
Den överordnade fördelningen mellan olika partikeldestinationer är den samma i de båda fallen. Det är också ungefär samma fördelning över djupet, vilket visas i figur 6-12 (efter 200 år) och i figur 6-13 (som funktion av tiden i några lager). I fallet med fast grundvattenyta är det dock efter 200 år något färre partiklar i toppen, och flera i botten, jämfört med full yhydrologi. Detta beror bl.a. på att grundvattennivån i fallet med full yhydrologi tillåts variera och framförallt då sjunka under markytan, vilket i sin tur skapar en större gradient från botten, och därmed en snabbare transport mot markytan. I fallet med full yhydrologi har också fler partiklar (15900) lämnat modellen vid markytan jämfört med vid fast grundvattenyta (14000). Ändå är det färre partiklar kvar efter 200 år i fallet med fast grundvattenyta (se figur 6-14), vilket beror på att många fler partiklar lämnar modellen nedåt i fallet med fast grundvattenyta. Totalt ca 3200 jämfört med ca 800 för fallet med full yhydrologi.



Figur 6-12. Antal partiklar som är kvar i modellen i olika lager efter 200 år. Fast grundvattenyta (F2b) och full yhydrologi (F4).



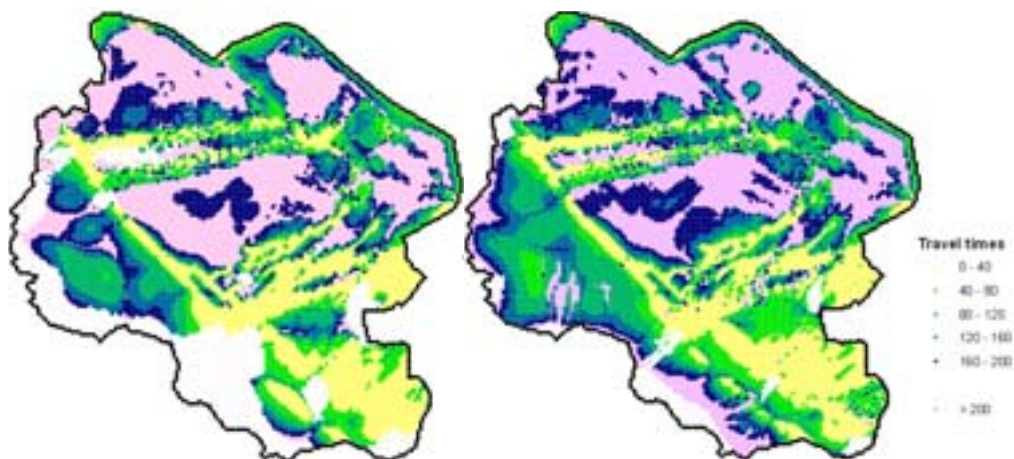
Figur 6-13. Kvarstående partiklar i nedre och övre berglager som funktion av tid. Fast grundvattenyta (F2b) och full ythydrologi (F4).



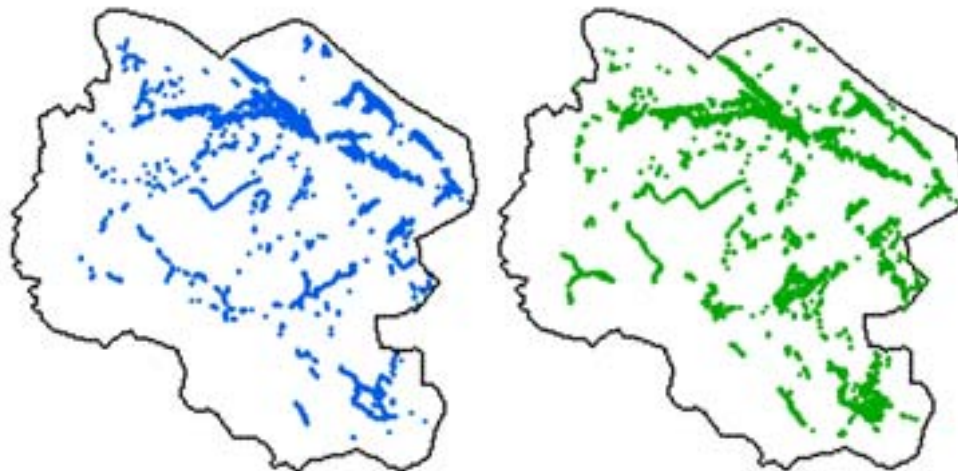
Figur 6-14. Kvarstående partiklar i hela modellen som funktion av tid. Fast grundvattenyta (F2b) och full ythydrologi (F4)

Transporttiden för de partiklar som rör sig uppåt visas i figur 6-15. Här ses också att transporttiderna generellt är något långsammare i fallet med fast grundvattenyta, vilket alltså bekräftar ovanstående resonemang. Överordnat är det dock samma mönster på hastighetsfördelningen.

I figur 6-16 visas slutdestinationen för de partiklar som lämnat modellen vid markytan. Även här är det överordnade mönstret liknande mellan de två fallen.



Figur 6-15. Transporttider. Till vänster beräknat med fast grundvattenyta (F2b) och till höger beräknat med full yhydrologi (F4). Lila partiklar är fortfarande kvar i modellen efter 200 år.

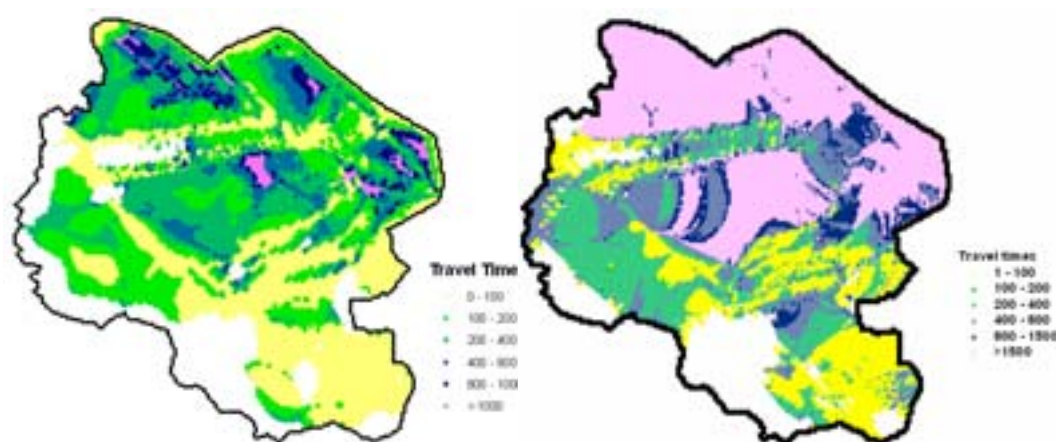


Figur 6-16. Jämförelse av slutdestination för partiklar efter 200 år. Till vänster beräknat med fast grundvattenyta (F2b) och till höger beräknat med full yhydrologi (F4).

6.2.2.2 FAST GRUNDVATTENYTA KONTRA KONSTANT INFILTRATION

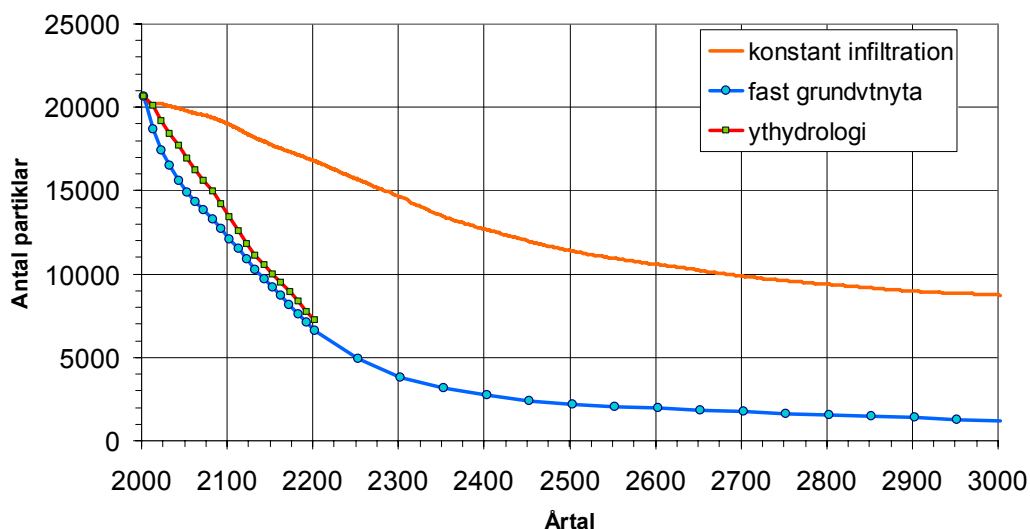
Även i detta kapitel, likt ovanstående, jämförs två beräkningar av partikelbanor med olika beskrivning av yhydrologin. I det ena fallet (F2b), som även var ett av fallen i kapitlet ovan, används en fast grundvattenyta som övre randvillkor. Detta fall har modellerats med MIKE SHE. I det andra fallet (F3) används en konstant infiltration, med samma värde (74 mm/år) över hela området, som övre randvillkor. Detta fall har modellerats med Visual MODFLO Pro.

De två beräkningarna visar liknande överordnad bild över fördelningen av transporthastigheter, se figur 6-17. Dock är de beräknade transporttiderna för fallet med konstant infiltration ca tre till fyra gånger större än i fallet med fast grundvattenyta.



Figur 6-17. Transporttider. Till vänster beräknat med fast grundvattenyta (F2b) och till höger beräknat med konstant infiltration (F3).

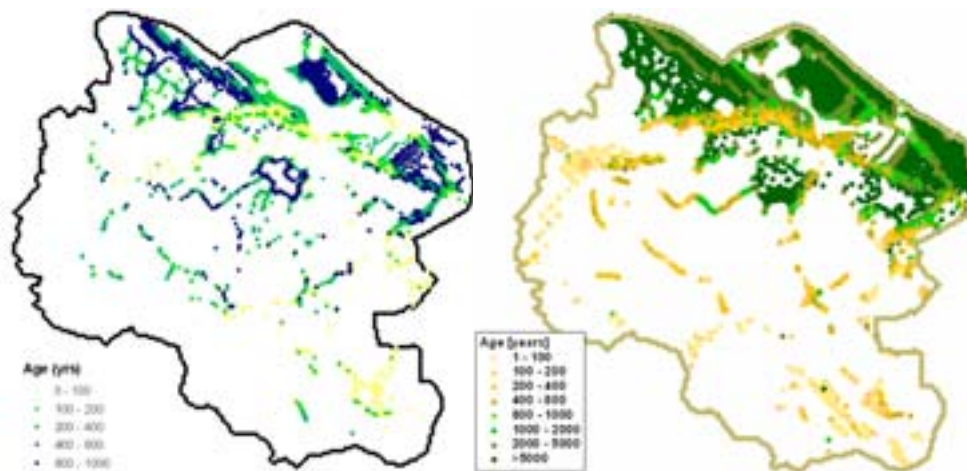
Detta faktum är ännu mer uppenbart i figur 6-18, där kvarstående partiklar i modellen visas som funktion av tiden för de tre beräkningsfallen med fast grundvattenyta (F2b), konstant infiltration (F3) och full yhydrologi (F4). Resultaten för fast grundvattenyta och full yhydrologi är i detta sammanhang mycket likartade, medan fallet med konstant infiltration avviker kraftigt, med ett mycket långsammare transportförlopp överlag. Orsakerna till detta kan främst härledas till det faktum att beräknade tryck, i det översta beräkningslagret, i fallet med konstant infiltration ofta ligger över markytan, dvs högre än i de två andra fallen. Detta ger en mindre gradient från botten, med lägre transporthastigheter som följd. Speciellt märks detta inom de, för uppåtgående transport viktiga, utströmningsområden där vi, i alla tre fallen, har slutdestinationer för partiklarna. Visserligen definierades en dräneringsfunktion strax under markytan, i fallet med konstant infiltration, för att undgå just orimliga grundvattentryck i det övre beräkningslagret. Uppenbarligen var denna inte tillräckligt effektiv för att transportera bort den mängd vatten som krävdes för att hålla trycken i nivå med markytan, eller i nivå med kända sjönivåer. Om man önskar använda denna typ av övre randvillkor med konstant infiltration, är detta uppenbarligen en viktig punkt att ta hänsyn till.



Figur 6-18. Kvarstående partiklar i hela modellen som funktion av tid. Fast grundvattenyta (F2b), konstant infiltration (F3) och full yhydrologi (F4).

En annan medverkande anledning till att transporttiderna är längre i fallet med konstant infiltration, är att dessa beräkningar genomförts baserat på ett helt stationärt strömningsfält. I de två andra fallen har transienta beräkningar genomförts utgående från initiala tryck, tagna från simulering med Darcy Tools (se kapitel 4.2.3). Vid de transienta beräkningarna sjönk hastigheterna i sprickzonerna i det nedersta beräkningslagret med upp till 15% under det första året. Huvuddelen av förändringen skedde dock under de första månaderna, varför förändringen över lång tid inte nämnvärt borde överstiga denna nivå. Hastighetsförändringen till följd av detta är oavsett marginell jämfört med effekterna av förhöjda tryck i markytan.

I figur 6-19 visas slutdestinationen, och transporttiden, för de partiklar som lämnat modellen vid markytan. De olika transporttiderna till trots, ses ungefär samma mönster vad gäller slutdestinationernas lägen.

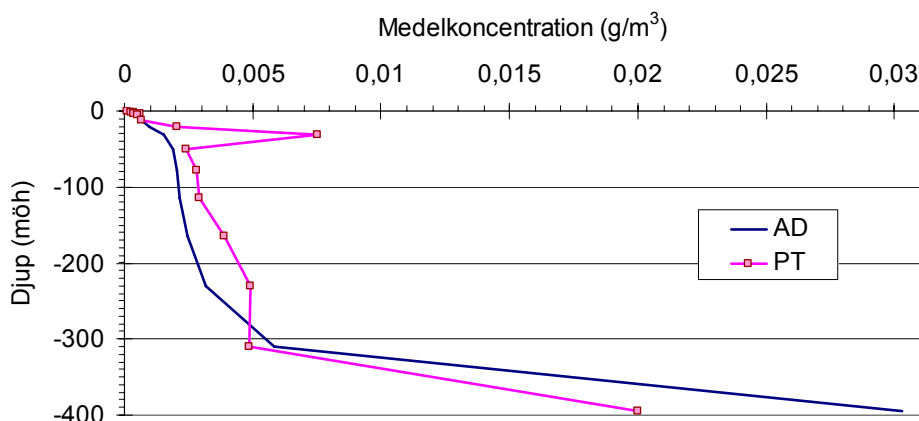


Figur 6-19. Jämförelse av slutdestination (och transporttider) för partiklar. Efter 1000 år för fast grundvattenyta (F2b) och efter 5000 år för konstant infiltration (F3).

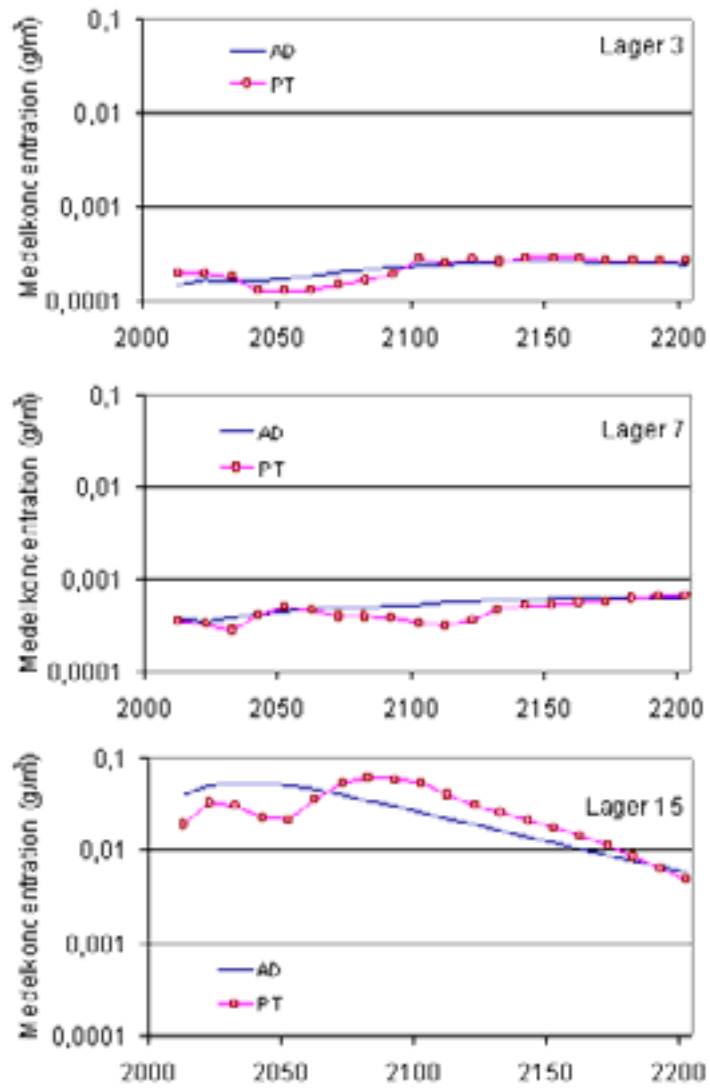
6.2.3 Dispersionens betydelse

I detta kapitel jämförs två beräkningar med MIKE SHE, som i båda fallen baseras på beräkning med full yhydrologi. I det ena fallet (F4), som även var ett av fallen i kapitel 6.2.2 ovan, används sk partikelbaneberäkning (PT) för spridningsförloppet, som i detta fallet baseras på ren advektiv transport. Det andra fallet (F5a) skiljer sig från detta endast genom att spridningsförloppet här beskrivs med både advektion och dispersion (AD). I övrigt är de båda beräkningarna identiska.

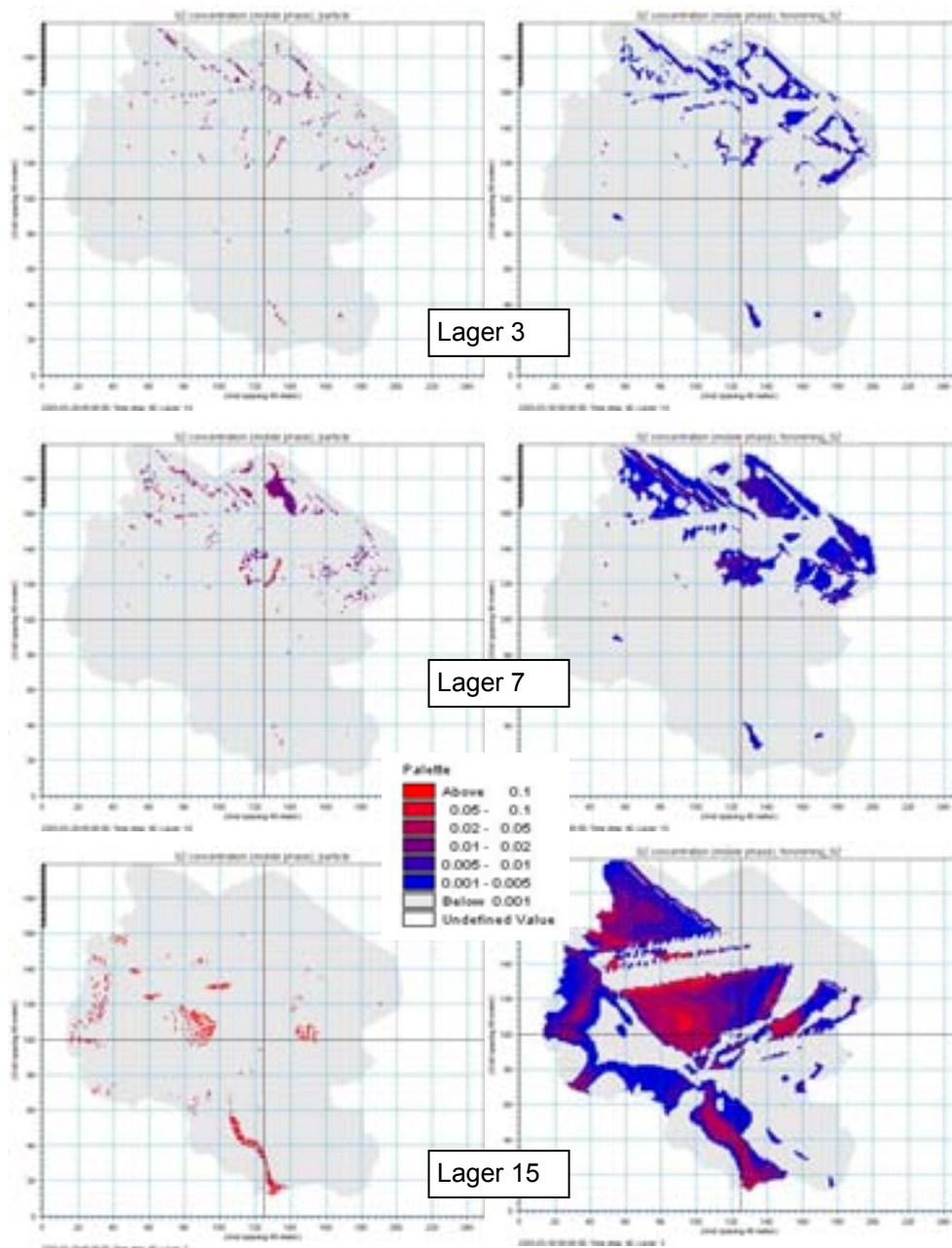
PT-beräkningen ger en mer nyanserad bild än AD-beräkningen, då man här undviker spridning och utjämning av föroreningsplymen till följd av numerisk dispersion. Effekterna av detta syns i figurena 6-20 (vertikal variation), 6-21 (variation i tiden) och 6.22 (horisontell variation). En annan orsak till att medelkoncentrationen för olika lager skiljer sig åt i de båda fallen (figur 6-20) är att den vertikala hastighetskomponenten för masstransport beräknas något olika i de två olika spridningsmodellerna. Den överordnade bilden är dock liknande i de båda fallen.



Figur 6-20. Beräknad medelkoncentrationer vid olika djup, 200 år efter introduktion av partikelmassor i hela botten.



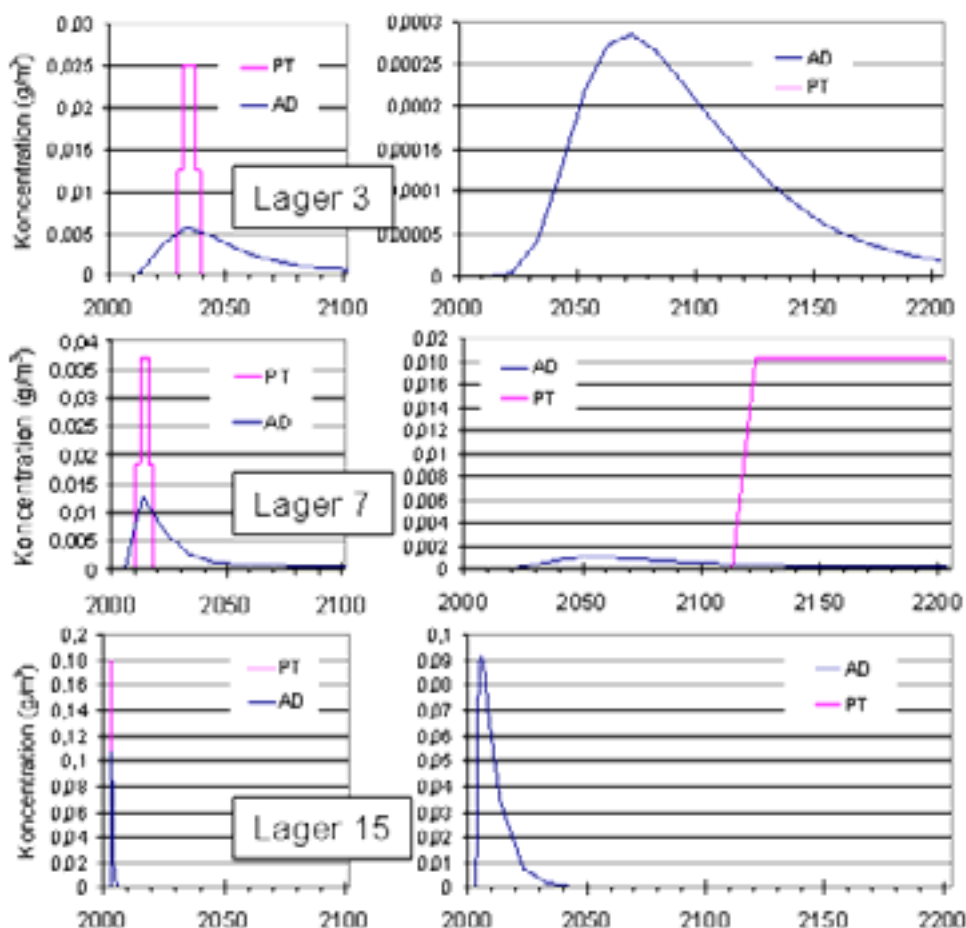
Figur 6-21. Beräknad medelkoncentrationer som funktion av tid i tre olika lager.



Figur 6-22. Beräknad koncentration 200 år efter introduktion av partikelmassor i hela botten. Bilderna till vänster baseras på partikelberäkning. Bilderna till höger baseras på advektion/dispersionsberäkning. Skalan i paletten har enheten g/m^3 .

I figur 6-23 visas genombrottskurvor för två punkter, dels i en sprickzon, dels en bit ifrån en sprickzon. Punkten i sprickzonen uppvisar likartade resultat i de två beräkningsfallen, med ungefär samma transporttider för koncentrationstoppen, men effekten av dispersion är tydlig. Speciellt ses dock effekten av numerisk dispersion i punkten utanför sprickzonen. Vid PT-beräkningen kan partiklarna inte röra sig in i matrisen (utanför sprickzonen) via dispersion, som är tillfället vid AD-beräkningen. Detta ger upphov till enorm skillnad i beräknade koncentrationer utanför sprickzonen. Förmodligen är beskrivningen enligt AD-konceptet helt felaktigt i ett område som detta där strömningen är mycket diskret i de djupare berglagren. Resultaten i de övre jordlagren kan däremot vara relevanta även i fallet med AD-beräkning, dock krävs troligen ett finare beräkningsnät för att undgå den numeriska dispersionen.

Dispersionen ger också upphov till en större uttransport av massa, och mindre magasinering, jämfört med PT-beräkningen. Den uttransporterade massan efter 200 år är ca 12 % större vid AD-beräkningen jämfört med PT-beräkningen.



Figur 6-23. Beräknade koncentrationer som funktion av tid i två olika punkter i tre olika lager. Bilder till vänster är tagna från en punkt i en sprickzon. Bilder till höger är tagna i en punkt en bit ifrån en sprickzon.

6.2.4 Sorptionens betydelse

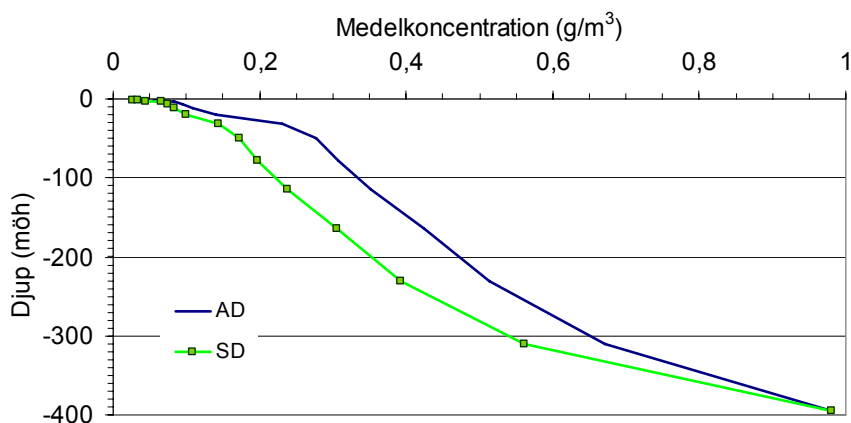
I detta kapitel jämförs två beräkningar med MIKE SHE, som i båda fallen baseras på beräkning med full yhydrologi och spridningsberäkning med advektion/dispersion. I det ena fallet (F6), inkluderas även sorptionsprocesser till AD-beräkningen, medan det andra fallet (F5b) körs utan sorption. Det senare fallet motsvarar alltså fall F5a i kapitlet ovan, men i beräkningarna nedan är källan till båda beräkningsfallen en kontinuerlig koncentrationskälla på 1 g/m³ i botten av modellen.

Resultaten från de två beräkningarna visas i figurerna 6-24 (variation med djupet), 6-25 (variation i tiden) och 6.26 (horisontell variation).

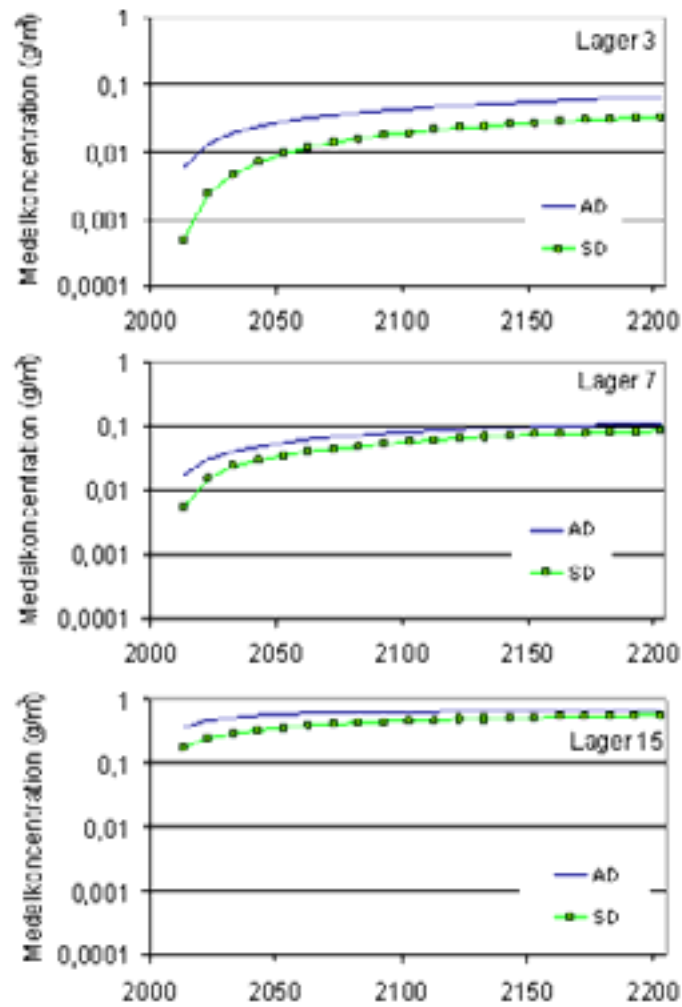
Beräkningen med sorption ger klart lägre medelkoncentrationer i de olika lagren, och den relativa effekten blir större ju längre från källan vi kommer (figur 6-24). Effekten av sorption är större i början av spridningsförloppet, och avtar sedan successivt (figur 6-25).

Effekten av sorption är dock mindre i denna tillämpning än i fallet med deponin i Kristianstad. Detta beror på att angivna K_d-värden för jordlagren i Kristianstad, dvs lagren nära källan, ger retardationstal (R) på ca 70, vilket ska jämföras med retardationstal (R) på ca 2 för berget i Forsmark.

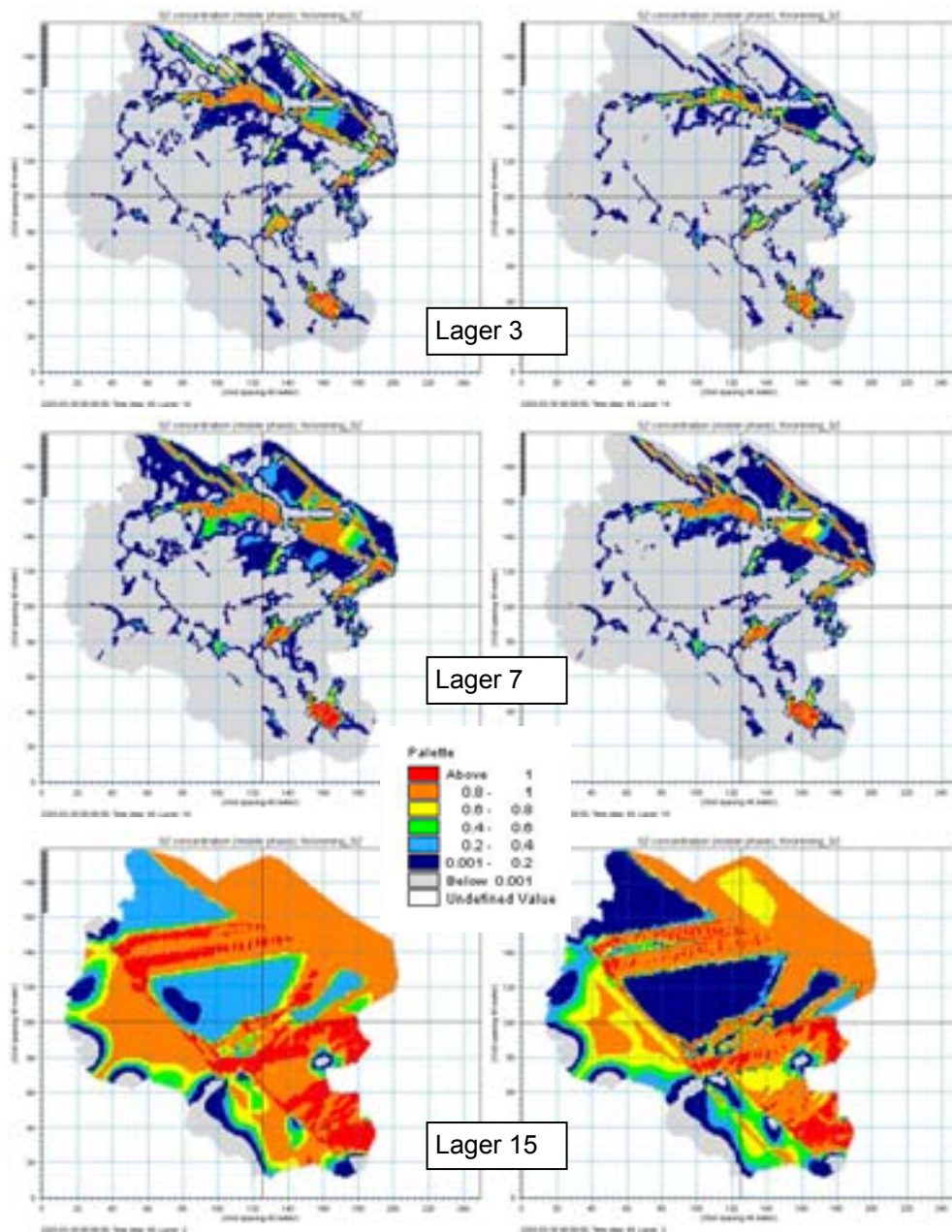
Mönstret i den horisontella variationen för koncentrationer är ganska likartat mellan de två beräkningsfallen (figur 6-26). Koncentrationsnivåerna är bara generellt något lägre i fallet med sorption, speciellt utanför sprickzonerna, där koncentrationerna är markant lägre.



Figur 6-24. Beräknad medelkoncentrationer vid olika djup, 200 år efter start av kontinuerlig källa i hela botten. Kurva betecknad AD innebär AD-beräkning utan sorption. Kurva betecknad SD innebär AD-beräkning med sorptionsprocesser.



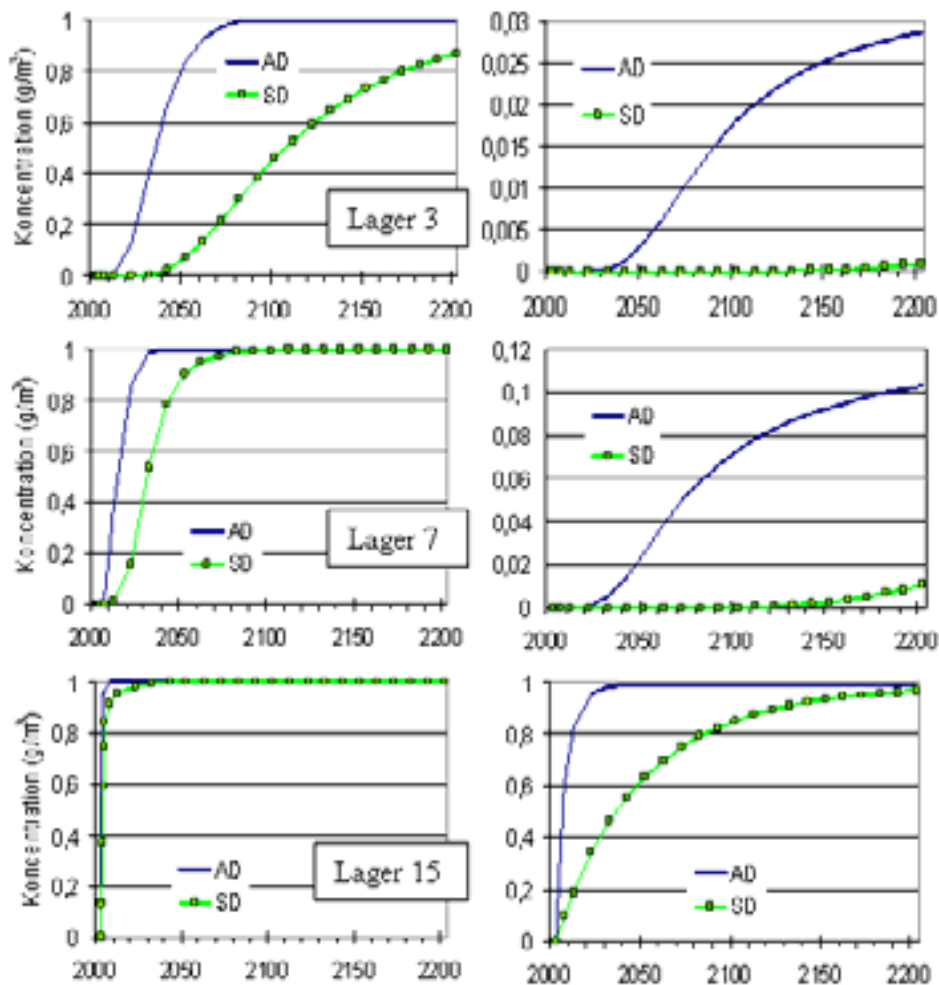
Figur 6-25. Beräknad medelkoncentrationer som funktion av tid i tre olika lager. Kurva betecknad AD innebär AD-beräkning utan sorption. Kurva betecknad SD innebär AD-beräkning med sorptionsprocesser.



Figur 6-26. Beräknad koncentration 200 år efter start av kontinuerlig källa i hela botten. Bilderna till vänster baseras på en AD-beräkning utan sorption. Bilderna till höger baseras på en AD-beräkning med sorption. Skalan i paletten har enheten g/m^3 .

I figur 6-27 visas genombrottskurvor för två punkter, dels i en sprickzon, dels en bit ifrån en sprickzon. Man ser här tydligt att ju längre bort från källan man kommer, ju större betydelse får sorptionen. I det aktuella fallet kan det betyda en fördröjning av genombrottskurvan på flera hundra år.

Sorptionen har stor betydelse i sprickzonen, men har enorm betydelse en bit ifrån sprickzonen. Utanför sprickzonen är typiskt den effektiva porositeten mindre, vilket ger ett större retardationstal (R) för samma Kd.



Figur 6-27. Beräknad koncentrationer som funktion av tid i två olika punkter i tre olika lager. Bilder till vänster är tagna från en punkt i en sprickzon. Bilder till höger är tagna i en punkt en bit ifrån en sprickzon.

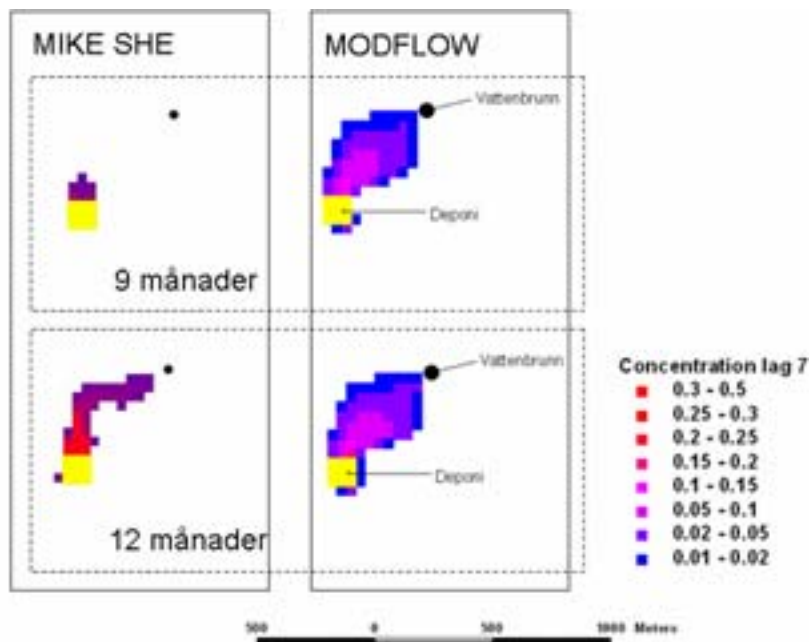
Sorptionen ger också upphov till en mindre uttransport av massa, till följd av sorption av massa på berg- och jordpartiklar. Den uttransporterade massan efter 200 år är ca 28 % mindre vid fallet med sorption.

6.3 Ytlig deponi i ett morän/urbergsområde

6.3.1 Jämförelse av MIKE SHE och MODFLOW

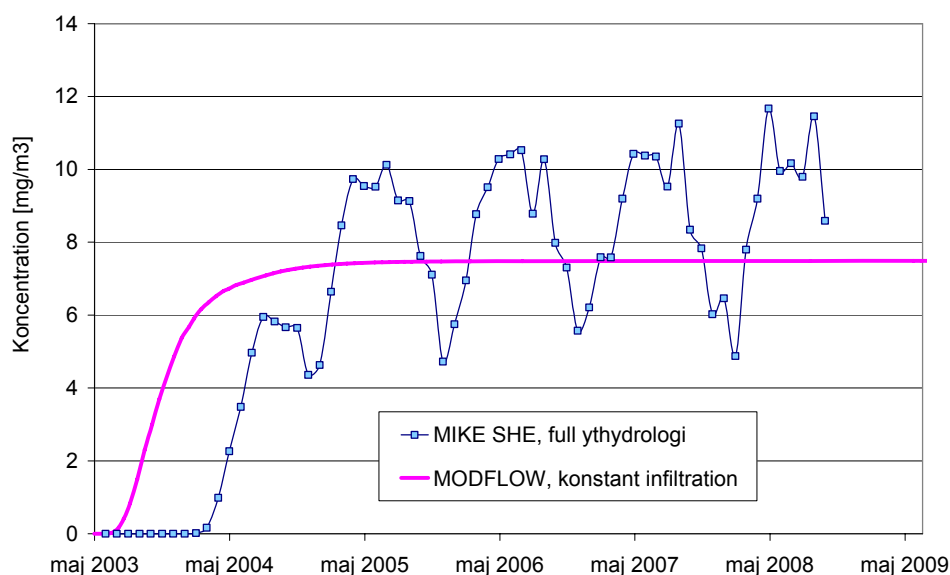
Avsikten med de beräkningar som genomförts med denna tänkta problemställning var ursprungligen att bli jämföra betydelsen av ythydrologin i en lite mer småskalig problemställning. Därför genomfördes två beräkningar med olika beskrivning av ythydrologin. I det ena fallet (D1) används en fullständig beskrivning av ythydrologin. Detta fall har modellerats med MIKE SHE. I det andra fallet (D2) används en konstant infiltration, med samma värde (74 mm/år) över hela området, som övre randvillkor. Detta fall har modellerats med Visual MODFLO Pro.

En av skillnaderna mellan MIKE SHE och MODFLOW, vid spridningsberäkningar med advektion/dispersion, är hanteringen av ”torra celler”. I MODFLOW kan en cell torka ut om trycket ligger under cellens botten, varefter cellen inte längre ingår i beräkningen. Så är inte fallet med MIKE SHE, där det alltid upprätts ett minimumvattenstånd i en cell. På grund av vattenuttaget i det aktuella fallet, skapas en avsänkningstratt runt omkring uttagsbrunnen, vilket i MODFLOW ger torra celler. Om de översta cellerna ”torkar ut”, förs infiltrationen direkt ned till den första icke torra cellen. Samma sak gäller därför ämnen som tillförs som en given koncentration till infiltrationen, dvs som i detta fallet. Sammantaget betyder ovanstående att ämnet förs snabbare ner i grundvattenmagasinet i MODFLOW, jämfört med i MIKE SHE. Detta är en av orsakerna till varför föroreningsplymen är större i MODFLOW än i MIKE SHE, se figur 6-28.



Figur 6-28. Beräknad koncentration av källan i lager 7 (där vattenuttag görs). Till vänster visas resultat från MIKE SHE och till höger resultat från MODFLOW. I den övre delen visas resultat efter 9 månader och i den nedre delen visas resultat efter 12 månader. Skalan är i g/m^3 och källkoncentrationen är satt till $1 g/m^3$.

Ovanstående skillnader i modellkoncepten gör att det blir svårt att urskilja skillnaderna i resultat till följd av olika beskrivning av yhydrologin, vilket alltså var den ursprungliga tanken. Oavsett detta, bidrar naturligtvis även skillnaden i beskrivning av yhydrologin till att resultaten blir olika. Den ansatta infiltrationen i MODFLOW ger alltför höga tryck i jordlagren inom det aktuella området, främst till följd av att den fiktiva ytdräneringen i modellen ansatts alltför svag, vilket generellt skapar en större gradient från deponin mot de djupare lagren, vilket redan konstaterades under kapitel 6.2.2.2. Detta ger förutsättning för en snabbare transport från ytan. Den tidsmässiga fluktuationen vid full yhydrologi skapar också en fördröjning av genombrottskurvan, som visas i figur 6-29.



Figur 6-29. Beräknad koncentration av källan (1000 mg/m^3) vid vattenuttaget, dels baserat på MIKE SHE med full yhydrologi (D1), dels baserat på MODFLOW med konstant infiltration (D2).

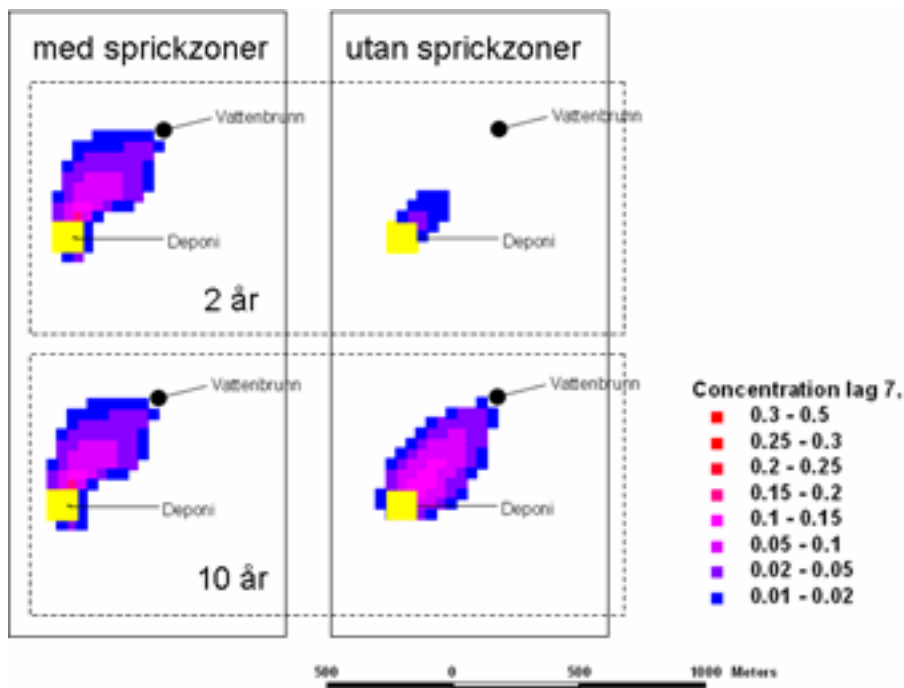
6.3.2 Betydelse av geologisk och tektonisk tolkning

I detta kapitel jämförs beräkningsfallet med konstant infiltration i kapitlet ovan (D2) med ett fall (D3) där beskrivningen av berget förenklats till en helt homogen beskrivning, utan sprickzoner. Båda fallen körs med MODFLOW och baseras på konstant infiltration.

I den förenklade modellen (D3) har konduktiviteten för berget satts till $1\text{e-}5 \text{ m/s}$ i hela modellen, vilket ska jämföras med ca $1\text{e-}4 \text{ m/s}$ i sprickor och $1\text{e-}6 \text{ m/s}$ i resten av berget för det ursprungliga fallet (D2). Denna konduktivitet är vald utgående från kapacitetsbehoven vid uttagsbrunnen. Tanken är alltså att fall D3 ska illustrera en situation där man inte vet särskilt mycket om berget, utöver de vattenmängder som pumpas upp.

Föroreningsplymens transportförlopp och utbredning, som visas i figur 6-30, får ett helt annat utseende vid fallet med den förenklade bergmodellen. För det första tar det nu längre tid för ämnet att tränga ner i berget, då det nu inte går direkt

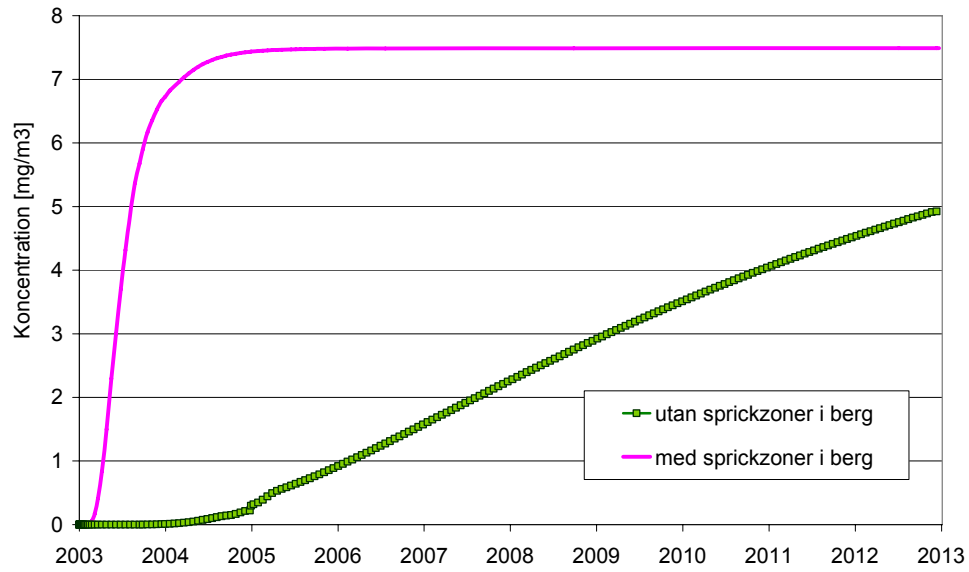
genom ett antal ”torra lager” i modellen (till följd av lägre konduktivitet där deponin är placerad). För det andra rör sig föroeningen direkt mot uttagsbrunnen, och följer inte längre sprickzonen.



Figur 6-30. Beräknad koncentration av källan i lager 7 (där vattenuttag görs). Till vänster visas resultat från beräkning med sprickzoner och till höger utan sprickzoner (i båda fallen beräknade med MODFLOW och konstant infiltration). I den övre delen visas resultat efter 2 år och i den nedre delen visas resultat efter 10 år. Skalan är i g/m^3 och källkoncentrationen är satt till 1 g/m^3 .

Detta ger sammantaget en mycket långsammare genombrottskurva vid uttagsbrunnen, vilket ses i figur 6-31. En jämviktssituation erhålls redan efter 1-2 år i fallet med sprickzoner, medan däremot fallet med homogent berg efter 10 år fortfarande inte nått högre än ca 65% av maxkoncentrationen i fallet med sprickzon.

Resultaten är inte unika, men visar ändå med full tydlighet hur viktigt det är att fånga principerna för de viktigaste transportvägarna vid spridningsmodellering.



Figur 6-31. Beräknad koncentration av källan vid vattenuttaget, dels med sprickzoner, dels utan hänsyn till sprickzoner i berget (dvs homogent berg). I båda fallen baserat på beräkning med MODFLOW och konstant infiltration.

7 Diskussion

7.1 Modellkomplexitet avseende ythydrologin

Naturen i sig själv är dynamisk och även om en modell i många hänseenden är en efterliknelse av naturen, så bidrar antagandet om stationaritet till förenklandet av strömningsbeskrivelsen. Under kalibreringen av strömningsmodellen underlättas dock arbetet av att inkludera de dynamiska förhållandena, om observationer uppvisar dynamik. Speciellt i ytnära avlagringar påverkas strömningsförhållandena av infiltrationsdynamiken och variationen i ”randförhållanden” i form av vattendrag, sjöar etc. Detta visas med all tydlighet av figur 6-29, där genombrottskurvan av lakvatten i en uttagsbrunn visas. Här påverkas strömningsförhållandena och därmed föroreningstransporten mot brunnen uppenbarligen av infiltrationsdynamiken.

I många fall är det dock ett acceptabelt antagande att de horisontella strömningsförhållandena, det vill säga gradient och hastighet, är stationära i den djupa grundvattenzonen, speciellt om det inte sker ändringar i utnyttjandet av grundvattenmagasinet i form av vattenuttag. Detta innebär att om en föroreningssituation i huvudsak kan beskrivas som transport i djupa grundvattenmagasin, så är en stationär beskrivning oftast en rimlig förenkling. Detta understöds av beräkningarna vid Härlövs Ängar (se figur 6-4), där den beräknade lakvattenkoncentrationen över en 100-årsperiod nästan är identisk vid 3 olika antaganden omkring infiltrationens dynamik. Likaså visar figur 6-13 att man i de djupa bergslagen i Forsmark har ungefär samma antal partiklar kvar under olika antaganden om infiltrationsförhållanden.

I de aktuella fallen, som studerats här, har spridningsprocesserna i ytvattnet ingen betydelse för problemställningen, och det har det nog sällan när föroreningstransporten i jord- och bergslager är en del av problemställningen i en riskbedömning. När en markförorening når ytvatten sker oftast en snabb uttransport, och det räcker då oftast att just bara konstatera huruvida föroreningen når ytvatten eller ej. Fall där det kan ha betydelse för riskbedömningen är vid ytnära föroreningskällor i områden med mycket blöta våtmarksliknande förhållanden, i myr och mossområden.

Rekommendationer

- ✓ Riskbedömning av föroreningsfall som domineras av transport i djupa grundvattenmagasin, kan beskrivas under antagande om stationära förhållanden.
- ✓ Riskbedömning av föroreningsfall som domineras av transport i marknära grundvattenmagasin bör inkludera dynamiska randförhållanden i form av "full ythydrologi".

7.2 Transport och spridningsprocesser

Partikelmodeller (PT) är per definition fria från numerisk dispersion och man inkluderar sällan dispersion i partikelmodeller. Om man gör det, är det ofta i form av en sk ”random walk”, som beskriver en slumpmässig rörelse. I advektions/dispersionsmodeller (AD) inkluderas ofta dispersion som en beskrivning av de spridningsprocesser som inte beskrivs direkt via heterogeniteter och dynamiska förhållanden. Fördelen med PT är att man får en precis simulering av föroreningsvägar, transport och uppehållstider, och som regel ger kortare simuleringstider än AD. Men å andra sidan kan man inte omedelbart bestämma koncentrationsnivåer och genombrottskurvor med PT. AD är lämpligt vid bestämning av genombrottskurvor, koncentrationsnivåer och kan som regel inkludera enkla reaktioner i transportbeskrivningen. I vissa fall kan även komplexa geokemiska reaktioner mellan flera ämnen inkluderas i transportbeskrivningen. Numerisk dispersion kan dock inte undgå, vilket kan störa koncentrationsberäkningarna, se t.ex. figur 6-23. Den numeriska dispersionen kan minskas genom att välja ett finare beräkningsnät, vilket alltså bör utvärderas vid AD-beräkningar. Speciellt gäller detta ofta i vertikal riktning, där den numeriska dispersionen kan bli mycket tydlig om man inte är uppmärksam, se t.ex. figur 6-7 och 6-8.

Sorption och nedbrytning av förorenande ämnen är processer som kan få avgörande betydelse för riskbedömningen, se t.ex. figur 6-5 och figur 6-27. I det senare fallet betyder sorptionen en fördröjning av genombrottskurvan på flera hundra år, liksom att formen på genombrottskurvan blir väsentligt flackare.

Modellens diskretisering kan också, som redan nämnts, ha stor betydelse för simuleringen av förorenings-spridning både vad angår utbredningshastighet och koncentrationsnivå. Ett grövre beräkningsnät ger upphov till större numerisk dispersion och därmed snabbare ankomst av föroreningsämnen till t.ex. en uttagsbrunn, mindre koncentrationsnivåer om det handlar om en tidsbegränsad

Rekommendationer

- ✓ Inledande partikelberäkningar kan rekommenderas för att snabbt få fram en bild av transportvägarna och uppehållstiderna.
- ✓ Var observant på numerisk dispersion vid val av beräkningsnät om en AD-modell används, speciellt i vertikal riktning.
- ✓ Inkludera om möjligt sorptions- och nedbrytningsprocesser i riskbedömningen.
- ✓ Inkludera information om sprickzoner i berg så långt som möjligt.
- ✓ Genomför känslighetsanalys av förhållanden som är osäkert bestämda.
- ✓ Den initiella placeringen av partiklar i en PT simulering kan ha betydelse för resultaten och en känslighetsanalys bör därför genomföras som analyserar denna osäkerhet.

föroreningskälla, och större områden som förväntas bli förorenade. Figur 6-6 till 6-8 visar betydelsen av varierande horisontell och vertikal diskretisering. Här ses också att modellen med det finaste beräkningsnätet inte är konservativ med hänsyn till bedömning av risk för förorening av t.ex. en uttagsbrunn, men mera precis i sin beskrivning. Om det hade varit tal om mera heterogena geologiska avlagringar, kunde konklusionen bli den helt motsatta, då transport i småskaliga högtransmissiva avlagringar kan förekomma i en modell med en fin diskretisering och därmed ge anledning till ett snabbare genombrott, medan en modell med grov diskretisering, och därmed medelvärdesbildade storskaliga parametrar, ger upphov till ett långsammare genombrott.

Det beskrivna fenomenet ovan framgår i figur 6-31, som också visar den stora betydelsen av sprickzoner. Här ses ett genombrott till 50% av den fulla styrkan efter några få månader vid tillfället med sprickzoner, jämfört med ca 7 år för tillfället utan sprickzoner. Ofta finns inte detaljerad kunskap om sprickzoners lägen och egenskaper. I dessa tillfällen bör man genomföra en känslighetsanalys för att värdera effekten av dessa osäkerheter vid riskbedömning.

På det hela taget bör en riskbedömning innehålla en känslighetsanalys av betydelsen av förhållanden som man inte känner i detalj, inklusive sprickzoner, dispersionsförhållanden, sorption, nedbrytning osv.

7.3 För- och nackdelar med modellkoncepten

Baserat på de genomförda beräkningarna har ett antal olikheter konstaterats mellan de två modellkoncepten MIKE SHE och Visual MODFLOW Pro. De viktigaste tas upp nedan:

- MIKE SHE:s möjlighet att beskriva ythydrologin på ett integrerat och dynamiskt sätt vid beräkning av strömnings- och transportförhållanden i grundvatten kan ha väsentlig betydelse vid en riskbedömning.
- De två modellsystemen har olika sätt att hantera torra beräkningsceller (som uppstått i områden där grundvattennivån är lägre än underkanten av ett beräkningslager, t.ex. i förbindelse med ett vattenuttag). Detta ger upphov till väsentliga olikheter i strömningsmönster i de testade modellerna och därmed i riskbedömningen. Ingen av modellerna hanterar detta tillstånd helt korrekt, men MIKE SHE:s sätt att hantera sådana celler (som i MIKE SHE kan

Rekommendationer

- ✓ MIKE SHE bör användas i situationer då ythydrologin har avgörande betydelse för riskbedömningen.
- ✓ Till enkla analyser är MODFLOW snabbare att arbeta med än MIKE SHE, men det omvända gäller då det handlar om komplexa, heterogena problemställningar.

bli våta igen och ingå i beräkningen av den vertikala transporten) ger sannolikt den mest korrekta bilden av verkligheten.

- Båda modellerna kan beräkna transport av lösliga ämnen i grundvatten genom användandet av tilläggsmoduler som kopplas till strömningsmodellen. MIKE SHE kan dessutom beräkna transport i andra komponenter och interaktionen mellan t.ex. omättad zon och grundvatten eller grundvatten och vatten på markytan.
- Båda modellerna kan beräkna enkla nedbrytnings- och sorptionsprocesser genom användandet av ytterligare tilläggsmoduler som dessutom hanterar flera ämnen samtidigt samt interaktion dem emellan.
- MIKE SHE's transportmodul innehåller, till skillnad från transportmoduler i MODFLOW, möjligheten att beräkna transport i system med både vattentransporterande och stagnanta porsystem genom en enkel diffusionsbeskrivning av ämnesutbytet mellan de båda porsystemen.
- Placeringen av partiklar i de två modellsystemen hanteras olika. I MIKE SHE kan man välja placering fritt inom en beräkningscell, medan man i MODFLOW alltid placerar partiklarna i mitten av cellen. I de flesta fall är dock detta troligen av mindre betydelse vid en riskbedömning. Vad som däremot har betydelse, med hänsyn till användarvänligheten, är att partiklarna inte kan distribueras horisontellt, över ett större område, lika enkelt och fritt i MODFLOW som i MIKE SHE.
- I MODFLOW kan resultaten efter en beräkning presenteras mycket snabbt och enkelt. I MIKE SHE är det inte helt lika snabbt, men modellsystemet erbjuder å andra sidan mycket större flexibilitet vid resultatpresentationen.
- I MODFLOW är det något mer besvärligt att beskriva heterogena förhållanden för hydrauliska egenskaper, vilket däremot är mycket enkelt i MIKE SHE. Rent generellt är det mer besvärligt att ange distribuerade indata helt fritt i MODFLOW. Ett område med mer homogena förhållanden inom respektive lager byggs dock upp mycket enkelt och snabbt med MODFLOW.

7.4 Slutsatser och förslag till fortsatt arbete

Denna (och andra) undersökningar har påvisat en rad svagheter med dagens modellkoncept som man bör ta hänsyn till i en konkret riskbedömning. Samtidigt bör det ske en vidare forskning inom vissa av de påpekade områdena för att utsluta (minska) osäkerheter kring dessa och/eller utveckla metoder och modeller som kan ta hänsyn till dem. Praktiska erfarenheter från mätningar och provtagning i fält bedöms också vara sparsamma, vilket delvis kan förklara i vissa stycken alltför förenklad hantering av problemen.

Svagheter och/eller problemställningar, som ofta förenklas i anknytning till riskbedömning och modellering av föroreningsspridning kan vara:

- användandet av kontinuerliga porösa system istället för spricksystem och/eller dubbla porositetssystem,
- användandet av enkla sorptions isotermer istället för dynamiska, geokemiska ekvationer,
- användandet av enkla betraktningar kring nedbrytning istället för avancerade geokemiska reaktionsbeskrivningar,
- användandet av stationära grundvattenmodeller istället för integrerade, dynamiska grund- och ytvattenkoncept för både strömning och transport,
- användandet av ekvationer för lösta ämnen istället för en komplex beskrivning av DNAPLS,
- användandet av ekvationer för lösta ämnen istället för att ta hänsyn till densitetsbetingad strömning,
- användandet av homogena/uniforma parametrar för alla variabler istället för att inkludera tidsmässig och rumslig variation. Detta inkluderar likaså dispersionsparametrar, som ofta antas vara konstanta, men som i verkligheten är en funktion av transportavståndet.

För att tillmötesgå ovanstående problemställningar bör det ske en generell vidareutveckling av modeller och metoder kombinerat med fältundersökningar och i konkreta projekt bör man i största möjliga omfattning ta hänsyn till ovanstående punkter. Det ska noteras att författarna till föreliggande rapport inte är uppdaterade med de allra senaste nationella och internationella forskningsresultaten, men att vi understryker betydelsen av fortsatt forskning inom ovanstående områden. Vi vill i detta sammanhang föreslå följande:

- Konkretisera och kvantifiera betydelsen av ovanstående svagheter, problemställningar och osäkerheter.
- Intensiva undersökningar av spridningen av reaktiva föroreningar och modellers förmåga att beskriva dessa, vilket innefattar:
 - undersökning av geokemiska processer i olika redoxmiljöer – kan dessa beskrivas genom enkla nedbrytningsekvationer?
 - undersökning av spricktransport och diffusionsprocesser i heterogena porositetssystem – hur stora fel uppstår då detta beskrivs med kontinuerliga porositetsmodeller?
 - undersökning av sorptionsförhållanden – kan dessa beskrivas genom användandet av enkla sorptionsformler?
- Vidarutveckling av reaktiva transportmodeller för att kunna beskriva mer komplicerade geokemiska processer.
- Utveckling och test av modeller för transportbeskrivning av DNAPLS.

För konkreta projekt som handlar om riskbedömning vill vi också föreslå att:

- Det utförs en kartläggning och riskbedömning av både föroreningskomponenter i källan och deras nedbrytningsprodukter.
- Redoxförhållanden försöker kartläggas/bedömas och övervägs i samband med nedbrytning av olika ämnen och deras nedbrytningsprodukter.
- Det genomförs en bedömning av vilka förhållanden och parametrar som har störst betydelse för riskbedömningens resultat samt en värdering av osäkerheten hos de styrande parametrarna.
- Det genomförs en känslighetsanalys, där de mest betydande förhållanden och parametrar varieras inom deras osäkerhetsområden.
- Att det grundligt rapporteras om vissa förhållanden utsluts i bedömningen och att innebörden av detta kvantifieras.

Med ovannämnda förhållanden i åtanke, understryks att modellprognoser av ämnestransport kan innehålla stora osäkerheter, speciellt när sorption, nedbrytning och/eller andra geokemiska reaktioner är inblandade. Modellerna bör därför användas med yttersta försiktighet och respekt – men utan försök står man svarslös.

8 Referenser

- Abbott, M.B., Bathurst, J.C., Cunge, J.A., O'Connell, P.E., and Rasmussen, J., 1986: *An introduction to the European Hydrological System - Système Hydrologique Européen, SHE, 2: Structure of a physically-based, distributed modelling system*. J. Hydrol., 87, 61-77.
- Appelo, C.A.J, Postma, D., 1996. *Geochemistry, groundwater and pollution*. A.A. Balkema, Rotterdam, Holland.
- Bear, J. and A. Verruijt, 1987: *Modeling Groundwater Flow and Transport*. D. Reidel Pub. Com., Dordrecht, Holland.
- Bioteknisk Jordrens, 2000. *Vig Specialdepot. Risikovurdering af de miljømæssige konsekvenser for vandmiljøet*. Rapport udarbejdet af DHI – Institut for Vand og Miljø.
- Boesten, J.J.T.I. & van der Linden, A.M.A., 1991. *Modelling the influence of sorption and transformation on pesticide leaching and persistence*. J. Environ. Qual., 20, 425-435.
- Burnett, R.D. and E.O. Frind, 1987: *Simulation of contaminant transport in three dimensions. 2. Dimensionality Effects*. Water Resour. Res., 23(4), 695-705.
- Camp Dresser and McKee, 2001. *Evaluation of Integrated Surface Water and Groundwater modeling tools*. CDM Inc. Water Resources Research and Development Program, February 2001. (<http://www.dhisoftware.com/mikeshe/Reviews>)
- Council, G.W. 1999. *A lake package for MODFLOW (LAK2)*. Documentation and user's manual version 2.2. HSI GEOTRANS
- DHI Software, 2003. *MIKE SHE Users Guide*. DHI Water and Environment, DK-2970 Hørsholm, Denmark.
- ESI, 2004. *Command reference for Groundwater Vistas, version 4*. Environmental Simulations, Inc., Reynolds, PA 17569, USA.
- Fetter, C.W. 1993. *Contaminant Hydrogeology*. Macmillan Pub. Co.
- Freeze, R.A., Cherry, J.A., 1979: *Groundwater*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J.
- Gustafsson, L.G., Refsgaard, A., Sabel, U., 2006: *Datormodeller för förorenings-spridning, fas 1*. Hållbar Sanering. Naturvårdsverket, Rapport 5534. Februari 2006.
- Harrar, W.G. och Henriksen, H.J., 1996. *Groundwater model for Sneum-Bramming-Holsted å. Aquifer System: setup and calibration*. Rekvirent Esbjerg kommune, forsyningsvirksomhederne och Ribe amtskommune. Mars 1996.

- Henriksen, H.J., Troldborg, L.T., Knudby, C.J., Dahl, M., Nygaard, P., Jakobsen, P.R. och Rasmussen, P., 1998. *National Vandressource Model. Sjælland, Lolland, Falster och Møn*. GEUS rapport 1998/109. www.vandmodel.dk
- Hill MC, 1998. *Methods and guidelines for effective model calibration*. US Geological Survey, Water Resources Investigations Report 98-4005.
- Kaiser-Hill, 2001. *Model Code and Scenario Selection Report*. Site-Wide Water Balance Rocky Flats Environmental Technology Site. Kaiser-Hill Company, February, 2001. (<http://www.dhisoftware.com/mikeshe/Reviews>)
- Konikow, L.F. and D.B. Grove, 1977: *Derivation of Equations describing Solute Transport in Groundwater*, US.G.S. Water Resour. Invest. 77-19.
- Kristianstads kommun, 2000: *Kristianstads vattenförsörjning. Förutsättningar – Möjligheter – Konsekvenser*. Sammanfattande rapportering av projekt om de geohydrologiska förutsättningarna på Kristianstadsslätten, genomfört på uppdrag av C4-Teknik, Kristianstads kommun, 1995-2000.
- Laase, A.D., Rumbaugh, J.O. and Anderman, E.A., 2000. *Design, optimization and evaluation of the Kansas city plant interception system*. Report prepared by Oak Ridge National Laboratory, Grand Junction, Colorado for Environmental Restoration Program at the Kansas City Plant, U.S. Department of Energy. Kansas City, Missouri. Februari 2000.
- Lindberg, J., Olofsson, B., 1997: *Risk för salt grundvatten – en studie med hjälp av GIS över delar av Norrtälje kommun*. Rapport. KTH, Institutionen för Anläggning och Miljö, Avdelningen för Mark och Vattenresurser.
- Maidment, D.R. (editor), 1992: *Handbook of Hydrology*. McGraw-Hill Inc.
- Madsen, H., 2003. *Parameter estimation in distributed hydrological catchment modelling using automatic calibration with multiple objectives*. Adv. in Water Resources 26.
- Middlemis, H., 2000. *Draft groundwater flow modelling guideline*. Murray-Darling Basin Commission. Aquaterra Consulting Pty Ltd. Western Australia. Project No. 125. Juli 2000.
- Miljøstyrelsen, 1998. *Oprydning på forurenede lokaliteter – Hovedbind*. Vejledning fra Miljøstyrelsen (Danmark), no. 6, 1998.
- Miljøstyrelsen, 1998. *Oprydning på forurenede lokaliteter – Appendikser*. Vejledning fra Miljøstyrelsen (Danmark), no. 7, 1998.
- Parkhurst, D.L. och Appelo, C.A.J., 1999. *User's guide to PHREEQC (Version 2)*. Water Resources Investigations Report 99-4259, USGS.
- Prudic, D.E., 1989. *Documentation of a Computer Program to Simulate Stream-Aquifer Relations Using a Modular, Finite-Difference, Ground-Water Flow Model*. Open-File Report 88-729, U.S. Geological Survey, Carson City, Nevada.

- Rubin, Y., 2003. *Applied Stochastic Hydrogeology*. Oxford University Press. (http://www.oup.com/pdf/019513804X_01.pdf)
- Rumbaugh, J. 1999. *Groundwater Vistas Electronic Manual for MODFLOW Packages*. Environmental Simulations, Inc
- Scheidegger, A.E., 1961: *General theory of dispersion in porous media*. Jour. of Geophys. Research, Vol. 66, no. 10.
- Singh, V.P. (editor), 1995. *Computer Models of Watershed Hydrology*. Water Resources Publications, Colorado, USA.
- Svensson U, Ferry M, 2004. *DarcyTools, Version 2.1. User's guide*. SKB R-04-20, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Svensson U, Kuylenstierna H-O, Ferry M, 2004. *DarcyTools, Version 2.1. Concepts, methods, equations and demo simulations*. SKB R-04-19, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- SKB, 2004a. *Preliminary site description. Forsmark area – version 1.1*. SKB R-04-15, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- SKB, 2004b. *Groundwater flow and radionuclide transport modelling using CONNECTFLOW in support of the SR-Can assessment*. SKB R-04-61
- SKB, 2005. *Near-surface hydrogeological model of Forsmark – Open repository and solute transport applications*. SKB R-05-18. Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Soilrem, 2003. *Risikovurdering for Vig Specialdepot. Beregning af tilladelige udslip og modelberegninger for depot*. Rapport udarbejdet af DHI – Institut for Vand og Miljø.
- Thunvik, R., Sokrut, N., 2002. *ECOFLOW – ett verktyg för integrerad modellering av yt- och grundvatten i avrinningsområden*. Grundvatten nr 1/02.
- Vikström M, 2005. *Modelling of soil depth and lake sediments – An application of the GeoEditor at the Forsmark site*. SKB R-05-07. Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Waterloo Hydrogeologic, 2004. *Visual MODFLOW Pro reference manual*. Waterloo Hydrogeologic, Inc., Waterloo, Ontario, Canada.
- US Army Corps of Engineers and South Florida Water Management District, 2002. Central and South Florida Project. *Comprehensive Everglades Restoration Plan. B2 Hydraulics – Final Model Evaluation Report*. EAA storage reservoirs – Phase 1. (<http://www.dhisoftware.com/mikeshe/Reviews>)

Bilaga 1 - Ekvationer för flöde och transport av lösliga ämnen

1 Introduktion

Litteratur och uppsatser i denna tekniska bilaga beskriver den fundamentala teorin kring grundvattenflöde och transport av lösliga ämnen samt väl beprövade och tillämpade partiella differentialekvationer som beskriver flöde och transport. Endast en mycket kort sammanfattning av ekvationer och möjliga lösningstekniker beskrivs i denna tekniska bilaga.

2 Grundvattenflöde

Den styrande ekvationen för tredimensionellt mättat flöde i mättad porös media är enligt följande:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) - Q = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad \text{Ekv. 1}$$

där

K_{xx} , K_{yy} , K_{zz} är hydraulisk konduktivitet längs x-, y- och z-axlarna som antas att vara parallella till de huvudsakliga axlarna för hydraulisk konduktivitet

h är piezometrisk stighöjd

Q är flöde per volymsenhet för att representera tillskott av vatten och utflöden

S_s är specifik magasinskoefficient definierad som volymen vatten som frigörs från magasinet vid en tryckförändring på 1 m i en kubikmeter av det porösa materialet.

Två speciella egenskaper hos denna enkla **paraboliska** ekvation bör noteras. Ekvationerna är icke-linjära vid förhållanden med fritt flöde (öppen akvifer) beroende på närvaron av en fri grundvattenyta. Magasinskoefficienten är ingen konstant utan kommer att pendla mellan två värden, ett värde för bundet flöde/grundvatten (sluten akvifer) och ett värde för fritt flöde/grundvatten (öppen akvifer). Abrupta förändringar mellan de två storleksordningarna kan alltså förväntas för denna parameter.

Denna ekvation omvandlas typiskt till en serie av finita differens- eller elementekvationer i grundvattenmodeller. Den finita differensapproximationen som är baserad på en vattenbalans för en cell (finit volym) leder till en serie algebraiska ekvationer:

$$q_{p,i-1/2} + q_{p,i+1/2} + q_{p,j-1/2} + q_{p,j+1/2} + q_{p,k-1/2} + q_{p,k+1/2} - q_{out} = \frac{\Delta w}{\Delta t} \quad \text{Ekv. 2}$$

där

q_p är potentiellt flöde in i cellen i,j,k

q_{out} är flöde ut från cellen

Δw är magasinskapacitet.

Den finita differensekvationen består av potentialtermer, källor och sänktermer och magasinstermer. Alla flödestermerna är per tidsenhet. Flödeskomponenterna anges av:

$$q_x^{n+1} = C_{ij} \Delta h^{n+1} \quad \text{Ekv. 3}$$

där

C_{ij} är konduktansen mellan nod i och någon av de närliggande noderna j i horisontalriktningen

Δh är tryckskillnaden mellan nod i och j.

Beräkning av konduktansen C kan vara ganska besvärlig och beror på de hydrauliska konduktiviteterna och (mättade) tjockleken hos de involverade noderna. Ett antal olika ekvationslösare finns tillgängliga, alla med sina fördelar och nackdelar. En av de mest tillämpade är PCG (Preconditioned Conjugent Gradient), som används i de olika MODFLOW-koderna samt MIKE SHE.

Den horisontella konduktansen härrör från det harmoniska medelvärdet av konduktiviteten och det geometriska medelvärdet av lagertjockleken.

$$C_{I_{i-1/2}} = \frac{K_{i-1,j,k} K_{i,j,k} (\Delta z_{i-1,j,k} + \Delta z_{i,j,k})}{(K_{i-1,j,k} + K_{i,j,k})} \quad \text{Ekv. 4}$$

där

K är hydraulisk konduktivitet

Δz är mättad lagertjocklek.

Den vertikala konduktansen mellan två celler beräknas som en viktad seriekoppling hos den hydrauliska konduktiviteten. Konduktansen beräknas alltid från mitten av lager k till mitten av lager $k+1$.

$$CK = \frac{\Delta x^2}{\frac{\Delta z_k}{2K_{z,k}} + \frac{\Delta z_{k+1}}{2K_{z,k+1}}} \quad \text{Ekv. 5}$$

där

Δz är lagertjockleken.

Under slutna förhållanden är tryckskillnaden helt enkelt tryckskillnaden mellan motsvarande noder. Ett specialfall uppstår när öppna celler är närvarande och korrektionstermer måste introduceras.

Magasinskapaciteten beräknas av:

$$\frac{\Delta w}{\Delta t} = \frac{S2(h^n - z_{top}) + S1(z_{top} - h^{n-1})}{\Delta t} \quad \text{Ekv. 6}$$

där

n är tidssteg

$S1$ är magasinskapaciteten vid starten av iterationen vid tidssteg n

$S2$ är magasinskapaciteten vid iteration M

För slutna celler anges magasinskapaciteten som

$$S = \Delta x^2 \Delta z S_{art} \quad \text{Ekv. 7}$$

och för öppna celler anges magasinskapaciteten som

$$S = \Delta x^2 S_{free} \quad \text{Ekv. 8}$$

Källor och sänktmer inkluderar allt utbyte mellan grundvattenzonen och omgivningarna. I t.ex. MIKE SHE, som representerar en integrerad ytvatten- och grundvattenmodell, är följande källor och sänktmer relevanta:

- pumpning
- utbyte till vattendrag
- utbyte till markyta
- återföring
- transpiration
- dränering

Dessa termer beror också på grundvattentrycket och andra olika tillståndsvariabler, som formar en komplex serie av ekvationer som ska lösas simultant. Efter att ha specificerat de initiala förhållandena och randförhållandena, kan dessa ekvationer lösas iterativt genom att beräkna trycket i alla noder i varje modellager.

3 Flöde i den omättade zonen

Flöde i den omättade zonen beskrivs ofta genom Richards ekvation. Den relaterar tryck, vatteninnehåll och flöde och kan uttryckas enligt följande:

$$C \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \frac{\partial K}{\partial z} - S \quad \text{Ekv. 9}$$

där

ψ är trycket

K är hydraulisk konduktivitetsfunktion (beroende på vatteninnehåll)

S är källa/sänkterm (rotens upptag av vatten)

$C = \frac{\partial \theta}{\partial \psi}$ är jordens vattenkapacitet som relaterar vatteninnehåll och tryck i jorden.

Den styrande ekvationen för flöde i den omättade zonen behöver information kring två hydrauliska ekvationer; funktion för hydraulisk konduktivitet $K(\theta)$ och vattenbindningskaraktäristisk pF-kurva $\psi(\theta)$.

Den hydrauliska konduktiviteten minskar kraftigt med att vatteninnehållet θ minskar från mättnad. Detta är inte överraskande eftersom den totala tvärsnittsarean för flödet minskar allt eftersom porerna fylls med luft. När en mindre del av porsystemet är tillgängligt att transportera flöde, blir flödet mer invecklat. Andra anledningar kan förklara den starka minskningen, t.ex. en ökning i vattnets viskositet när adsorptionskrafterna dominerar i relation till kapillärkrafterna.

En genomgång av olika metoder för att förutspå konduktivitetsfunktionen återfinns i litteraturen.

Förhållandet mellan vatteninnehåll θ och tryckhöjd ψ beskrivs i en pF-kurva. Jordens sammansättning, gällande textur och struktur, definierar generellt denna kurva. Även det organiska innehållet kan ha en påverkan på detta förhållande. En karaktäristisk egenskap hos pF-kurvan är att tryckhöjden ψ minskar ganska snabbt

med vatteninnehåll. Hystereseffekter kan uppstå och istället för att vara ett envärdesbaserat förhållande så består $\psi(\theta)$ -relationen av en rad kurvor. Jordens historik gällande uttorkning och blötperioder bestämmer den aktuella kurvan.

Richards ekvation löses ofta genom användandet av en fullt implicit formulering och approximeringar av retention och hydrauliska förhållanden.

4 Transport i grundvatten

Transporten av lösliga ämnen i den mättade zonen styrs av ekvationen för advektion-dispersion, som för porösa medium med uniform porositetsfördelning formuleras enligt följande:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x_i} (c v_i) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) + R_c \quad i, j = 1, 2, 3 \quad \text{Ekv. 10}$$

där

c är koncentration av det lösliga ämnet

R_c representerar källor eller sänkor

D_{ij} är dispersionskoefficient (tensor)

v_i är hastighet (tensor)

Den advektiva transporten bestäms av vattenflöden som beräknas av en modell för grundvattenflöde. För att kunna bestämma grundvattenhastigheten, divideras grundvattenflödet för en viss tvärsnittsarea med den effektiva porositeten:

$$v_i = \frac{q_i}{\theta} \quad \text{Ekv. 11}$$

där

q_i är grundvattenflödet per tvärsnittsarea

θ är den effektiva porositeten.

Den matematiska formuleringen av dispersion av lösliga ämnen följer de traditionella formuleringarna generaliserade till tre dimensioner. Denna formel utvecklas under antagandet att dispersionskoefficienten är en linjär funktion av medelhastigheten hos de lösliga ämnena. I det tredimensionella fallet med godtycklig flödesriktning i en anisotropisk akvifer, innehåller dispersionstensor D_{ij} nio element som beror på 36 dispersiviteter. Dispersionstensorn förenklas ofta till följande:

Ekv. 12

$$\begin{aligned}
 D_{xx} &= [\alpha_T (V_y^2 + V_z^2) + \alpha_L V_x^2] / U \\
 D_{yy} &= [\alpha_T (V_x^2 + V_z^2) + \alpha_L V_y^2] / U \\
 D_{zz} &= [\alpha_T (V_x^2 + V_y^2) + \alpha_L V_z^2] / U \\
 D_{xy} &= (\alpha_L - \alpha_T) V_x V_y / U = D_{yx} \\
 D_{xz} &= (\alpha_L - \alpha_T) V_x V_z / U = D_{zx} \\
 D_{yz} &= (\alpha_L - \alpha_T) V_y V_z / U = D_{zy}
 \end{aligned}$$

där

α_L, α_T är longitudinella respektive transversella dispersiviteter för det porösa mediet.

Dispersionstermen i ekvationen för advektion-dispersion står för spridandet av lösliga ämnen som inte är inkluderad i de simulerade medelflödes hastigheterna dvs. advektionen. Därför är det tydligt att desto noggrannare man beskriver den rumsliga variabiliteten i den hydrologiska regimen och om cellnätet är tillräckligt fint (dvs. variationerna i den advektiva hastigheten) så behöver man tillämpa de mindre dispersiviteter i modellen. Nyligen genomförda forskningsprojekt, både analytiska och experimentella, har bestämt ett förhållande mellan den rumsliga variabiliteten hos hydrogeologiska parametrar och dispersiviteter. Trots detta är det fortfarande svårt att tillgå tillräcklig kunskap om den rumsliga variabiliteten hos t.ex. hydraulisk konduktivitet för att bestämma makrodispersiviteter applicerbara i modeller för transport av lösliga ämnen.

Detta är den generella ekvationen för dispersionskoefficienter i ett isotropiskt medium för godtycklig riktning av medelflöde. Om medelflödesriktningen sammanfaller med en av axlarna i ett Kartesiskt koordinatsystem, förenklas uttrycket för dispersionskoefficienter ytterligare (t.ex. om V_y och V_z är lika med noll, då kommer även D_{xy} , D_{xz} och D_{yz} att vara lika med noll). Vissa av de studerade modellerna för transportsimulering av lösliga ämnen använder sig av mer komplexa formuleringar av dispersionstensorn.

Käll/sänktermen R_c kan innehålla förändringar i koncentration beroende på geokemiska reaktioner mellan de lösliga ämnena och jordmatrisen eller kemiska reaktioner mellan olika lösliga ämnen (vid simulering av flera olika ämnen). I modeller för transport av lösliga ämnen beskrivs ofta sådana reaktioner i tilläggsmoduler som beräknar sekventiellt tillsammans med advektions-dispersionsmodellen. Geokemiska reaktioner beskrivs ofta av makroparametrar såsom retardationskoefficienter och nedbrytningskonstanter. Sådana parametervärden återfinns ofta i litteraturen för specifika ämnen under olika jordförhållanden, men kan behöva kalibreras om koncentrationsmätningar har utförts. Ofta kan K_d och $\log K_{ow}$ användas för att bestämma retardationsfaktorer.

Ett stort antal metoder används för att lösa advektions-dispersionsekvationen för transport av lösliga ämnen i grundvatten. Dessa metoder sträcker sig från fullt explicita via egenskapsmetoder till fullt implicita metoder.

5 Transport i den omättade zonen

Transport av lösliga ämnen i den omättade zonen sker både i jordmatrisen och i makroporerna. För jordmatrisen formuleras advektion-dispersionsekvationen enligt följande:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial z} (c v_z) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial c}{\partial z} \right) + R_c \quad \text{Ekv. 13}$$

där

c är koncentration av det lösliga ämnet

R_c är käll- eller sänktterm

D är dispersionskoefficienten

v_z är hastighet.

Den advektiva transporten bestäms av vattenflödet som beräknas i en modell för den omättade zonen. Eftersom vattenflödet antas vara vertikalt så begränsas även transporten av upplösta ämnen till vertikal riktning. För att bestämma hastigheten v_z , divideras flödet med vatteninnehållet θ :

$$v_z = \frac{q}{\theta} \quad \text{Ekv. 14}$$

Den matematiska formuleringen av dispersionen av lösliga ämnen följer formuleringen för grundvattenflöde, men med ett linjärt förhållande mellan dispersionskoefficienten och perkolationshastighet (begränsad till en dimension). För omättat flöde beror (på ett okänt sätt) dispersiviteten på vatteninnehållet, vilket ofta negligeras.

Olika lösningstekniker kan appliceras för att bestämma transport av lösliga ämnen i den omättade zonen.

6 Källor och sänkor

Både i den omättade zonen och i grundvattnet inkluderar ekvationen för advektion-dispersion en källa/sänktterm. Denna term kan representera både en fysisk källa eller en sänka i form av t.ex. återföring eller uppumpning av vatten av en viss koncentration men kan också stå för kemiska och/eller geokemiska/biogeokemiska

reaktioner. Sådana reaktioner påverkar transportprocessen och kontrollerar ofta helt transporten och destinationen av en förorening.

6.1 Transport i spruckna media

Transport i spruckna media involverar ofta snabb transport i sprickor och diffusion in och ut ur den solida matrisen, som har betydligt högre porositet än sprickorna. En genombrottskurva har ofta en väldigt lång svans.

Om vattenflöde och advektiv transport av lösliga ämnen antas vara koncentrerad endast i den mobila fasen (sprickor) och transport av lösliga ämnen mellan mobila och immobilas faser helt antas vara en diffusionsprocess. Då beskriver källa/sänkt termen (R_c) i den advektiva-dispersionsekvationen en massdiffusion mellan mobila och immobilas domäner i den mättade zonen. Detta formuleras enligt följande:

$$R_c = \beta_s (c_m - c_{im}) \quad \text{Ekv. 15}$$

där

β_s är en empirisk massöverföringskoefficient

c_m är den lösta koncentrationen i den mobila domänen

c_{im} är den lösta koncentrationen i den immobilas domänen.

Det ska noteras att denna ekvation bara är tillämpbar om det råder uniforma förhållanden med hänsyn till den immobilas koncentrationen. Med detta menas att ämnet blandas och sprids ut i hela den immobilas zonen. Detta gäller endast små partiklar och små immobilas zoner.

6.2 Sorptionsprocesser

Sorptionsprocesser täcker ett antal geokemiska och kemiska reaktioner såsom adsorption av lösta ämnen till akvifermaterialens yta genom elektrostatiska krafter, så kallad "cation exchange". Om dessa processer sker tillräckligt snabbt jämfört med hastigheten på vattenflödet, då kan de beskrivas av en jämviktssorptionsisoterm.

Olika jämviktssorptionsisotermerna har identifierats vid analys av resultat från experiment från olika sediment, jord och bergarter, se t.ex. Fetter, 1993. Tre av de mest tillämpade isotermerna är den linjära, Freundlich och Langmuir "equilibrium sorption isotherms".

Sorptionsprocesser som inte sker tillräckligt snabbt jämfört med hastigheten på vattenflödet, måste beskrivas med en kinetisk sorptionsisoterm. Matematiskt kan de tre jämviktssorptionsisotermerna utökas att inkludera en kinetiskt kontrollerad sorptionsprocess så att en viss del av den sorberade materialen förflyttas till en annan del av jordmaterialet.

Den linjära sorptionsisotermen är matematiskt sett den enklaste isotermen och kan beskrivas som ett linjärt förhållande mellan mängden av jordmaterialet

sorberade lösliga ämnen och vattenkoncentrationen av lösningen:

$$c^* = K_d c \quad \text{Ekv. 16}$$

där

c^* är koncentrationen av det adsorberade ämnet

K_d är känd som distributionskoefficienten.

Distributionskoefficienten relateras ofta till det organiska innehållet i jorden genom en experimentellt framtagen parameter (K_{oc}) som kan användas att beräkna K_d - värdena.

$$K_d = f_{oc} K_{oc} \quad \text{Ekv. 17}$$

där

f_{oc} är det organiska kolinnehållet.

En vanligt använd term är retardationsfaktorn (R) – som är förhållandet mellan – hastighet på vattenflöde (v) och medelhastigheten hos lösningen (v_c) – kan anges som:

$$R = \frac{v}{v_c} = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} K_d \quad \text{Ekv. 18}$$

Freundlich sorptionsisoterm är en mer generell jämviktsisoterm, som beskriver ett icke-linjärt förhållande mellan mängden av adsorberade ämnen i jordmaterialet och vattenkoncentrationen av lösningen:

$$c^* = K_f c^N \quad \text{Ekv. 19}$$

där

K_f N är konstanter.

Både den linjära och Freundlich isoterm lider av samma fundamentala problem att det inte finns någon övre gräns gällande mängden av lösliga ämnen som kan sorberas. I naturliga system hade man förväntat sig att där finns ett finit antal platser där sorption kan ske i jordmaterialet, dvs. det finns en övre gräns gällande mängden materia som kan adsorberas.

”The Langmuir sorption isotherm” tar hänsyn till att det finns ett begränsat antal adsorptionsplatser i jordmaterialet. När dessa utrymmen är fyllda, upphör

adsorptionen. Isotermen anges ofta enligt följande:

$$\frac{c}{c^*} = \frac{I}{\alpha\beta} + \frac{c}{\beta} \quad \text{Ekv. 20}$$

eller

$$c^* = \frac{c\alpha\beta}{I + \alpha c} \quad \text{Ekv. 21}$$

där

α är en adsorptionskonstant som är relaterad till bindningsenergi

β är maximala mängden av lösliga ämnen som kan adsorberas av jordmaterialet.

6.3 Nedbrytning

Biologisk nedbrytning, radioaktiv nedbrytning eller andra slag av dämpning av lösliga ämnen, förenklas ofta matematiskt till en degraderingsprocess av första ordningen med en exponentiell minskning av koncentrationen med en viss halveringstid. Den matematiska modellen för nedbrytning anges vanligtvis enligt följande:

$$\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{\text{reac.}} = \lambda c \quad \text{Ekv. 22}$$

där

λ är första ordningens nedbrytningskonstant.

$$\lambda = \frac{-\ln 2}{t_{1/2}} \quad \text{Ekv. 23}$$

där

$t_{1/2}$ är halveringstiden för ämnet.

För att överkomma vissa av svårigheterna vid förenkling av komplexa biologiska och kemiska reaktioner, så kan nedbrytningen göras beroende av jordens vatteninnehåll och jordens temperatur, se t.ex. Boesten och van der Linden (1991).

6.4 Växtupptag

Växternas upptag av lösliga ämnen kan beskrivas av en empirisk koncentrationsfaktor. Denna faktor bestämmer till vilken utsträckning det tillgängliga ämnet tas upp av växter. Faktorn tar även hänsyn till rotresistansen för att absorbera lösliga ämnen av olika storlek och kemisk karaktär. Matematiskt kan detta beskrivas enligt följande:

$$R_r = f_c S_r c \quad \text{Ekv. 24}$$

där

R_r	är sänktermen i ekvationen för advektion-dispersion
f_c	är koncentrationsfaktorn
S_r	är rotens vattenupptag
c	är vätskekoncentrationen.

6.5 Monod-liknande reaktioner

Nackdelen med första gradens beskrivning är att det inte finns någon begränsning gällande nedbrytningshastigheten; desto högre koncentration, desto högre hastighet. Den monod-liknande nedbrytningsbeskrivningen tar hänsyn till att detta inte alltid är ett faktum. Detta beskrivs genom en reduktionsfaktor R_{monod} som en funktion av ämnets koncentration, c , enligt följande ekvation:

$$R_{\text{Monod}} = \frac{k_0 c}{K_h + c} \quad \text{Ekv. 25}$$

där

k_0	är en konstant
K_h	är en "halvmättnadskonstant"

Ekv. 25 är ett så kallat "mixed-order" uttryck, då den i det närmaste beskriver första gradens oberoende av c om $c \ll K_h$ och en noll-gradens reaktion då $c \gg K_h$.

Konstanten k_0 anges för en given mängd mikroorganismer. Mängden mikroorganismer är dock inte konstant, utan kan variera kraftigt i tid och rum. Av detta och andra skäl, bör användandet av biologiska och andra reaktiva modeller för prognos av föroreningsspridning ske med stor försiktighet, då de ofta innebär stora osäkerheter.

6.6 Geokemiska och övriga reaktioner

Många andra kemiska, geokemiska eller biokemiska reaktioner kan förekomma under transport av lösliga ämnen i marken. Kopplingar till en reaktiv modell såsom

PHREEQC (Parkhurst & Appelo, 1999) förekommer ibland. PHREEQC är ett datorprogram framtaget av USGS (United States Geological Survey) för att modellera vattenkemiska och geokemiska reaktioner. PHREEQC är baserad på en modell för parning av joner i en lösning vatten och inkluderar bland annat rutiner för beräkning av jämviktsreaktioner, kinetiskt styrda reaktioner, jonbyte, och interaktion mellan flytande fas, fast fas och gasfas.

Beräkningarna kan antingen genomföras i batch, eller som 1D transportberäkningar. Batchmodellen av PHREEQC kan kopplas till transportmodellen för lösning av komplicerade kemiska problemställningar, men problemet är ofta att PHREEQC på grund av sin stora komplexitet kräver en stor mängd av inputparametrar, som sällan finns tillgängliga.

Bilaga 2 - Begrepp, termer och förkortningar

Begrepp och termer

Akvifär	En vattenmättad geologisk formation som för betydande mängder vatten
Akvitard	Geologisk formation av lägre genomsläpplighet i en stratigrafisk sekvens
Artificiell vattenbildning	Konstgjord återföring av vatten, se även Grundvattenbildning
Beräkningselement	Beräkningscell
Cellnät	En modell utgörs av ett nät av celler
Cellstorlek	Cellens storlek (x, y, (z-led)) ger cellens/modellens upplösning
Dendritisk	Trädlikt förgrenade linjer
Densitet	Täthet
Deterministisk	Motsats till stokastisk
Deterministisk modell	se Deterministisk, identiska indata ger alltid samma resultat
Diffusion	Spridning av ämnen pga. skillnad i koncentration mellan olika områden
Dispersion	Spridning av ämnen pga. processer, som inte beskrivs vid advektion, t.ex. pga. heterogeniteter, som inte tas med i den deterministiska strömningsbeskrivningen
Distribuerad modell	En modell med en rumslig indelning i beräkningselement, tar m.a.o. hänsyn till den geografiska fördelningen av egenskaperna i systemet
Effektiv porositet	Är skillnaden mellan porositet och fältkapacitet, benämns magasinskoefficient i en öppen akvifer

Evaporation	Avdunstning från våta ytor och mark
Evapotranspiration	Summan av evaporation och transpiration
Finit differensmetod	En matematisk metod för att approximera partiella differentialekvationer baserade på ett reguljärt (t.ex. rektangulärt) nät, så att de kan lösas numeriskt
Finit elementmetod	En matematisk metod för att approximera partiella differentialekvationer baserade på ett irreguljärt (t.ex. triangulärt) nät, så att de kan lösas numeriskt
Finit volymsmetod	En matematisk metod för att approximera partiella differentialekvationer baserade på ett irreguljärt rumsligt nät, så de kan lösas numeriskt
Flödeslinje	Grundvattnets flödesriktning och bana kan illustreras med flödeslinjer
Flödesfält	Grundvattnets flödesriktningar vid en specifik tidpunkt, flera flödeslinjer sammanbinds till ett nät/fält
Fysiskt baserad modell	En modell baserad på i fält uppmätt indata
Grundvatten	Det vatten som helt fyller jord- och berggrundens porer eller sprickor och som är rörligt genom inverkan av gravitation eller tryckförändringar
Grundvattenbildning	I inströmningsområden sker påfyllnad av grundvatten, en så kallad vattenbildning
Grundvattenmodell	En modell som beräknar/simulerar processer som styr grundvattnets strömning/flöde
Hydraulisk konduktivitet	Hastigheten av den vattenmängd som per tidsenhet passerar en tväryta av en jordpelare, där den hydrauliska gradienten =1, m.a.o. jordens förmåga att leda vatten
Impermeabel	Ogenomsläpplig, ogenomtränglig, tät (=vattentät)
Infiltration	Vattnets inträngande i marken

Inströmningsområden	Område i terrängen där grundvatten strömmar in i grundvattenzonen, se även Grundvattenbildning
Interpolering	Vid interpolation söker man okända värden som ligger mellan kända värden
Klumpad modell	Rumsligt förenklad modell där det studerade systemet behandlas som en enhet
Konceptuell modell	Begreppsmässig modell
Källor/sänkor	En fysisk källa eller sänka kan representeras av uppumpning/uttag eller återföring av vatten samt kemiska och/eller geokemiska/biogeokemiska reaktioner
Känslighetsanalys	Modellberäkningar/simuleringar som utförs för att identifiera känsliga parametrar (dvs. parametrar med stor påverkan på modellresultat och noggrannhet) samt ta fram intervall/spann gällande resultat beroende på osäkerhet i parametervärden
Magasinskoefficient	Uttrycker hos en akvifer förhållandet mellan magasinändring och vattenståndsändring, dvs. är lika med den volymandel vatten som dräneras vid avsänkning av grundvattenytan
Makroporer	Strukturorsakade porer (bildas företrädesvis i den omättade zonen), med mer än någon millimeters diameter (dvs. större än normala mikroporer), som kan ha stor betydelse för vattnets uppehållstider i jorden och kemiska reaktioner
Markvatten	Det vatten som finns i jorden ovanför grundvattenytan
Markvattenzon	Vattenmagasin ovanför grundvattenytan
Matematisk modell	Matematiska uttryck och logiska påståenden kombinerade för att simulera beteendet för ett givet system
Mjukvara	Datorprogram

Modell	En modell är en återrepresentation av verkligheten som beräknar/simulerar en eller flera verkliga eller hypotetiska processer och prognostiserar ett eller flera resultat
Modellberoende (in)data	(In)data som är beroende av modellens utbredning/avgränsning och upplösning
Modellkalibrering	Justering av en modells parametrar för att beräkningsresultaten ska överensstämma med uppmätta data/värden (både rumsligt och tidsmässigt)
Modellnät	se Cellnät
Modelloberoende (in)data	(In)data som är oberoende av modellens utbredning/avgränsning och upplösning
Modellrand	se Rand och Randförhållande
Modellsystem	Programverktyg för modellering
Mättad zon	Grundvattenzon
Mättat flöde	Grundvattenflöde
Nod	Beräkningspunkt i modellen
Nästlad modell	En modell med avvikande (finare) upplösning inkluderad inuti en annan modell
Omättad zon	Zon mellan marknivå och grundvattenyta, där markens porer innehåller såväl luft som vatten
Omättat flöde	Flöde i den omättade zonen
Partikelspårning	Baserat på modellberäkningar av flöde/strömning kan partiklars bana spåras genom en modell utifrån deras individuella utsläppspunkter
Permeabilitet	Genomsläpplighet, dvs. hydraulisk konduktivitet vid mättnad
Porositet	Bestämmer möjlig volym vatten per volymsenhet sediment
Rand	En modells yttre avgränsning

Randförhållande	De (externa) förhållande som råder vid modellens yttre gränser och som styr in- och utflöde över modellranden, obs. att man med ett internt randförhållande avser t.ex. uppumpning eller återföring av grundvatten inuti en modell.
Salinitet	Salthalt
Sluten akvifer	En avgränsad akvifer med en grundvattenyta särskild (ofta under övertryck) från den omkringliggande fria grundvattenytan
Stationär beräkning/simulering	Beräkning som tar hänsyn till fluktuationer beroende på t.ex. säsong
Stationärt (grundvatten)flöde	Konstant flöde, motsats till transient, se Transient flöde
Stokastisk	Slumpmässig (statistiskt sett)
Stokastisk modell	se Stokastisk, identiska indata kan resultera i olika resultat
Strömningsfält	se Flödesfält
Transient	Dynamiskt förlopp, fluktuerande, varierande beroende på t.ex. naturliga säsongs- eller klimatvariationer eller mänskligt inducerad påverkan t.ex. konstgjord infiltration
Transient (grundvatten)flöde	Fluktuerande, varierande dvs. icke stationärt flöde, se Transient
Transmissivitet	Summan av permeabiliteterna i hoas alla i lagerföljden ingående lager
Transpiration	Avdunstning via växternas klyvöppningar i bladen
Transportmodellering	se Partikelspårning
Vattenbalans	Ett avrinningsområdes (eller del av område) vattenbudget
Vattendelare	Höjdlinje över vilken inget flöde sker (topografisk eller grundvattendelare)
Vattenföring	Vattenflöde

Ytvatten	Vatten i sjöar, pölar och vattendrag
Ytvattenmodell	En modell som beräknar/simulerar processer i sjöar, pölar och vattendrag etc
Öppen akvifer	Akvifer med fri grundvattenyta

Förkortningar

CPM	Continuum Porous Medium
DFN	Discrete Fracture Network
DNAPLS	Dense Non Aqueous Phase Liquids
EDZ	Engineered Damage Zone
EIA	Environmental Impact Assessment
LTG	Laplace Transform Galerkin
NAPLS	Non Aqueous Phase Liquids
SKB	Svensk Kärnbränslehantering AB
TVD	Total Variation Diminishing
US EPA	United States Environmental Protection Agency

Datormodeller för föroreningsspredning fas 2

RAPPORT 5676

NATURVÅRDSVERKET
ISBN 91-620-5676-X
ISSN 0282-7298

Rapporten från fas 1 berörde olika datormodellers begränsningar och lämplighet vid riskbedömning av föroreningsspredning och ger på så vis en överblick över tillgängliga modeller. I denna fas 2 har två utvalda datormodeller använts på tre olika praktikfall och problemställningar. Vid beräkningarna har olika modellparametrar och förutsättningar varierats och analyserats. Det har lett till en rad rekommendationer för användning av datormodeller i samband med riskbedömning under svenska förhållanden.

Naturvårdsverket har inte tagit ställning till innehållet i rapporten. Författarna svarar ensamma för innehåll, slutsatser och eventuella rekommendationer.

Kunskapsprogrammet Hållbar Sanering samlar in, bygger upp och sprider kunskap om förorenade mark- och vattenområden. Genom Hållbar Sanering kan myndigheter, forskare och företag söka bidrag för utredningar, seminarier och utvecklingsprojekt som täcker kunskapsluckor på kort och lång sikt. Hållbar Sanering styrs av en programkommitté som består av representanter från Banverket, Göteborgs stad, KTH, Linköpings Universitet, Länsstyrelsen i Kalmar, Naturvårdsverket, Norges Teknisk- Naturvetenskaplige Universitet; SGI, SLU, Sydkraft SAKAB och Umeå Universitet.