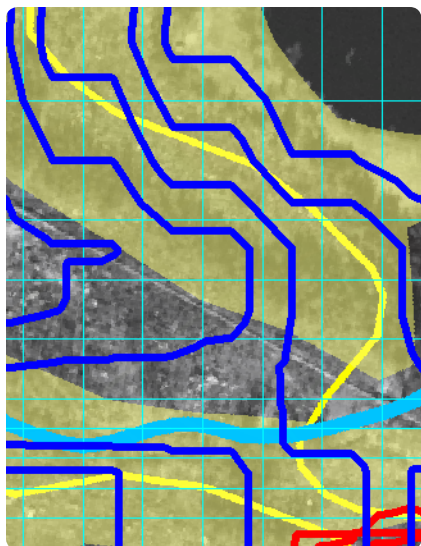
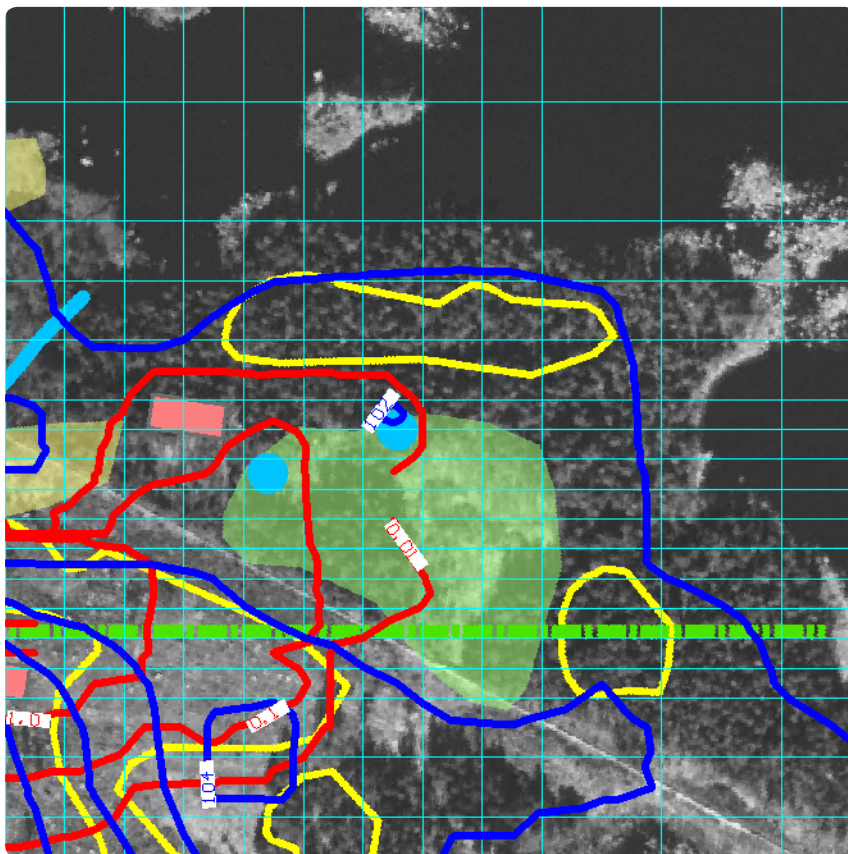


Modeller för transport och spridning av föroreningar fas 2

RAPPORT 5692 • APRIL 2007



Kunskapsprogrammet



Modeller för transport och spridning av föroreningar fas 2

Sven Jonasson, Geo Logic i Göteborg AB
Mattias von Brömssen, Ramböll Sverige AB
Lisa Gunnemyr, Ramböll Sverige AB
Ola Lindstrand, Sverige Ramböll AB

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 91-620-5692-1.pdf

ISSN 0282-7298

Elektronisk publikation

© Naturvårdsverket 2007

Tryck: CM Digitaltryck AB

Omslagsbild: Mattias von Brömssen, Ramböll Sverige AB

Förord

Ett av riksdagens miljömål är Giftfri miljö, och i detta mål ingår att efterbehandla och sanera förorenade områden. Brist på kunskap om risker med förorenade områden och hur de bör hanteras har identifierats som hinder för ett effektivt saneringsarbete. Naturvårdsverket har därför initierat kunskapsprogrammet Hållbar Sanering.

Föreliggande rapport redovisar projektet ”Modeller för transport och spridning av föroreningar - fas 2”. Den har sin utgångspunkt i den inventering av användningen av numeriska grundvattenmodeller i Sverige för beskrivning av transport och spridning av föroreningar i grundvatten, som redovisades i NV 5541, ”Modeller för transport och spridning av föroreningar - fas 1”. En av de huvudsakliga synpunkter som framkom vid denna inventering var att många önskade förbättrad erfarenhetsåterföring i olika form beträffande modellering. Föreliggande rapport har syftat till att bidra till en sådan erfarenhetsåterföring.

Författare till rapporten är Sven Jonasson (Geo Logic i Göteborg AB), Mattias von Brömssen, Lisa Gunnemyr och Ola Lindstrand (samtliga från Ramböll Sverige AB). Författarna vill rikta ett speciellt tack till Lars Markussen (Ramböll Danmark AS) och Wollmar Hintze (Citytunneln AB) som fungerat som referenspersoner för det löpande arbetet med rapporten. Ivars Neretnieks, KTH, har fungerat som Hållbar Sanerings kontaktperson för detta arbete.

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

Naturvårdsverket april 2007

Innehåll

FÖRORD	3
INNEHÅLL	5
SAMMANFATTNING	7
SUMMARY	8
1 INLEDNING	9
1.1 Bakgrund	9
1.2 Syfte	9
1.3 Avgränsning	9
2 MODELLERINGSGÅNG	11
3 FÖRBEREDELSE	14
3.1 Problemformulering	14
3.1.1 Exempel på arbetssätt	15
3.2 Uppdragsgenombgång	16
3.2.1 Genombgång av problemställning med uppdragsgivare	16
3.2.2 Uppdrag och uppdragsekonomi	16
3.3 Konceptuell modell	16
3.3.1 Flödessituationen	16
3.3.2 Föroreningssituationen	18
3.3.3 Biogeokemiska processer	22
3.4 Komplexitet	25
3.5 Val av modellverktyg	27
3.5.1 Olika typer av numeriska modeller	29
3.6 Inventering och sammanställning av underlagsmaterial	34
3.6.1 Kvalitet och tillgång på indata	34
3.6.2 Interpolation	36
3.6.3 Hantering av osäkerheter	37
3.6.4 Behov av kompletterande information	38
3.6.5 Behov av kompletterande kompetens	38
4 MODELLUPPBYGGNAD - FLÖDESMODELL	39
4.1 Arbetsordning	39
4.2 Diskretisering, orientering och koordinatsystem	40
4.3 Modellavgränsning	44
4.3.1 Val av lägen för modellrand	44
4.3.2 Typ av modellrand	44
4.4 Indata – flödesmodell	46
4.4.1 Allmänt	46

4.4.2	Egenskapsområden	46
4.4.3	Nederbörd, avdunstning och grundvattenbildning	46
4.4.4	Hydraulisk konduktivitet	49
4.4.5	Magasinsegenskaper	50
4.4.6	Densitetspåverkat flöde	50
4.4.7	Existerande fältdata	52
4.4.8	Fältundersökningar	53
4.4.9	Prediktion av hydrauliska parametrar	54
5	MODELLUPPBYGGNAD - MASSTRANSPORT AV FÖRORENINGAR	59
5.1	Arbetsordning	59
5.2	Modellavgränsning	60
5.3	Indata - masstransport	61
5.3.1	Egenskapsområden	61
5.3.2	Advektion	62
5.3.3	Diffusion	64
5.3.4	Dispersion	66
5.3.5	Adsorption	70
5.3.6	Nedbrytning	76
6	KÖRNING AV NUMERISK MODELL	78
6.1	Kalibrering och validering	78
6.1.1	Kalibrering mot vilka data	78
6.1.2	Behov av kompletterande information och revidering av modell	79
6.2	Numeriska problem	80
7	RAPPORTERING	81
8	REFERENSER	83

Sammanfattning

Grundvattenmodeller kan vara mycket kraftfulla verktyg för att beräkna och visualisera grundvattenflöde och föroreningstransport. I rätt sammanhang och rätt använda är grundvattenmodeller viktiga och kostnadseffektiva verktyg för att ta fram beslutsunderlag för riskbedömningar, åtgärdsförslag, projektering av efterbehandlingsåtgärder, etc.

Föreliggande handledning syftar till att underlätta användning av modellverktyg för beskrivning av föroreningstransport med grundvatten, samt medverka till att höja kunskapsnivån så att dessa verktyg används på ett lämpligt sätt. Handledningen är programberoende och har tagits fram för att ge handfasta råd för upprättande av modeller för simulering av föroreningstransport. Handledningen omfattar hela modelleringsprocessen, från de förberedande arbetena, själva upprättandet av modellen till avrapporteringen.

Modelleringsprocessen tar sin början i problemformuleringen. Sedan följer upprättandet en konceptuell hydrogeologisk modell över det aktuella området. Den konceptuella modellen används som underlag vid skapande av den numeriska modellen. För detta arbete krävs en god förståelse geologiska förhållanden, anläggningar som ändrar de naturliga grundvattenflödena, områdets vattenbalans, grundvattennivåer, grundvattenflöden och vattenstånd i vattendrag och grundvattenkemi karaktärisering. Numeriska beräkningsmodeller för beräkning av föroreningstransport kan göras på många olika sätt alltifrån relativt enkla till mycket komplexa modeller.

Den numeriska flödesmodellen upprättas sedan i en programvara/-kod. Modellen lagerindelas på lämpligt sätt utifrån de geologiska förutsättningarna och avgränsas geografiskt utifrån de hydrauliska förutsättningarna genom ansättande av skrandvillkor. Baserat på vilken flödesmodell som utnyttjas kan sedan olika moduler kopplas på för att beräkna masstransporten av föroreningar som tar hänsyn till diffusion och dispersion, nedbrytning, kemiska reaktioner, avångning, sorptionsprocesser etc. Det är viktigt att modellen inte blir mer komplex än att den ger de svar som vi är ute efter. För att modellera och simulera ämnestransport i grundvatten krävs ett antal nödvändiga indata och kvalitet. Mängd och typ styr hur komplex modellen kan vara samt vilka resultat som kan förväntas från modelleringsarbetet.

När modellen har upprättats skall den kalibreras och valideras. Kalibrering i egentlig betydelse innebär att man på ett objektivt sätt justerar modellen till dess att överensstämmelse mellan konstaterade förhållanden och av modellen predikterade förhållanden erhålls. För att värdera hur bra modellen är kalibrerad och överensstämmer med verkligheten bör den testas mot oberoende data. Det kan t ex vara från en annan tidsperiod eller från uppmätta nivåer eller flöden som ej använts för kalibreringen. Detta kallas validering. När väl detta är genomfört kan modellen användas för att beräkna föroreningstransport för olika scenarion och som beslutsunderlag för att miljökonsekvenser, åtgärdsförslag, kontrollprogram, etc.

Summary

Groundwater models can be very powerful tools to compute and visualize groundwater flow and contaminant transport, especially in aquifers with complex geometry and groundwater flow patterns. In the right context and correctly used groundwater models is a cost efficient tool for risk assessments, evaluation of required measurements, planning for remedial actions, etc.

This handbook has been prepared to increase the knowledge level of modelling solute transport in aquifers and to facilitate the use of such modelling tools. The handbook is software-independent and gives firm advices for the design of models. The handbook includes the complete modelling process, from the initial work with collecting input data, the building of a groundwater- and solute transport model, calibration, validation to reporting of the modelling project.

Modelling starts with formulation of the problem(s) to solve and objective(s) to achieve followed by the design of the conceptual (descriptive) hydrogeological model over the area of interest. In order to do this a comprehensive understanding of the studied system is needed including geological conditions, groundwater levels and –fluxes, surface water conditions and groundwater chemical characteristics. Numerical computer models for the calculation of solute transport in aquifers can be built in a number of ways, ranging from simple- to very complex models.

The numerical model describing the groundwater flow is built with the help of computer software. The model domain and grid system is designed on the basis of hydrogeological prerequisites and appropriate boundary conditions are assigned to the model. Based on the flow model, different solute transport models that include simulation of diffusion, dispersion, degradation-, sorption- and chemical processes can be added to the model. It is important to know that the model should not be more complex than that the objectives of the project can be achieved. In order to simulate solute transport in groundwater systems a number of different input data for parameterisation is necessary. Quantity and quality of the input data will be constraints for how complex the model can be and for what answers that can be given.

Once the model is built it has to be calibrated and validated. Calibration means that the model parameters are adjusted in such way that the results from performed calibrations coincide with measured/observed field data. In order to evaluate how well the model is calibrated and how well it describe the real conditions it should be tested against independent data, i.e. data that was not used for calibration. It can be data from a different time-period with measurements of groundwater -levels or -flows that was not used for calibration. This is called validation. Finally the model can be used for predictive modelling of solute transport scenarios, risk assessments, environmental impact assessments, etc.

1 Inledning

1.1 Bakgrund

Grundvattenmodeller kan vara mycket kraftfulla verktyg för att beräkna och visualisera grundvattenflöde och föroreningstransport. I rätt sammanhang och rätt använda är grundvattenmodeller viktiga och kostnadseffektiva verktyg för att ta fram beslutsunderlag för riskbedömningar, åtgärdsförslag, projektering av efterbehandlingsåtgärder, etc. Detta gäller särskilt där skyddsobjekten är stora, tydliga och värdefulla.

Idag saknas dock ofta kunskap och indata för att med precision kvantifiera och prediktera transport av föroreningar i grundvatten vilket var en av de viktigare slutsatserna i NV rapport 5541 (Naturvårdsverket 2006a). Bland annat konstaterades att: i) det finns ett behov av erfarenhetsspridning och -återföring beträffande grundvattenmodellering i allmänhet och transportmodellering i synnerhet, ii) det vore även önskvärt om det fanns en handbok beträffande grundvatten- och masstransportmodellering samt iii) det saknas en sammanställning av erfarenhetsvärden för dylika modelleringar.

1.2 Syfte

Föreliggande rapport syftar till att underlätta användning av modellverktyg för beskrivning av föroreningstransport med grundvatten, samt medverka till att höja kunskapsnivån så att dessa verktyg används på ett lämpligt sätt. Rapporten skall fungera som en konkret handledning över hur man kan strukturera arbetet vid uppställning av enklare eller måttligt komplicerade grundvattenmodeller för simulering av transport och spridning av föroreningar. Vidare redovisas litteratur- och erfarenhetsvärden beträffande hydrogeologiska och hydrologiska parametrar för modellering av föroreningstransport samt lämpliga metoder för att ta fram värden för dessa parametrar.

Denna rapport är avsedd som en handledning och stöd för praktiker som arbetar med grundvattenmodellering. Handledningen utgår från praktikerperspektivet och är riktad till både modellörer och beställare/nyttjare. Den kan med fördel användas som stöd och underlag vid formulering av modelleringsprojekt.

1.3 Avgränsning

Projektet behandlar användningen av numeriska grundvattenmodeller (se faktaruta nedan) samt masstransportmodeller för simulering av advektion, diffusion, dispersion samt enklare ansatser för beskrivning av sorption och nedbrytning i en akvifär. Handledningen inkluderar endast föroreningstransport med grundvattnet. Den omöätade zonen behandlas styvmoderligt genom att olika antagande görs av hur källtermen (föroreningen) inverkar på de halter och mängder som sprids från källan och hur de varierar med tiden. Innan en modell sätts upp behöver därför källtermen beskrivas.

Espeby och Gustafsson (2001) ger en god översikt av ämnestransport i den omättade zonen. Metallers mobilitet i mark behandlas i en ny rapport av Naturvårdsverket, rapport 5536 (Naturvårdsverket, 2006b) och i Naturvårdsverkets rapport 5534 (Naturvårdsverket, 2006c) ges en översikt av olika modellsystem. I dessa rapporter finns även de vanligaste kemiska och fysikaliska begreppen definierade.

Faktaruta – Numeriska beräkningsmodeller för beskrivning av transport och spridning av föroreningar i grundvatten (efter NV rapport 5541)

Med en numerisk modell menas här att man (med hjälp av en dator) på numerisk väg löser ett system av ekvationer som tillsammans beskriver de fysikaliska förlopp man vill beskriva.

En numerisk beräkningsmodell för transport av föroreningar i grundvatten brukar inkludera ekvationer som kan beskriva spridning av ett föroreningsämne genom grundvattenströmning (advektion), molekylär diffusion och omblandning på grund av inhomogeniteter i marken (dispersion), fastläggning genom sorption till fast markmaterial samt någon form av nedbrytning. Det förekommer även numeriska modeller som i detalj beskriver komplexa kemiska reaktioner mellan olika ämnen som transporteras med grundvatten, eller avångning av flyktiga ämnen. Dessa olika funktioner kan inkluderas i ett och samma program, eller finnas i program eller programmoduler som samverkar med ett huvudprogram som beskriver grundvattenströmningen.

2 Modelleringsgång

En grundvattenmodellering görs i princip alltid som en del av ett större sammanhang eller utredning. Modellering av föroreningstransport är en process som tar sin början i problemformuleringen, d v s vilka frågeställningar vill vi ha svar på genom modelleringsarbetet samt hur skall modellen avgränsas? Det är viktigt att redan från början fundera igenom vad som skall inkluderas och vad som kan exkluderas ur modelleringsarbetet för att modellen skall kunna lösa de frågeställningar som finns utan att bli för komplex och resurskrävande. Allt eftersom modelleringsarbetet fortskrider uppkommer säkerligen fler frågeställningar och/eller krav på kompletterande indata. Det är därför vanligt att flera versioner av modellen ställs upp allt eftersom man lär sig mer om grundvattensystemet samt får mer indata.

Den viktigaste delen vid upprättandet av en grundvattenmodell är att skapa en konceptuell (beskrivande) geologisk, hydrologisk och hydrogeologisk modell över området. Den konceptuella modellen används därefter som underlag vid skapande av en numerisk grundvattenmodell vilken senare kan utnyttjas som underlag för beräkningar och/eller bedömningar av föroreningarnas spridningsförutsättningar.

För att skapa en konceptuell hydrologisk och hydrogeologisk modell krävs en god förståelse av bland annat geologiska förhållanden, anläggningar som ändrar de naturliga grundvattenflödena såsom ledningsgravar, områdets vattenbalans (d v s nederbörd, grundvattenbildning, flöde i ytvattendrag, befintliga grundvattenuttag, etc.), grundvattennivåer, grundvattenflöden och vattenstånd i vattendrag och grundvattenkemisk karaktärisering.

En sammanställning av insamlad data ger underlag för skapande av en hydrogeologisk konceptuell modell. Den konceptuella modellen är tredimensionell och redovisas i form av karta i plan och profil, samt beskrivningar i text. Vidare beskrivs de osäkerheter som den konceptuella modellen innehåller.

Baserat på den konceptuella hydrogeologiska modellen byggs därefter en numerisk flödesmodell upp i en programvara. Modellen lagerindelas på lämpligt sätt utifrån de geologiska förutsättningarna. Grundvattenmodellen avgränsas geografiskt utifrån de hydrauliska förutsättningarna (t ex sjöar, vattendrag, vattendelare, etc.).

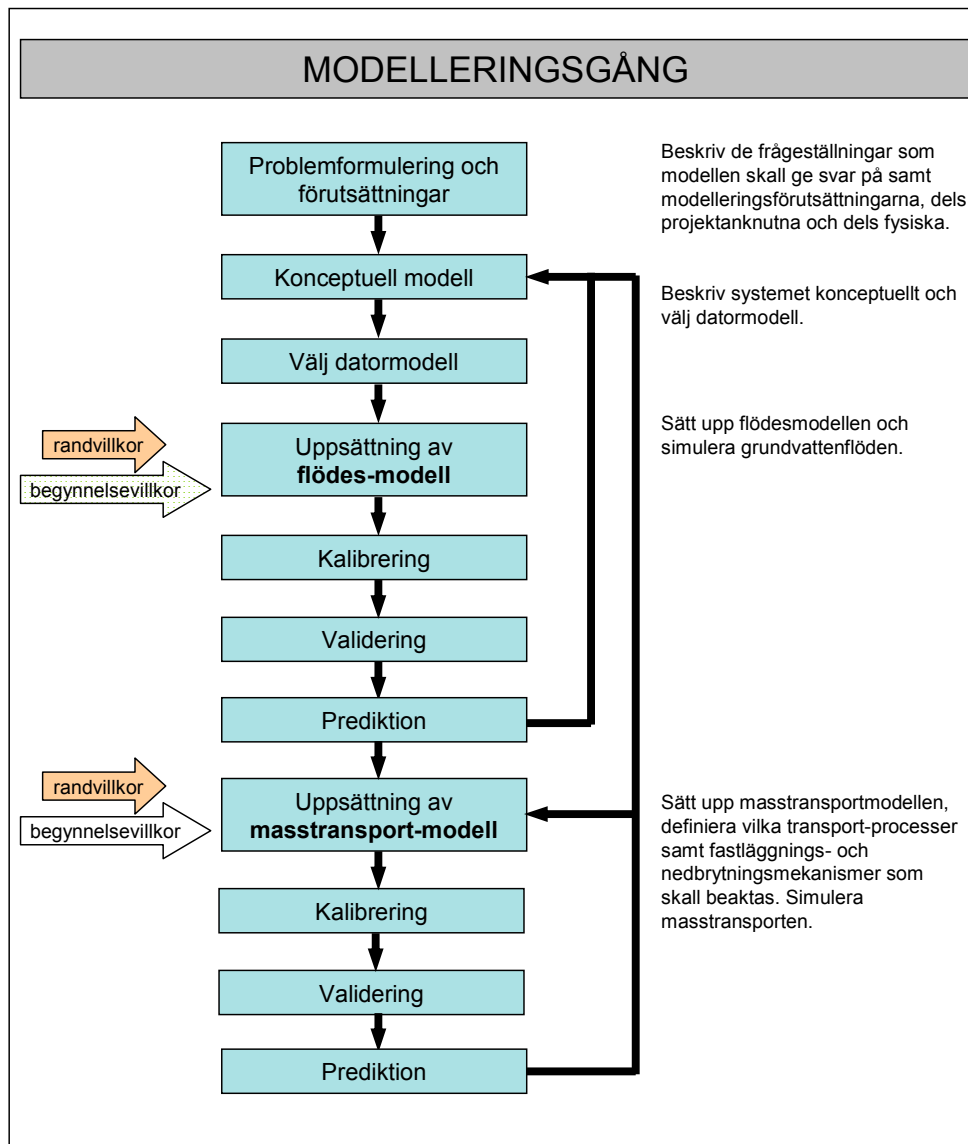
Baserat på vilken flödesmodell som utnyttjas kan sedan olika moduler ”kopplas på” för att beräkna masstransporten av föroreningar som tar hänsyn till diffusion och dispersion, nedbrytning, kemiska reaktioner, avångning, sorptionsprocesser etc. En av de vanligaste och enklaste modulerna är partikelspårning som vanligen endast tar hänsyn till advektion (dispersion kan dock också inkluderas ibland). Partikelspårning innebär att man släpper ett antal partiklar i flödesmodellen och ser efter vart de tar vägen samt deras hastighet.

Följande steg brukar ingå i uppbyggnaden av modellen:

- avgränsning av modellen i plan och profil, inklusive val av lagerindelning, mäktigheter på ingående lager,
- diskretisering (val av element- eller cellstorlek vilka oftast varierar över modellområdet)

- ansättande av s k randvillkor (villkor för modellens ränder/sidor),
- ansättning av s k begynnelsevillkor (såsom exempelvis grundvattennivåer och ämneskoncentrationer) vid det tillfälle beräkning/simulering börjar
- ansättande av olika hydrauliska och andra egenskaper som ej förändras med tiden (akvifärens hydrauliska egenskaper och sorptionsegenskaper, m m.)
- kalibrering av modellen mot kända grundvattennivåer och –flöden samt uppmätta koncentrationer, genom successiv anpassning och justering av hydrauliska konduktiviteter, grundvattenbildning, koncentrationer och andra parametrar,
- validering av modellen genom kontroll av modellens samstämmighet mot i verkligheten förändrade förhållanden och/eller validering mot kända grundvattennivåer och -flöden
- simulering för att prediktera framtida (eller dåtida) förhållanden.

Figur 1 beskriver huvudmomenten i arbetet med att skapa förutsättningar för och sätta upp en modell för simulering av föroreningstransport.



Figur 1. Modelleringsgång

3 Förberedelser

3.1 Problemformulering

Projektet inom området ”förorenad mark” har vanligen påbörjats med en övergripande målsättning som innehåller något eller några av följande ”uppdrag”:

- Utredda om förorening förekommer
- Undersöka omfattning av misstänkt eller konstaterad förorening
- Utredda möjliga spridningsvägar för konstaterad eller misstänkt förorening
- Utredda hur allvarlig en konstaterad förorening är – göra riskbedömning
- Jämföra olika möjliga saneringsåtgärder
- Ta fram underlag för definiera/bestämma åtgärds mål
- Ta fram underlag för genomförande av sanering
- Utformning av undersöknings- och kontrollprogram (t ex läge för och antal kontrollbrunnar)
- Övervaka effekter av utförd saneringsåtgärd

Beroende på i vilken fas som det övergripande projekt befinner sig i kan problemställningarna variera. Det är grundläggande att man gör en väl definierad problemformulering innan man går vidare med att bygga upp en grundvattenmodell och det är lika självklart att man ställer sig frågorna:

- Går det att lösa det problem jag har med hjälp av masstransport- och/eller grundvattenmodellering?
- Är masstransport- och/eller grundvattenmodellering ett verktyg som kan lösa denna frågeställning helt eller delvis?

Om svaret är ja på bägge dessa frågor kan man gå vidare för att skaffa sig en bild av vad en grundvattenmodellering skulle innebära ifråga om arbetsinsats etc.

Förutom att lösa de specifika frågeställningarna som modellen förväntas ge svar på är ett antal mervärden förknippade med modelleringsarbetena. Genom att bygga upp en grundvattenmodell får man en kontroll av att man tänkt igenom problemställningen ordentligt och inte missar väsentlig och nödvändig information. I många fall får man simuleringsresultat som inte var förväntade, vilket kan innebära att man har tänkt fel och att den konceptuella modell som uppställd numerisk modell baseras på inte stämmer, eller att man har missbedömt påverkan av en viss parameter. Inte förväntade simuleringsresultat kan vara mycket klarläggande och lärorika. Att bygga upp en grundvattenmodell och utnyttja denna för simuleringar är ett bra sätt att lära sig det aktuella systemet, och vilka faktorer som påverkar olika observerbara resultat (”vad som påverkar vad”). Man kan även pröva olika hypoteser kring hur akvifären och föroreningen fungerar och betar sig samt simulera framtida scenarion (s k prediktiva simuleringar). Genom att sätta upp en grundvattenmodell ”tvingas” man även att skapa en rimlig vattenbalans över området som ger storleksordningar på grundvattenbildning, grundvattenflöden,

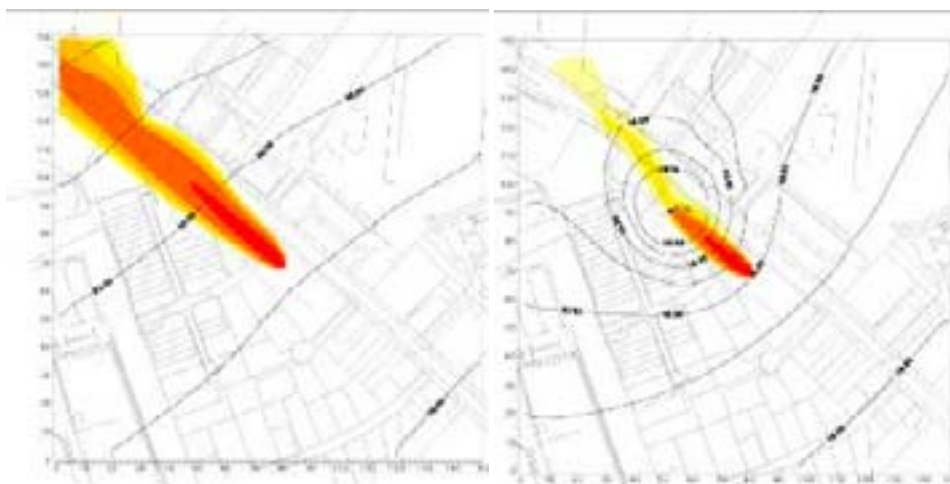
omfattning av in- och utströmningsområden m m som underlag för riskbedömningar. Modeller genererar även mycket pedagogiska resultat för redovisning och diskussion (Naturvårdsverket 2006a).

3.1.1 Exempel på arbetssätt

Den metodik som väljs beror av ambitionsnivå och på bedömning av ”vad räcker för att lösa uppgiften?”. Ett antal olika metodiker kan användas till exempel:

- Worst-case scenario
- Kombination av flödesmodell och analytisk beräkning för masstransport
- Scenarioanalys (av olika scenarier för t ex olika typer av efterbehandling)
- Riskmodell - bedömning av influensområden för brunnar och strömningsvägar
- Prediktiv modell inklusive olika processer (som dispersion, fastläggning och nedbrytning)

Vid ett ”Worst-case scenario” görs en bedömning av vad som skulle kunna vara det värsta tänkbara fallet. Vid simulering av föroreningstransport kan man till exempel tänka sig att man inte ”tillgodoräknar” sig nedbrytning och/eller fastläggning. Kan uppsatta åtgärds mål eller dylikt ändå hållas kan modellen ha uppfyllt sitt syfte. Ett annat vanligt arbetssätt är att upprätta en flödesmodell m h a en grundvattenmodell varvid flödesmängder, utspädning, spridningsvägar, etc. beräknas. Med detta underlag som bas beräknas sedan transporten och spridningen analytiskt med konventionella transportekvationer (Persson, 2004). Scenarioanalys för olika typer av efterbehandlingar (t e x ”pump and treat”) är även relativt vanligt. Denna typ av simuleringar visar på ”vad händer ifall ...”. Figur 2 visar en sådan simulering för optimering av placering och kapacitet av saneringspump.



Figur 2. Figuren visar en simulerad föroreningsspridning. Modellen skall här användas till att värdera en optimal utformning av saneringspumpning (Ramböll, 2004)

Vidare kan modeller användas i syfte att upprätta en riskmodell för en grundvattenresurs genom att ge svar på var inströmningsområden till vattenresursen finns etc. De mest komplexa och komplicerande simuleringarna torde vara prediktiva simuleringar av föroreningsspridning som inkluderar dispersion, fastläggning och nedbrytning.

3.2 Uppdragsgenomgång

3.2.1 Genomgång av problemställning med uppdragsgivare

Efter det att man har definierat problemställning (samt vanligen även inventerat existerande underlagsmaterial och definierat behov av kompletterande undersökningar) är det viktigt att stämma av detta med beställaren. Här måste modellören tydligt peka på vad som kan åstadkommas med olika omfattning av modelleringsarbete och kompletterande undersökningar. Det är även viktigt för modellören att peka på hur hantering av osäkerheter kommer att ske.

3.2.2 Uppdrag och uppdragsekonomi

Omfattning av modelleringsarbetet styrs av anbud och upphandling. Dessa kan vara utformade på olika sätt, men ger ramarna för vad som sedan kan utföras inom uppdraget.

Det är viktigt och nödvändigt att stämma av omfattning och organisation av uppdraget både inom egen organisation och med beställaren. Detta görs vanligen vid ett uppstartmöte och löpande projektmöten. En viktig fråga som måste vara löst när uppdraget påbörjas är hur, när och av vem granskning av utfört arbete skall utföras.

3.3 Konceptuell modell

Den konceptuella modellen är en beskrivning av de geologiska, hydrologiska och hydrogeologiska förhållandena som råder på platsen. Den skall inbegripa en god förståelse och beskrivning (inkluderande kartor/ritningar i plan och profil) av dessa lokala förhållanden som skall ligga som underlag för den numeriska modellen.

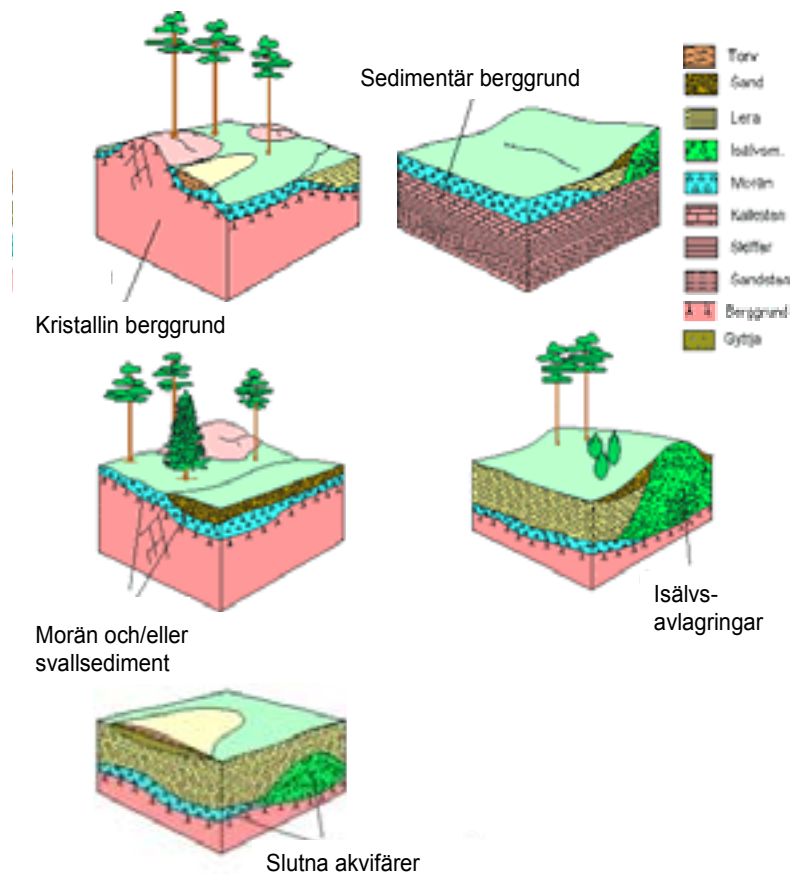
3.3.1 Flödessituationen

För att skapa en konceptuell hydrologisk och hydrogeologisk modell krävs en god förståelse av gällande geologiska, hydrologiska, och hydrogeologiska förhållandena. Dessutom skall anläggningar som stör de naturliga grundvattenflödena såsom ledningar och ledningsgravar, schakter, berggrum, tunnlar, brunnar, etc. beskrivas liksom vattenbalansen över området. Uppmätta grundvattennivåer och eventuella flöden (brunnar, inläckage till tunnlar, etc.) skall registreras för att senare användas för kalibrering eller validering av den numeriska modellen.

Ju mer information som vi har, och ju större erfarenhet av liknande geologiska förhållanden och likartade objekt som vi har desto lättare är det att beskriva förhållandena på aktuell plats, och att konstruera en rimlig konceptuell modell. I detta steg måste vi ta ställning till hur mycket vi kan förenkla modellen av en komplex verklighet utan att vi förlorar detaljer och prediktiv förmåga.

De val som vi gör här, och när vi sedan omsätter denna konceptuella modell i en numerisk modell, kommer att påverka hur lång tid det tar att generera indata, hur väl den numeriska modellen kommer att fungera (beträffande främst konvergens och stabilitet) och hur flexibel uppbyggd modell är för önskade och nödvändiga modifieringar i samband med kalibrering eller komplettering p g a tillkommande information.

När det gäller att beskriva hur området faktiskt ser ut under markytan har vi god hjälp av geologisk och hydrogeologisk kunskap och erfarenhet. Ju mer vi har av detta, desto större är chansen att vi beskriver geologin och hydrogeologin väl med ett begränsat antal borrhningar, geofysiska och andra geovetenskapliga undersökningar. Vi kan ofta få god kompletterande information genom att "läsa naturen", t ex kan identifiering av in- och utströmningsområden i fält användas för förståelse av grundvattenflödet. Vidare bör en uppfattning om vattenbalansen, nederbörd, grundvattenbildning, grundvattennivåer, etc. ingå i det konceptuella arbetet. Figur 3 visar några geologiska grundvattenmiljöer i Sverige



Figur 3. Några typiska geologiska grundvattenmiljöer/akvifärer i Sverige (efter Naturvårdsverket 1999)

Det är också viktigt att skilja på naturmark, och det som är resultatet av schaktning och utfyllnad. Föroreningar förekommer oftast i samband med äldre industriområden eller vid utfyllnad med förorenade massor. Och där naturen har en viss grad av variabilitet och heterogenitet, så har vanligen fyllnadsmassor en mycket större heterogenitet och möjlig variabilitet. I princip vilka massor som helst kan finnas i en deponi. Omgivningen ger i detta fall oftast inga svar.

Det är viktigt att minnas att de naturliga heterogeniteterna aldrig kan beskrivas helt i en modell varför förenklingar alltid måste göras. När resultaten från den numeriska modellen senare erhålls är det viktigt att stämma av den konceptuella modellen för att se om de stämmer överens och är rimliga.

3.3.2 Föroreningssituationen

Både föroreningens kemiska egenskaper och hydrogeologiska/hydrogeokemiska förhållanden är styrande för spridningsscenarioet. Det går alltså inte att säga att en förorening alltid beter sig på ett visst sätt. Sorption beror bl a på mängd organiskt material och kornstorlek i jorden eller sedimentet medan kemiska reaktioner är beroende av pH, redoxförhållanden, temperatur, andra lösta ämnen o s v. I det följande redovisas kortfattat olika ämnens egenskaper och viktiga processer för desamma vid upprättandet av en masstransportmodell.

Tabell 1. Olika ämnens egenskaper och viktiga processer för desamma vid uppsättande av mass-transport modell.

Ämnesgrupp	Ämnets egenskap	Viktiga processer/egenskaper	Övrigt/Kommentar
MTBE	Mkt hydrofila	Advektion Mekanisk dispersion	Bryts inte ned under aeroba förhållanden.
Fenoler	Flyktiga, mkt hydrofila	Advektion Mekanisk dispersion Nedbrytning (<i>endast omättad zon</i>) Förångning	Bryts ned under anaeroba förhållanden.
Aromater (BTEX)	Flyktiga, ngt hydrofila LNAPL	Advektion Mekanisk dispersion Nedbrytning Förångning	Bryts ned under aeroba förhållanden.
PAH	Icke-flyktiga, hydrofoba	Mekanisk dispersion Sorption (Nedbrytning) Densitet	Tenderar att stanna i jorden, relativt persistenta för nedbrytning. Bryts ned under aeroba förhållanden.
PAH	Flyktiga, ngt hydrofila	Advektion Mekanisk dispersion Förångning Nedbrytning	
Klorerade lösningsmedel (ex TCE, vinylklorid)	Flyktiga, ngt hydrofila	Advektion Mekanisk dispersion Förångning Nedbrytning	Redoxförhållanden viktiga, bryts ned i syrefattiga miljöer.
Tyngre oljekomponenter	Icke-flyktiga, hydrofoba	Mekanisk dispersion Sorption Nedbrytning Densitet	
Lättare oljekomponenter	Flyktiga, ngt hydrofila	Advektion Mekanisk dispersion Förångning	
Redoxkänsliga metaller (ex Cr, Ni, As)	Icke-flyktiga, hydrofoba	Advektion Mekanisk dispersion Sorption (Förångning) Upptag i växter	Förångning endast viktigt för Hg.
Icke-redoxkänsliga metaller (ex Zn, Ni, Cd)	Icke-flyktiga, hydrofoba	Advektion Mekanisk dispersion Sorption Komplexbildning Upptag i växter	

Innan en transportmodell kan sättas upp behöver källtermen beskrivas, först konceptuellt och sedan i programvaran. I detta läge behöver vi bestämma oss för vilka processer som skall tas med i beräkningarna av spridningen och därmed avgörs hur komplex modellen blir. En mer komplex modell blir givetvis mer svårarbetad och kalibrering och validering av modellen blir gärna svår. En komplex

modell med många ingående parametrar som skall ansättas medför även att antal scenarion som kan simuleras blir många och ohanterliga inom ramen för ett mindre projekt. Det är viktigt att ha en struktur och strategi hur de olika parametrarna varieras.

Källtermen behandlas ofta styvmoderligt av grundvattenmodeller varför det är viktigt att noga tänka igenom och beskriva vilka förenklingar och antaganden som görs. I det konceptuella arbetet bör följande beaktas (även om inte allt beaktas eller inkluderas i modellen):

Hur stort var utsläppet:

- halter
- mängder
- volymer

Var skedde utsläppet:

- punktkälla eller diffus belastning
- mättade eller omättade förhållanden (sker utspädning, fastläggning o s v redan i den omättade zonen)

Under hur lång tid skedde/sker utsläppet:

- en kort begränsad tid med konstant läckage (t ex tankbilsolycka)
- en längre tid med utarmning av källan över tiden (t ex deponi)
- konstant läckage (t ex vittring)

Vilka kemiska och fysikaliska egenskaper har ämnet:

- densitet (saltvatten, DNALP, LNAPL)
- löslighet (organiska ämnens löslighet är begränsade)
- nedbrytning (ja [bensen] eller nej [Pb])
- förångning (ja [bensen] eller nej [Cd])

Yttre faktorer som påverkar ämnets mobilitet och löslighet:

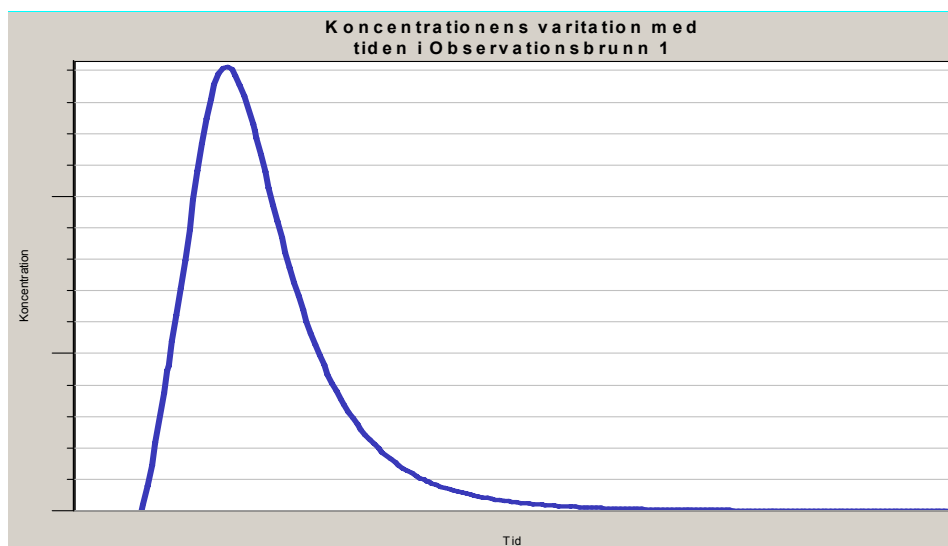
- utfällning (av t ex PbCO_3)
- komplexbildning (t ex bildar Cu komplex med humusämnen och NH_3)
- pH (Zn) och redox-känsliga (As) ämnen

Det är inte alltid alla dessa frågeställningar kan besvaras, det vanliga är att upptäckten av föroreningen sker långt efter att utsläppet skedde, t ex i samband med att man stöter på föroreningen i en brunn, i en bäck, i samband med exploatering av ett område, etc. Det är heller inte alltid man vet **när** utsläppet skedde, **hur mycket** som släpptes ut eller ens exakt **vad** som släpptes ut.

När både grundvattenförhållandena och föroreningen har beskrivits kan arbetet med att förenkla hydrogeologiska förutsättningar samt sorptions- och reaktionsförlopp för att ”passa in dem” (idealisering) i programvaran. Vid idealisering av källtermen brukar man kunna beskriva källtermen enligt följande:

- kontinuerliga föroreningskällor, t ex en förorenad massa som står i jämvikt med grundvattnet och som därigenom ger upphov till en konstant koncentration i en bestämd volym
- tillfälliga källtermer, t ex ett tillfälligt spill som tvättas ur jorden under en begränsad tid och som sedan transporteras iväg med grundvattnet och påverkar en nedströms liggande brunn (exempel Figur 4)
- diffus källa, t ex nitrat läckage från jordbruksmarker eller användning av pesticider över större områden

Det är i detta läge viktigt att bestämma hur källtermen skall beskrivas i programvaran eftersom det renderar i vilka randvillkor som skall ansättas. Det är viktigt att modellen inte görs mer komplex än nödvändigt, men samtidigt ger svar på våra frågeställningar. Till exempel kan man tänka sig att vi söker en framtida koncentration vid en nedströms liggande brunn. Källtermen kan då beskrivas på ett konservativt sätt genom att den inte utarmas för att förenkla modellen. Ger modellen att de halter som skall klaras gör detta med goda säkerhetsmarginaler, behöver vi inte i programvaran beskriva modellen mer noggrant. I verkligheten utarmas källtermen efter ett tag varför påverkan i t ex en nedströms liggande brunn får en ”topp” och sedan en avklingning i påverkan (Figur 4).



Figur 4. Exempel på haltvariation över tiden i en observationsbrunn.

3.3.3 Biogeokemiska processer

I följande kapitel ges en kort beskrivning av de biogeokemiska processer som styr föroreningars förekomst, omvandling, utlakning och nedbrytning i en akvifär.

3.3.3.1 SPECIERING AV METALLER I GRUNDVATTEN

Metaller förekommer i olika oxidationstillstånd. Till exempel kan As förekomma som -3, 0, +3, +5 laddad jon. I grundvatten förekommer den dock främst i dess positivt laddade tre- och femvärda form (As^{III} och As^{V}). I grundvatten bildar dessutom As komplex med syre och väte varvid komplexet blir negativt laddad (anjon). Beroende på pH och redox kan metallerna inta olika specier (former) vilka kommer att reagera olika vid fastläggning/adsorption till reaktiva ytor i jordmatrix. Olika specier kan även vara olika toxiska. Omvandlingen mellan olika former är komplex och oxidation, reduktion, ligand-utbyte, utfällning, adsorption och biologiska processer påverkar alla vilken form av metallen som kan förväntas i vattnet. Allt detta kan inte inkluderas i en transportmodell men det är ändå viktigt att ”ha med sig” då olika parametervärden för t ex fastläggning kan skilja sig för olika specier av samma ämne.

3.3.3.2 VITTRING

Mineralernas nedbrytning och omvandling kallas vittring och delas in i fysikalisk-, kemisk- och biologisk vittring. Fysikalisk vittring innebär att bergarten eller mineralerna faller sönder i mindre partiklar utan att den kemiska sammansättningen eller den kristallina uppbyggnaden ändras och det är framförallt temperaturförändringar som påskyndar den fysikaliska vittringen i vårt klimat. Kemisk vittring innebär att mineralen omvandlas, löses upp i markvätskan och/eller bildar nya föreningar. Det kan även bildas nya mineral. Dessa kallas sekundära mineral. Exempel är lermineral och järn-hydroxyoxider. Markvattnet och grundvattnets sammansättning (pH, jonstyrka, etc) och förekomst av mikrobiologisk aktivitet (t ex mykorrhizasvampar) har betydelse för vittringshastigheten vilket gör att man ibland också talar om biologisk vittring. Vittringen kan ha stor betydelse för buffringen av ett grundvatten eller för bakgrundskoncentrationer av olika ämnen vilket i sin tur kan ha betydelse för indata och/eller tolkning av simuleringsresultat.

3.3.3.3 KOMPLEXBILDNING

Komplexbildning innebär att en centralt placerad jon bildar kovalenta bindningar med omgivande joner, så kallade ligander. I hydrogeokemiska sammanhang är den centrala jonen ofta positivt laddad och liganderna negativt laddade. Bra exempel på komplexbildning är fosfat PO_4^{3-} som förekommer som H_2PO_4^- och HPO_4^{2-} i grundvatten. Precis som för As så förekommer dock de olika specierna vid olika pH-förhållanden varför t ex PO_4^{3-} inte förekommer vid nära neutrala förhållanden. Exempel på negativt laddade komplexbindande ämnen är organiska ämnen, hydroxyl, klorid och sulfat. På samma sätt som för adsorption så är också komplexjämvikterna olika starka beroende på de ingående ämnena. Komplexbildning har stor betydelse i marksystemet eftersom de ökar lösligheten av ämnen och komplexet i regel inte deltar i de adsorptionsprocesser som fastlägger ämnen till

markpartiklarna. Förekomsten av komplexbindande ämnen har sålunda stor betydelse för ämnestransporten, och de har dessutom stor betydelse för toxiciteten eftersom det ofta är den fria jonen som är toxisk. De bidrar också till ökad vitteringshastighet i marken.

3.3.3.4 UTFÄLLNING OCH MEDUTFÄLLNING

Med utfällning menas att ett ämne som är i vattenlöslig fas faller ut och bildar en fast fas. Ett typiskt exempel är när Fe^{2+} oxideras och faller ut som Fe^{3+} (t ex $\text{Fe}(\text{OH})_3$) som är en fast fas, eller när Al^{3+} faller ut som $\text{Al}(\text{OH})_3$. I både de nämnda exemplen handlar det om en kemisk förändring, där det första är en redoxreaktion och det andra en syra-basreaktion. Olika ämnen har olika benägenhet för utfällning. När det gäller metaller så är det främst utfällning av metallsulfider i starkt reducerande jordar eller möjligen tillsammans med karbonat i alkaliska jordar som kan bli aktuellt. Med medutfällning menas samtidig utfällning av ett ämne med andra ämnen. Metalljoner kan t ex fällas ut samtidigt med järnoxider och adsorberas på ytan av den utfällda oxiden. Andra metaller kan ha en tendens att falla ut tillsammans med kalciumkarbonat.

3.3.3.5 REDOXPROCESSER

Redoxprocesser innebär ett utbyte av elektroner mellan ämnen. I en redoxprocess avger ett ämne elektroner (oxidation) och ett annat ämne mottar elektroner (reduktion). Ämnen som kan delta i en redoxreaktion förekommer alltså i mer än ett oxidationsstadium. Ett exempel på en redoxreaktion är när grundvatten som har transporterats under reducerande förhållanden och har höga halter av järn strömmar ut ur marken och syresätts. Fe^{3+} bildar oxider och hydroxider i fast fas och kan observeras som roströda utfällningar i bäckbottnar.



Andra redoxkänsliga ämnen är kväve, svavel, mangan och arsenik. Det är i jordar som är utsatta för fluktuationer i vattenhalten som redoxprocesserna har betydelse. Eftersom redoxprocesserna ändrar ämnets laddning kommer det påverka dess förmåga att fastläggas, fällas ut, etc. och är därför viktigt för ett ämnets mobilitet i en akvifär, se vidare Naturvårdsverket rapport 4918 (Naturvårdsverket 1999a).

3.3.3.6 NEDBRYTNING

Nedbrytning kan ske bakteriellt, p g a oxidation eller andra kemiska processer. Biologisk nedbrytning innebär att organiska substanser bryts ned, varvid ofta andra nedbrytningsprodukter bildas, av levande organismer. Nedbrytningen kan ske aerobiskt (med tillgång på syre) och aneorobiskt (utan tillgång på syre). Olika organiska substanser bryts olika lätt ned under de olika förhållandena (se Tabell 1). Gemensamt för den biologiska nedbrytningen är dock behovet av sk elektronacceptorer. En elektronacceptor är ett ämne som tar emot en elektron under cellrespirationen och således reduceras. Exempel på vanliga elektronacceptorer i dessa

sammanhang är förutom syre (O_2), nitrat (NO_3^-), trevärt järn (Fe^{3+}), och sulfat (SO_4^{2-}).

Ett radioaktivt söderfall kan även (rent matematiskt och modellmässigt) jämföras med en nedbrytningsprocess. I sin enklaste form kan en nedbrytning beskrivas som en exponentiell avklingning (Sracek och Zeman 2004).

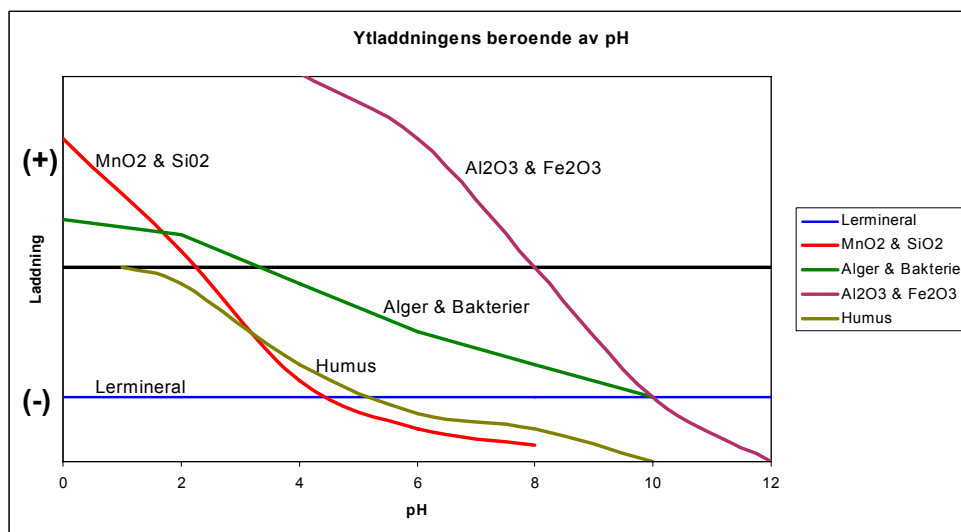
3.3.3.7 ADSORPTION

Adsorption innebär fastläggning av förorening och därvid både fördröjning och sänkning av föroreningskoncentration i grundvattnet. De olika föroreningar som tillförs grundvattensystemet kan fastläggas vid olika ytor på jordpartiklarna, sedimenten eller sprickytorna. Hur mycket som fastläggs beror av ämnets kemiska egenskaper, vilka ytor som finns tillgängliga samt förekomsten av de båda (koncentration av ämnet respektive specifik yta hos det geologiska materialet).

Exempel på reaktiva ytor är lermineral, hydroxy-oxider av järn, aluminium och mangan och organiskt material. På samma sätt som ämnen kan adsorberas kan även desorption av ämnen förekomma.

Adsorptionen sker i huvudsak genom i) jonbyte, ii) ytkomplexbildning och iii) hydrofob adsorption. Jonbyte är den svagaste formen av adsorption vilket innebär att en jonform av ett ämne binds elektrostatiskt till en markpartikel eller -yta. Hydrofob adsorption innebär att ämnen som är hydrofoba har en benägenhet att fastläggas till organiskt material. I dessa fall är därför mängden organiskt kol viktig.

De reaktiva ytorna kan vara både negativt och positivt laddade. De flesta ytorna är starkt pH-beroende (Figur 5). För svenska jordar och där normala pH-värden förekommer gäller att humusämnen (organiskt material) samt lermineral står för den övervägande delen av de negativa laddningarna, vilket innebär att dessa ytor binder katjoner (positivt laddade joner, t ex Ca^{2+}). Det förekommer även anjonbyte (negativt laddade joner, t ex $HAsO_4^{2-}$ genom ytkomplexbildning) på liknande sätt på positivt laddade ytor såsom järn-hydroxyoxider.



Figur 5. Semikvantitativ diagram av ytladdning som en funktion av pH för några vanliga ytor.

För en mer detaljerad genomgång av de processer som styr adsorption av kat- och anjoner, se Naturvårdsverket (2006b) eller Espeby och Gustafsson (2001).

Mängden ämne som kan bindas till en yta är även en funktion av koncentrationen i grundvattnet vilket kan jämföras vid en jämviktsreaktion där den lösta mängden av ämnet befinner sig i jämvikt med den adsorberade enligt (Sracek och Zeman 2004):

$$\equiv C_{ads} \Leftrightarrow C_{aq}$$

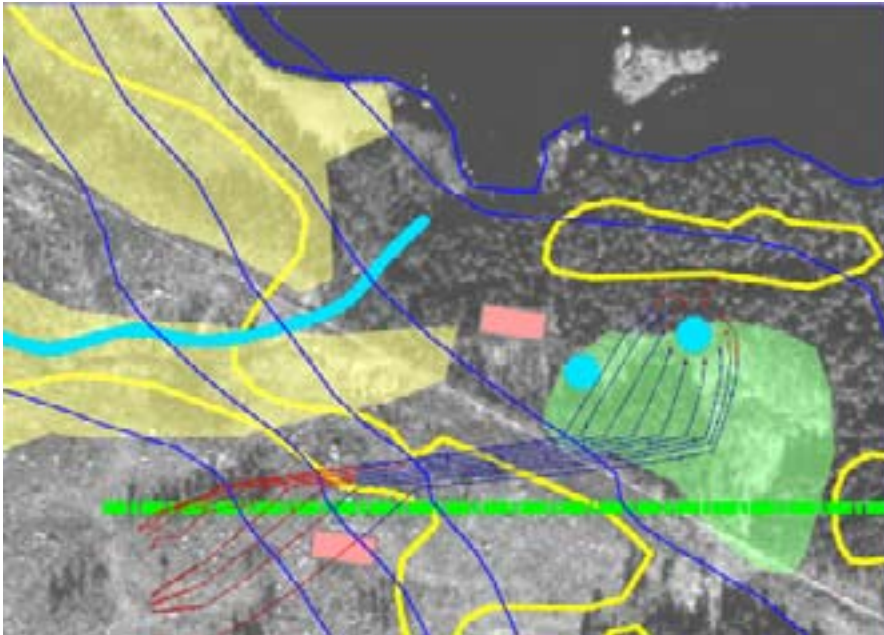
där C_{ads} = mängden av ämnet i adsorberad fas
 C_{aq} = mängden av ämnet i lösning

3.4 Komplexitet

Genom upprättandet av den konceptuella modellen skapas en förståelse för flödes-systemet och föroreningsituationen. Sedan börjar arbetet med att idealisera detta för att kunna upprätta en modell för simulering av flöden och spridning av föroreningar med grundvatten. Det finns en mängd olika programvaror med olika komplexitet. I flertalet av de avancerade programvarorna behöver man inte använda alla funktioner utan de kan även användas för mindre komplexa modeller, se vidare Naturvårdsverket rapport 5534 (Naturvårdsverket, 2006b).

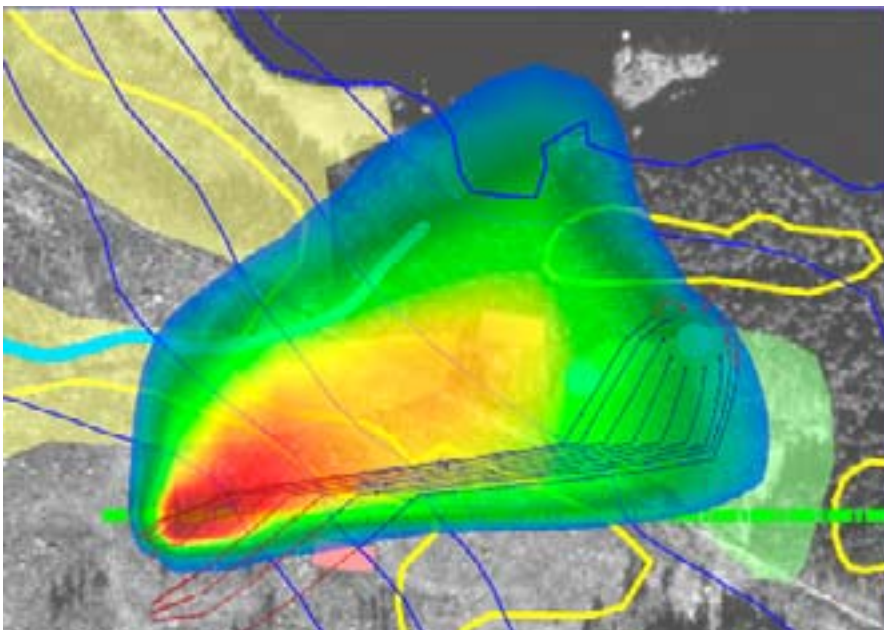
Som utgångspunkt för spridnings- och transportberäkningar krävs alltid någon form av flödesmodell vilken är utgångspunkt för fortsatta beräkningar av spridningsmönster och/eller transportberäkningar. Flödesmodellen kan beräkna vattenbalans, strömningsvägar, storlek på flöden och hastigheter, grundvattenbildning, in- och utströmningsområden, samt användas vid bestämning av akvifärens egenskaper etc.

Flödesmodellen kan ofta enkelt kompletteras med sk partikelspårning för att åskådliggöra flödesvägar och beräkning av transporttider för grundvattnet. Hänsyn tas i detta fall inte till diffusion, dispersion, sorption eller någon annan process vid dessa beräkningar och ingen ytterligare indata krävs vilket gör detta relativt enkelt. Partikelspårning kan ske framåt och bakåt. Partikelspårningen kan man således använda för att spåra flödeslinjer från till exempel en föroreningskälla (framåt) eller för att räkna baklänges t ex i fallet vi vill studera risken för att en brunn kan påverkas (Figur 6). Metoden ger en uppfattning av flödesriktningar och transporttider kring en brunn eller från en föroreningskälla men tar inte hänsyn till utspädning, fastläggning eller någon annan process.



Figur 6. Exempel på resultat från baklänges partikelspårning kring en brunn. Blå linjer representerar tryckpotential och den gröna streckade linjen representerar en krosszon i berggrunden.

Beräkning av föroreningstransport (masstransport) med hänsyntagande till diffusion, dispersion, sorption och/eller kemiska reaktioner såsom nedbrytning kräver ytterligare indata och programvara eller programmoduler. Typiska sådana programmoduler är RT3D och MT3DMS som båda utvecklats av U S Geological Survey. Dylka beräkningar ger dock en betydligt bättre bild av spridningsmönster av föroreningen samt så kan massbalanser (d v s hur mycket förorening släpper vi ut och vart tar den vägen) för föroreningen ställas upp.



Figur 7. Exempel på resultat från masstransportsimulering med MT3DMS samt partikelspårning (baklänges) kring en uttagsbrunn. Blå linjer representerar tryckpotential och den gröna streckade linjen representerar en krosszon i berggrunden.

Man skiljer på modeller som sätts upp under jämvikt (s k ”steady state”) och transienta modeller. En jämviktsmodell visar situationen vid en tidpunkt då hela modellen är i jämvikt medan en transient modell är en modell som beskriver tidsmässiga variationer av flöden, nivåer, transport m m. En sådan modell kräver relevanta tidsserier att kalibrera modellen emot och blir därför betydligt mer komplex.

Beskrivning av heterogenitet hos akvifären rörande hydraulisk konduktivitet, magasinsegenskaper, sorption, nedbrytning, o s v kan göras på enkla respektive mycket komplexa sätt.

Sammanfattningsvis kan sägas att användningen av numeriska beräkningsmodeller för beräkning av föroreningstransport kan göras på många olika sätt och alltifrån relativt enkla modeller till mycket komplexa modeller kan upprättas. Det är viktigt att modellen inte blir mer komplex än att den ger de svar som vi är ute efter. Ofta är en stationär och transient modell egentligen densamma. Modellen är stationär när indata är stationära och transient när indata är transienta (dvs icke-stationära eller dynamiska). Vi definierar ofta en modell som transient då den är kalibrerad mot transienta data.

3.5 Val av modellverktyg

När det gäller val av modellverktyg finns det två nivåer på val. Ett där man tar investeringsbeslut att köpa en ny programvara, och en där det gäller att välja om det går att använda befintlig programvara och i så fall vilken programvara (eller vilka moduler).

Inköp av ny programvara är oftast ett beslut som tas av avdelningschef eller erfaren specialistkonsult. Vanligen uppgraderar man någorlunda regelbundet befintlig programvara. När denna programvara vidareutvecklas så får man genom denna successiva uppgradering med tiden en mer kapabel programvara. Om det är uppenbart att denna programvara inte är lämpad (eller överhuvud inte klarar av) att utföra önskade simuleringar i ett projekt skall man överväga att annan programvara används.

I samband med att ny programvara inskaffas brukar det förutom kostnaden för inköp även bli (ibland avsevärda) kostnader för att lära sig den nya programvaran. Inköpspriset för en ny programvara kan vara marginellt jämfört med kostnaden för att lära sig använda den nya programvaran.

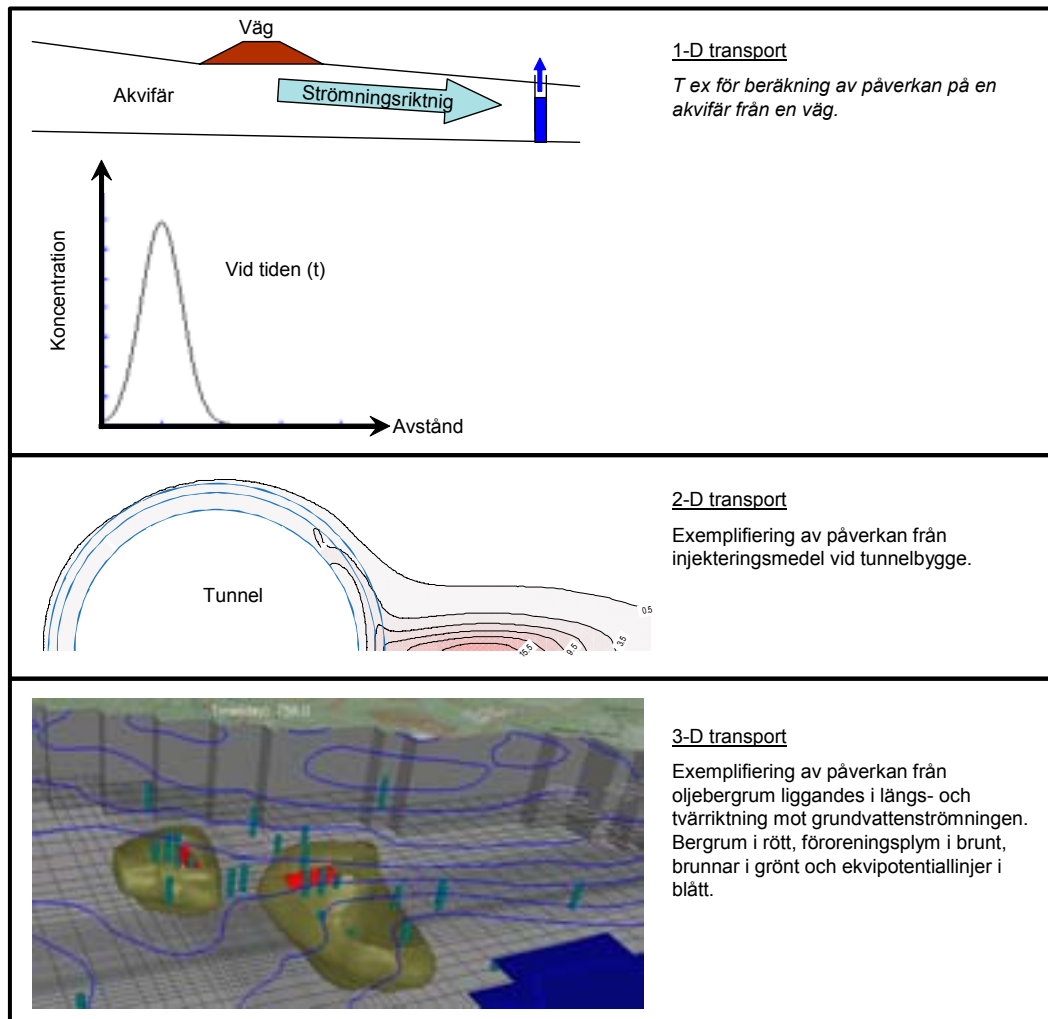
När det gäller att ta sig an ett nytt modelleringsuppdrag, blir frågeställning för modellören istället vanligen:

- Kan jag modellera den frågeställning vi har med vår befintliga programvara?
- Kommer användning av befintlig programvara att innebära någon form av begränsning för modelleringsarbetet? I så fall, är detta acceptabelt? Om inte, vilken programvara klarar av denna typ av frågeställningar?

En genomgång av ett antal existerande programvaror och dessa programvarors struktur har utförts av inom ramen för Naturvårdsverkets kunskapsprogram HÅLLBAR SANERING (Naturvårdsverket. 2006b).

Man måste vid val av modell även ta ställning hur detaljerad modell man avser att bygga upp. Detta beror bland annat på tillgång till indata och på vilken frågeställning som skall besvaras. ”Ju enklare ju bättre” är ofta ett gott råd. Behövs verkligen 3-dimensionell (3-D) flödesmodellering, eller räcker 2-D eller 1-D?

För att avgöra nödvändig dimensionalitet måste man noga överväga och utvärdera hur föroreningen förväntas sprida sig. Om den kan förväntas sprida sig som en plym från en väl definierad källa som är liten i förhållande till akvifärens storlek och mäktighet måste sannolikt modellering och simulering ske i 3-D. Om föroreningen härrör från en långsträckt källa orienterad tvärs grundvattenflödesriktningen kan modellering och simulering behöva ske i 2-D om akvifären är mäktig. Föroreningstransport från en lång och bred föroreningskälla i en akvifär med måttlig eller ringa mäktighet kan ofta simuleras i 1-D (Figur 8).



Figur 8. Illustration av föroreningstransport i 1-D, 2-D och 3-D.

3.5.1 Olika typer av numeriska modeller

Det finns två huvudtyper av modeller vilket beror av hur modellerna löser de partiella differentialekvationer som beskriver vattenflödet. Dessa bägge typer är FDM-modeller och FEM-modeller. FDM är förkortning av "Finit Differens Modell" men även "Finit Differens Metod". På samma sätt är FEM förkortning av både "Finit Element Modell" och "Finit Element Metod". Dessa olika modelltyper beskrivs mer i detalj i exempelvis Pinder och Gray (1977), Anderson och Woessner (1992) och Domenico och Schwartz (1997).

Något generaliserat och förenklat kan man säga att finita differensmodeller är enklare att förstå, mindre flexibla speciellt beträffande komplex geometri, och kräver mindre datorkapacitet. Finita elementmodeller är på samma sätt något mer komplicerade att förstå matematiskt, mer flexibla beträffande komplex geometri och kräver något mer datorkapacitet. På den tiden som stordatorer var rådande (1970-tal till sent 1980-tal) var Finita Elementmodeller relativt vanliga för olika typer av grundvattenmodeller. När persondatorerna gjorde sitt genombrott hade de

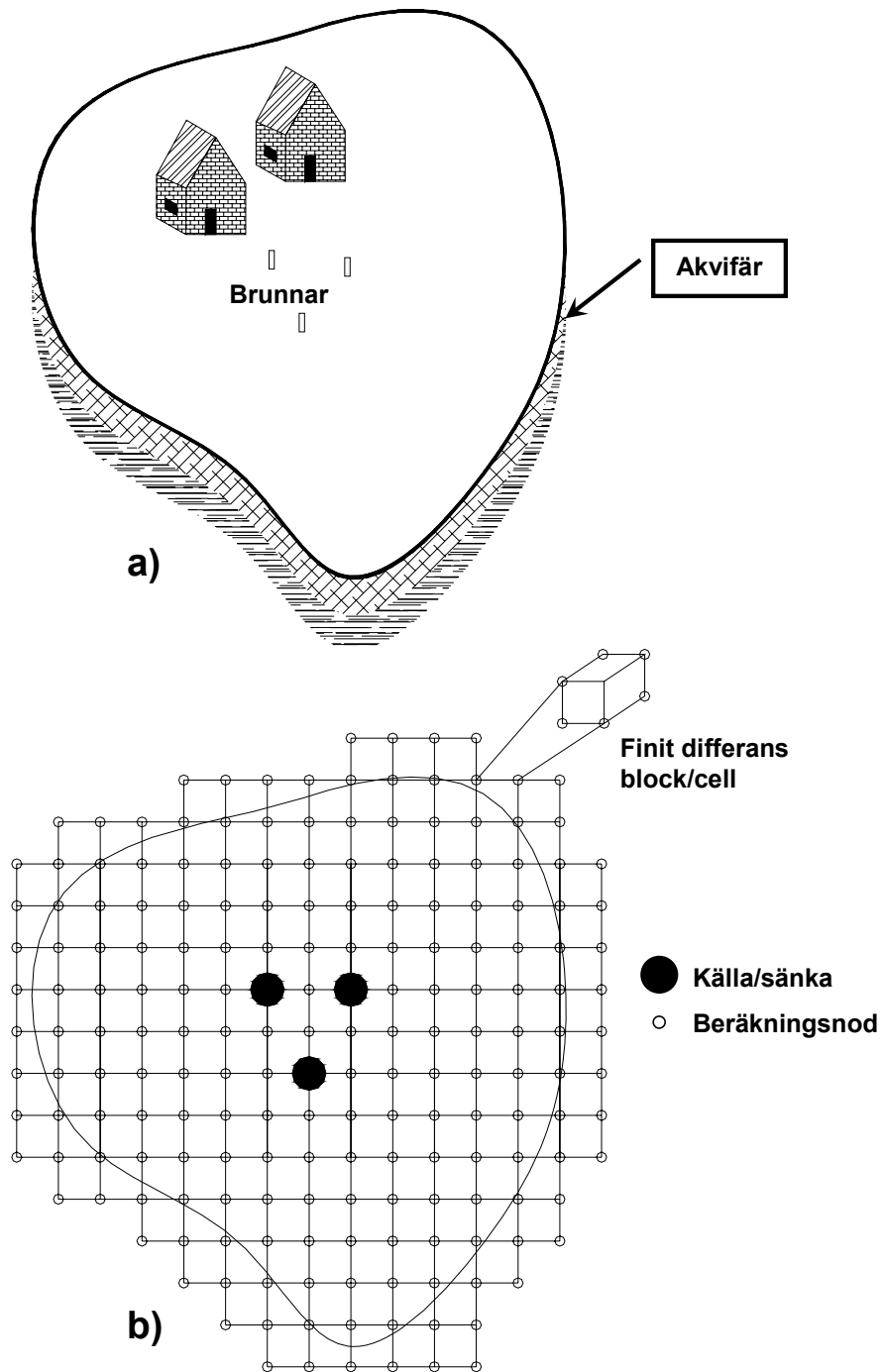
(i förhållande till stordatorerna) ganska liten beräkningskapacitet. Detta gjorde att Finita Differensmodeller fick ett stort försprång vid användning på persondatorer. Under senare år (från sent 1990-tal och början av 2000-talet) har persondatorerna blivit så kraftfulla att finita elementmodeller har börjat få större spridning igen, även för grundvattenmodellering, på PC.

Det konstateras att en del av skillnaderna mellan FDM och FEM har blivit mindre uttalade för användaren idag i och med att användargränssnittet i många program hjälper till att importera, transformera och interpolera olika indata.

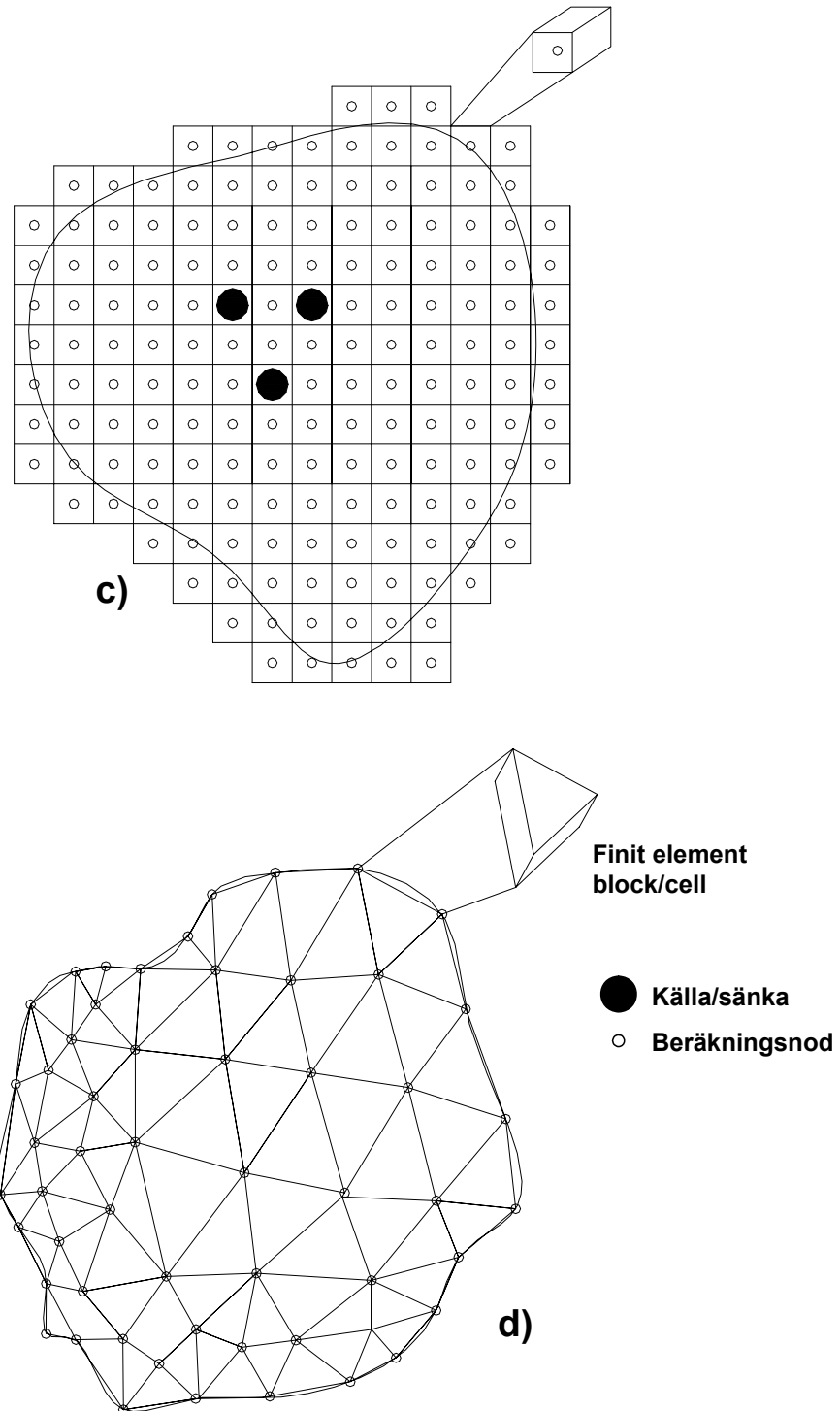
Gridutformningen, d v s uppdelningen av modellområdet i celler eller element, beror på hur akvifärens begränsningar är orienterade, förekomst och orientering av olika egenskapsområden, och vilka skeenden som kan förväntas.

När man använder en modell som baserar sig på FDM brukar manualen ange en största skillnad mellan längd och bredd på celler, samt största skillnad i storlek mellan vissa egenskaper (speciellt hydraulisk konduktivitet eller transmissivitet) hos angränsande egenskapsområden. Detta för att man inte skall riskera numeriska problem (med bristande konvergens) när man skall utföra sin simulering. Relationen anges ofta som en kvot eller faktor, till exempel att förhållandet mellan längsta och kortaste sida på en cell inte får överstiga 5:1. En stor cellhöjd i förhållande till bredd/längd kan även ge numeriska problem.

I Naturvårdsverkets Rapport 5534 (Naturvårdsverket, 2006b) ges en god överblick av flertalet av de modeller som kan användas för simulering av transport med grundvatten. Danmarks Miljöstyrelse har gett ut riktlinjer och anvisningar för hur grundvattenmodeller skall sättas upp (Henriksen et al., 2001) som kan vara till stöd vid modelleringsarbeten.



Figur 9. Exempel på hur ett grundvattenmagasin a) representeras i b) en Finit Differens Modell med "mesh centered nodes", d v s där beräkningsnoderna ligger i cellernas hörn (efter Domenico och Schwartz 1997).



Figur 10. Exempel på hur ett grundvattenmagasin representeras i c) en Finit Differens Modell med "block centered nodes", dvs där beräkningsnoderna ligger i cellernas mitt d) en Finit Element Modell med triangulära finita element.

Rent generellt kan man säga att man med en Finit Element Modell (FEM) slipper generera onödigt många element jämfört med det antal celler en Finit Differens Modell (FDM) måste delas in i (Figur 10). Där modellen skall beskriva processer med god precision skall element- respektive cellstorleken vara liten. Ett exempel är att avsänkningen vid uttag (pumpning) ur en brunn blir större ju närmare man kommer en brunnen. Om förhållandena kring brunnen skall beskrivas rimligt detaljerat måste cellerna bli mindre ju närmare brunnen de är.

Motsvarande gäller vid transienta (ickestationära) simuleringar. När man kan förvänta stora och snabba förändringar i tryckhöjd bör det tidssteg som modellen använder vid beräkningen vara litet. Så är till exempel fallet när man börjar pumpa i en brunn. Allt eftersom tiden går kan tidssteget som modellen använder vid simuleringen sedan förlängas.

Om man har ett egenskapsområde med låg hydraulisk konduktivitet bredvid ett område med hög hydraulisk konduktivitet kan det ibland vara nödvändigt att ”lägga in övergångszon(er)” i modellen för att undvika numeriska problem vid beräkning. Någon sådan övergångszon existerar ofta inte i verkligheten. I detta fall kommer simuleringsmodellen att i viss utsträckning avvika från den fysiska verkligheten, för att simuleringsresultaten skall få en bättre överensstämmelse med verkliga förhållanden. Kom ihåg att en modell alltid är en förenklad avbildning av verkligheten och inte verkligheten själv! En modell beskriver bara vissa aspekter av verkligheten (Figur 11).



Figur 11. Exempel på en enkel modell.

3.6 Inventering och sammanställning av underlagsmaterial

Eftersom den övergripande problemställningen och det övergripande projektet sannolikt pågått någon tid brukar det finnas en hel del underlagsmaterial.

I ett tidigt skede av grundvattenmodelleringen kan det kanske räcka med att skaffa sig en översikt av vad för underlagsmaterial som finns, men så snart omfattning av modelleringsuppdraget är klart och man har en budget är det viktigt att samla in relevant underlagsmaterial i användbar form.

Information som man kan behöva omfattar bland annat:

Topografi

Geologisk information

- Jordarter, berg i dagen
- Jord- och berglagerföljder
- Bergöveryta
- Tektonik (sprickor, sprickzoner, etc)

Hydrogeologisk information

- Grundvattennivåer
- Övrig hydrogeologisk information – akvifärens hydrauliska egenskaper / magasinsegenskaper (från provpumpningar och laborationsanalyser)
- Förekomst av saltvatten
- In- och utströmningsområden
- Grundvattnets sammansättning (pH, redox, jonsammansättning, etc.)

Hydrologisk information

- Nederbörd
- Avdunstning
- Grundvattenbildning
- Vattennivåer och vattenföring i ytvattendrag
- Förekomst av antropogena sänkor och källor
 - brunnar eller infiltration inom aktuellt område
 - dränerande objekt (tunnlar etc.) inom aktuellt område

Föroreningsinformation

- Förekomst av förorenad jord (omfattning: yta, mäktighet, sammansättning)
- Vattenkvalitet och påvisade föroreningar i grundvattnet

3.6.1 Kvalitet och tillgång på indata

För att modellera och simulera ämnestransport i grundvatten krävs ett antal nödvändiga indata. Kvalitet, mängd och typ av indata styr hur komplex modellen kan vara samt vilka resultat som kan förväntas från modelleringsarbetet. En enklare flödesmodell som beskriver grundvattensituationen vid jämvikt kräver en mindre mängd indata. En mer komplex modell för transienta förhållanden (d v s variation

av flöden etc. med tiden) och där hänsyn dessutom tas till advektion, kemiska och/eller biologiska processer kräver betydligt mer indata (se exempel i Tabell 2).

Tabell 2. Exempel på komplexitet för en grundvattenmodell och krav på indata, rand- och begynnelsevillkor

Komplexitet	Indata (minimum krav)	Rand- och begynnelse- villkor (minimum krav)	Kommentar
Flödesmodell	Transmissivitet, T ($K \cdot b$)	Grundvattenbildning Trycknivå(er) Flödesuttag (konstant trycknivå, flödesvillkor, uttagsbrunnar etc.)	Jämvikt
Partikel-spårning	Som ovan Effektiv porositet (n_e)	Som ovan	Jämvikt
Masstransport Diffusion Dispersion Sorption Nedbrytning Avångning	Total porositet (n) Konstanter/koefficienter för respektive process	Som ovan Initiell(a) koncentration(er)	Jämvikt
Transient flödesmodell	Som för stationär flödesmodell samt Specifik magasinskoefficient (S_s) och/eller vattenavgivningstal (S_y)	Som för stationär flödesmodell samt Flödesuppgift ¹⁾	Transient ²⁾

¹⁾ Krävs i princip för god kalibrering av modellen.

²⁾ Varierar med tiden.

Genom inventeringsarbetet har tillgången och kvaliteten på de indata som används för modelleringsarbeten bedömts. Generellt kan sägas att kvalitet och mängd varierar stort mellan olika projekt, ofta beroende på storleken på desamma. Kvaliteten på de data som används i modellarbetet påverkar självklart de resultat som erhålls genom modelleringsarbetet. En stor osäkerhet i indata genererar en större osäkerhet i de resultat som modellen genererar. Vissa trender angående indatakvalitet har dragits vilka presenteras i Tabell 3. Trots osäkerheter finns mervärden som motiverar modellering. Till exempel måste vi upprätta en vatten-/massbalans och göra en känslighetsanalys över vilka parametrar som kommer att påverka föroreningstransporten, utspädningen, etc. Vi kan genomföra olika scenarionalyser över föroreningssituationen och ta fram underlag för upprättandet av åtgärds- och kontrollprogram etc.

Tabell 3. Tillgång och kvalitet på indata för grundvattenmodeller avsedda för simulering av föroreningstransport i grundvatten (Naturvårdsverket 2006a).

Indata	Kommentar	Bedömning, tillgång/kvalitet
Topografi	Överytan / markytan	Bra
Geologi	Geometri i rum av de geologiska bildningarna.	Bra - måttlig
Grundvattennivåer	Nivåer och fluktuationer.	Måttlig
Grundvattenkemi	Text information som visar på hydraulisk kontakt mellan akvifärer, omsättning, etc.	Måttlig - dålig
Specificerat uttag / tillförsel av vatten	Uttag från brunnar, avsänkningar av grundvattennivåer, konstgjord infiltration etc.	Måttlig ¹⁾
Akvifärens hydrauliska egenskaper	Hydraulisk konduktivitet, magasinsegenskaper, effektiv porositet.	Måttlig ²⁾
Koncentration föroreningskälla	Halter och antal provtagningar, koncentrationsvariationer och -fördelningar.	Måttlig - dålig
Spridnings och fastläggningsegenskaper		Dåligt ^{3, 4)}
Nedbrytning	Uppgifter om nedbrytning, konstanter alt	Dåligt ^{3, 4)}
Magasinsegenskaper	(behövs vid transienta simuleringar och vid masstransportmodeller)	Dåligt ⁴⁾
Grundvattenbildning (naturlig)		Dåligt ⁵⁾
Avrinningen eller netto-nederbörd		Bra – regionalt ⁵⁾ Dåligt – lokalt ⁵⁾

- 1) Ett typiskt undantag är dock SGU:s berggrumsanläggningar där goda flödesuppgifter finns från bortpumpning av inströmmande grundvatten till berggrumsanläggningarna (samt kommunala vattenförsörjningsbrunnar och anläggningar för konstgjord infiltration).
- 2) Erfarenhet och kunskap finns dock.
- 3) Erfarenhet och kunskap synes i stor omfattning saknas.
- 4) Erfarenhet och kunskap om parameteriseringen av dessa typer av indata synes i stor omfattning saknas.
- 5) Naturvårdsverket 2006a

Anm: Observera att god existerande information beträffande geologi, grundvattenuttag, akvifärens hydrauliska egenskaper och magasinsegenskaper brukar finnas vid och i anslutning till kommunala vattentäkter, men brukar oftast saknas i andra sammanhang.

3.6.2 Interpolation

I hela den numeriska modellen krävs parametervärden. Dessa baserar sig på information som härrör från ett mindre antal punkter där provtagning, hydraultest eller andra fält- och laborationsundersökningar har utförts. Hur man interpolerar mellan dessa enstaka värden kommer att tydligt påverka simuleringsresultaten. Man kan göra manuell utvärdering och interpolation, eller låta något form av dataprogram interpolera. Det är inte givet att den datorbaserade interpolationen blir bäst, men det kan vara lättast att i detalj beskriva hur den är utförd. Interpolationsmetod, och

parametervärden i denna metod måste då anges. Vid manuell interpolation kommer erfarenhet och bakgrundsinformation att medverka till hur interpolationen görs.

Oavsett interpolationsmetod är det viktigt vid redovisning av simuleringsresultat att det klart framgår hur interpolering skett.

3.6.3 Hantering av osäkerheter

Vid hantering av osäkerheter söker man värdera de mest väsentliga källorna för osäkerhet och storleken på osäkerhet för dessa.

Osäkerheter beror bland annat på:

- Heterogena eller homogena hydrogeologiska förhållanden
- Begränsad mängd information (få provtagningspunkter, provpumpningar etc.) i förhållande till aktuellt områdes storlek och förekommande variation i parametervärden
- Osäkra mät- eller analysmetoder.
- Ej säkert verifierade beräkningsmetoder eller beräkningsprogram.
- ”Buggar” i datorbaserade beräkningsprogram (som exempelvis kan medföra felaktiga beräkningsresultat).

Osäkerheterna kan delas upp i olika typer av osäkerheter:

- Osäkerheter beträffande konceptuell modell
- Osäkerheter beträffande modellparametrar
- Modellosäkerheter
- Avsaknad av viktiga mekanismer och processer
- Fel, felaktig användning av modellen

Vid värdering av osäkerhet kan man genomföra parameteranalyser. Man ser då på osäkerheten hos indata och hur denna slår igenom som osäkerhet på modellparametrarna efter kalibrering/validering, samt vad detta i sin tur innebär i form av osäkerhet på resultaten. Detta görs exempelvis genom att värdera osäkerhet på modellparametrarna vid invers modellering och variera parametrarna t ex 5% för att se vad det ger för variation på resultaten.

Osäkerheter kan också hanteras genom att man:

- Beskriver vilket underlag man använt sig av samt hur man gått tillväga vid uppställning av modell, och simuleringar.
- Söker skaffa rimligt stor mängd information - och om detta inte låter sig göras antingen inte redovisar några simuleringsresultat, eller beskriver intervall inom vilka resultaten förväntas.
- Verifierar beräkningsresultat mot analytiska lösningar där så går att göra. Detta gäller i synnerhet vid användning av helt ny programvara, men även vid en ny version av etablerad programvara.
- Bearbetar indata statistiskt – om tillräcklig mängd indata för detta finns
- Analyserar vad som är ”worst case” respektive ”mest sannolikt fall”

- Gör ”Monte Carlo-simulering” där man använder fördelningsfunktioner för indata

3.6.4 Behov av kompletterande information

Efter det att man inventerat förekomst av underlagsmaterial, och skaffat in den information som är lätt tillgänglig måste man värdera denna. Är informationen tillräcklig för att bygga upp en grundvattenmodell med den noggrannhet man eftersträvar. Om inte, vad för ytterligare information krävs?

I detta moment definieras här efter vad för kompletterande information som bör införskaffas. Detta kan innebära att omfattande fältarbete måste sättas igång. Finns det tid och pengar för sådant? Eller kan ambitionsnivån beträffande grundvattenmodelleringen justeras?

3.6.5 Behov av kompletterande kompetens

En annan fråga som är väl så viktig är om det behövs kompletterande kompetens. Har jag/vi den kompetens som behövs för att utvärdera tillgängligt underlagsmaterial beträffande geologi, hydrogeologi, hydraulik och kanske framför allt beträffande kemiska frågeställningar? Och för att sedan genomföra och utvärdera tänkt grundvattenmodellering? Finns kompetensen inom aktuell projektorganisation (vårt företag, andra företag vi samarbetar med inom projektet, eller hos beställaren)? Eller hur kan vi knyta till oss nödvändig kompetens?

4 Modelluppbyggnad - flödesmodell

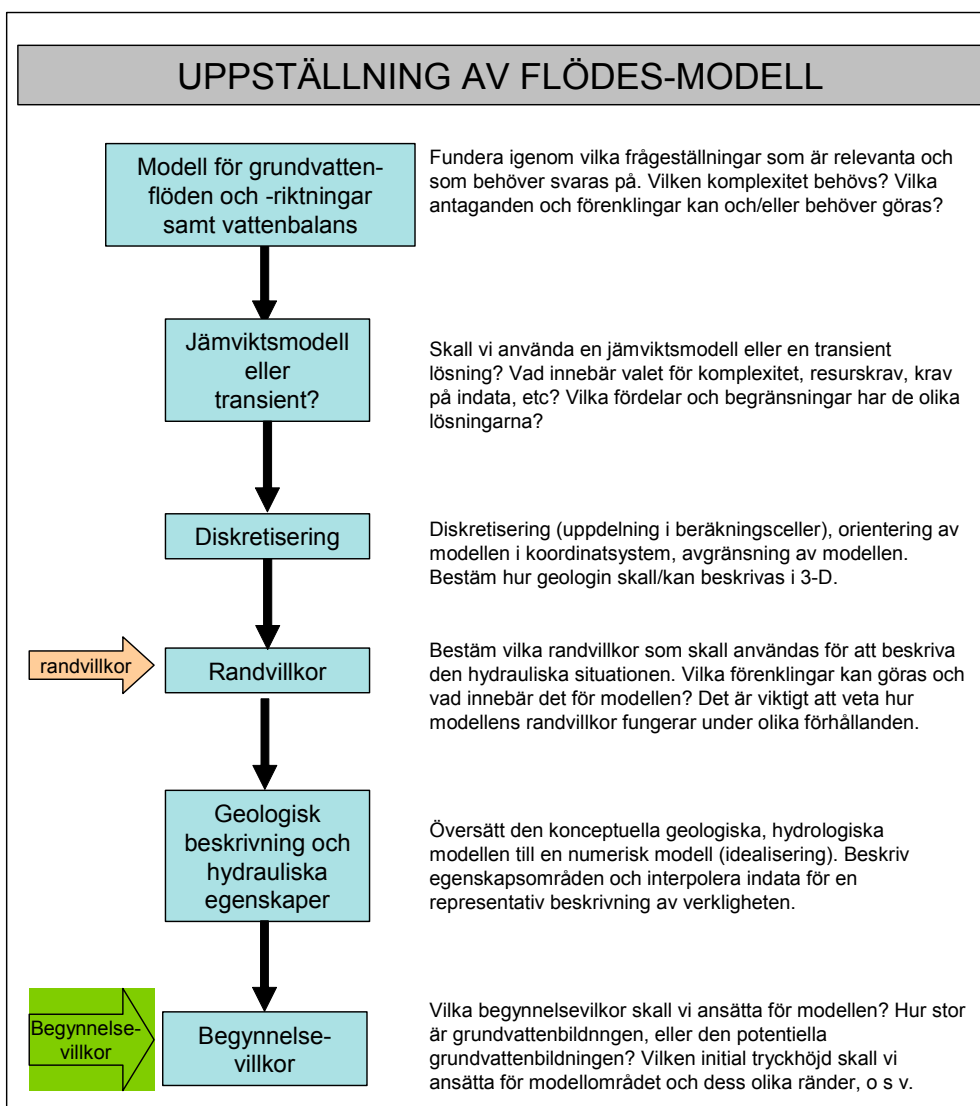
När man bygger upp en grundvattenmodell för simulering av föroreningstransport upprättar man först en flödesmodell, och därpå lägger man till och aktiverar en eller flera tilläggsmoduler för beräkning av föroreningstransport.

När det gäller modelluppbyggnad måste konstateras att den beror dels på hur förhållandena är på aktuell plats, vilken programvara som används, vilken budget som modelleringen har, samt på modellörens erfarenhet och preferenser. Olika modellörer gör olika modeller beträffande ett och samma objekt, men dessa modeller kan vara mer eller mindre snarlika.

Vissa överväganden i samband med modelluppbyggnad är identiska eller snarlika beträffande de bägge huvudtyperna av numeriska modeller ”finita differens modeller” och ”finita element modeller”, medan vissa överväganden är kopplade enbart till en av dessa metoder. Detta beskrivs mer nedan.

4.1 Arbetsordning

Det är viktigt att minnas att modelleringsarbetet är en process. Det är svårt att ge en generell beskrivning av exakt i vilken ordning som allt skall ske och ju mer vi modellerar ju mer lär vi oss om det grundvattensystem som vi skall beskriva. Det är ofta bra att börja med en mycket enkel (ofta enklare än man tror) modell för att få en uppfattning om storleksordningar på grundvattenbildning, flöden, hydraulisk konduktivitet, grundvattennivåer etc. En annan fördel med att ställa upp en enkel modell i ett initialt skede är att man kan studera hur sina randvillkor fungerar. Vi kan t ex snabbt testa om ett uttag kommer påverka våra täta ränder i utkanten av modellen. I så fall behöver vi tänka om och vi har då inte lagt för mycket tid på detta. Ligger ränderna långt bortom eventuell påverkan kan vi kanske istället krympa modellen, o s v. Figur 12 ger en enkel beskrivning över de huvudsteg man behöver ta sig igenom för att ställa upp en modell.



Figur 12. Arbetsgång för uppställning av flödesmodell.

4.2 Diskretisering, orientering och koordinatsystem

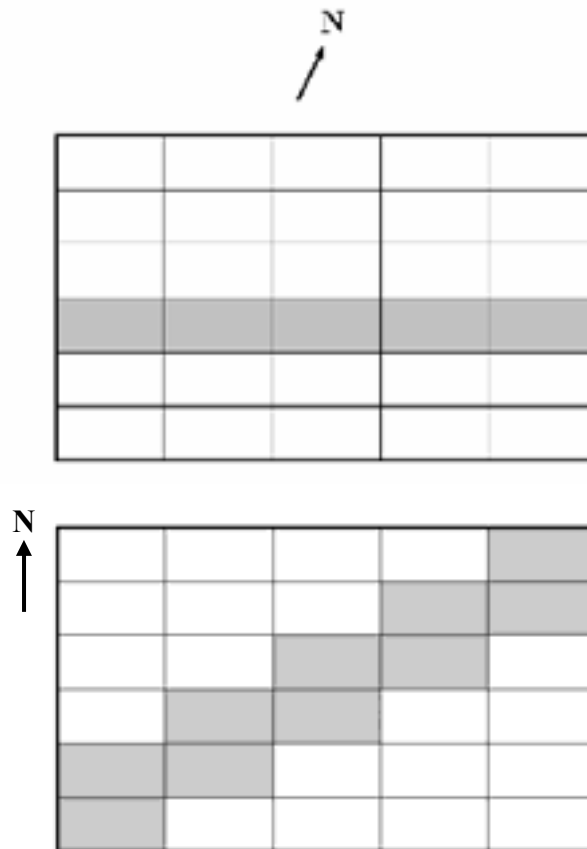
En numerisk lösning av modellen kräver att modellområdet delas upp i beräkningsceller (Figur 9, Figur 10). Varje beräkningscell har enskilda parametervärden som beskriver de aktuella egenskaperna (t ex hydraulisk konduktivitet eller fastläggningsförmågan). Uppdelningen av området i celler följer oftast de kända geologiska enheterna i området där uppdelningen är större i mer ”intressanta” områden (d v s mindre celler).

Modellens orientering är något som man måste ta ställning till speciellt om man avser att använda sig av en finit differensmodell. I finit differensmetod bygger man upp en modell av celler vars sidor är vinkelräta mot varandra. Cellerna kan ha varierande längd, bredd och höjd.

För att inte få alltför många celler i en modell kan man försöka orientera modellen med en huvudaxel (x- eller y-axeln) längs med dominerande struktur(er). Detta kan vara längs med en huvudsaklig sprickriktning eller krosszon, eller längs med huvudriktningen på en rullstensås eller dalgång.

Tidigare när tillgänglig datorkraft var begränsad var det viktigt att hålla nere antalet celler i en FDM-modell för att exekveringstiden (d v s beräkningstiden) i datorn inte skulle bli för lång. Idag är datorkraften betydande i de flest persondatorer, och skälet att hålla nere antalet celler är snarast att underlätta indatahantering.

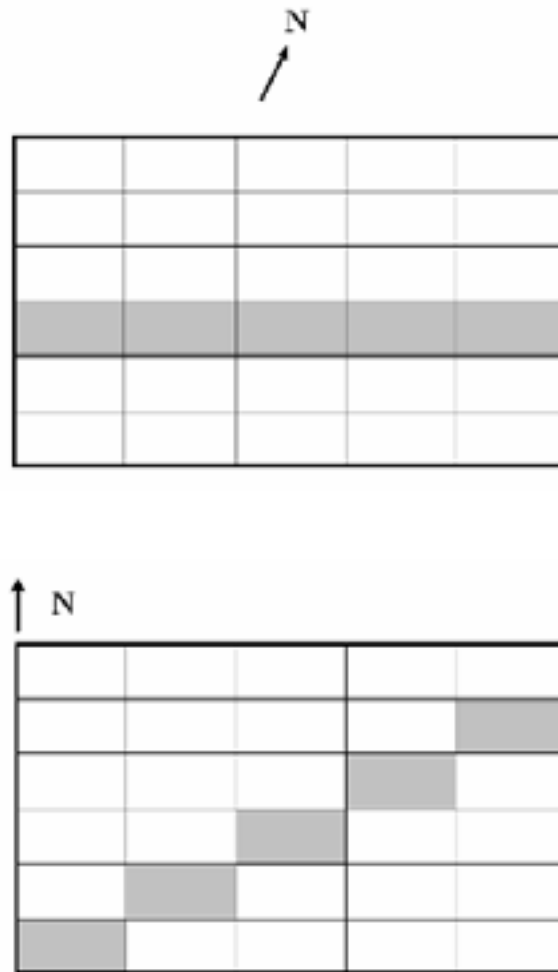
Fördelen med att ha en huvudriktning i FDM-modellen som sammanfaller med dominerande geologiska och hydrauliska strukturer är att man lättare kan beskriva geometrin (och olika egenskapsområden) i modellen, och det med färre celler.



Figur 13. a) Sprickzon beskriven i modell med en huvudriktning parallell med zonen riktning
b) Samma zon beskriven i en modell med huvudriktningar skiljda från zonen riktning (kolumnerna är här orienterade i N-S riktning)

I förra figuren visades hur en vattenförande zon representeras i en FDM-modell. Eftersom flöde i modellen bara beräknas i strikt x- och y-riktning (samt i z-riktning) måste vid stor skillnad i vattenförande förmåga mellan zon och omgivning en vattenförande zon beskrivas med zig-zack form, d v s flödet i zonen måste kunna ske helt i zonen.

En struktur med lägre vattenförande förmåga (d v s som är tätande) kan dock representeras med lägre hydraulisk konduktivitet i en cell per kolumn (Figur 14).

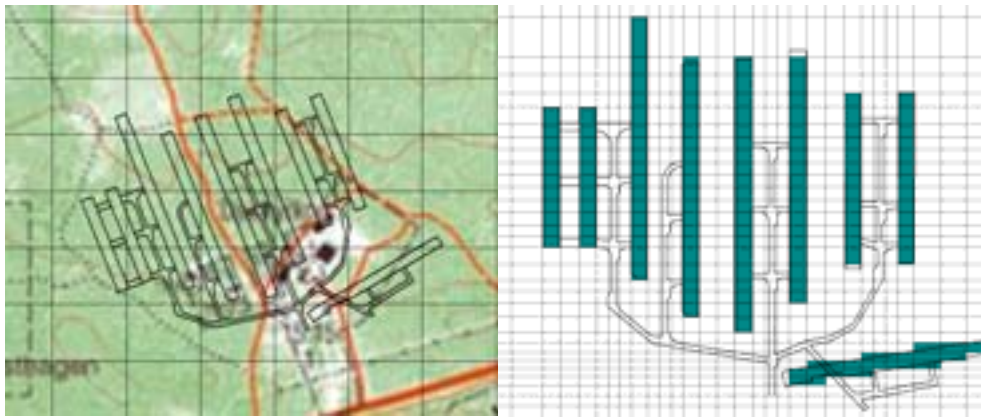


Figur 14. a) Tätande barriär beskriven i modell med en huvudriktning parallell med zonens riktning och b) Samma barriär beskriven i en modell med huvudriktningar skiljda från zonens riktning (kolumnerna är här orienterade i N-S riktning)

Nackdelen med att ha huvudriktningar som avviker från väst-öst respektive söder-norr är att man kan bli tvungen att transformera mellan globalt koordinatsystem (N-S) och lokalt koordinatsystem för olika indata.

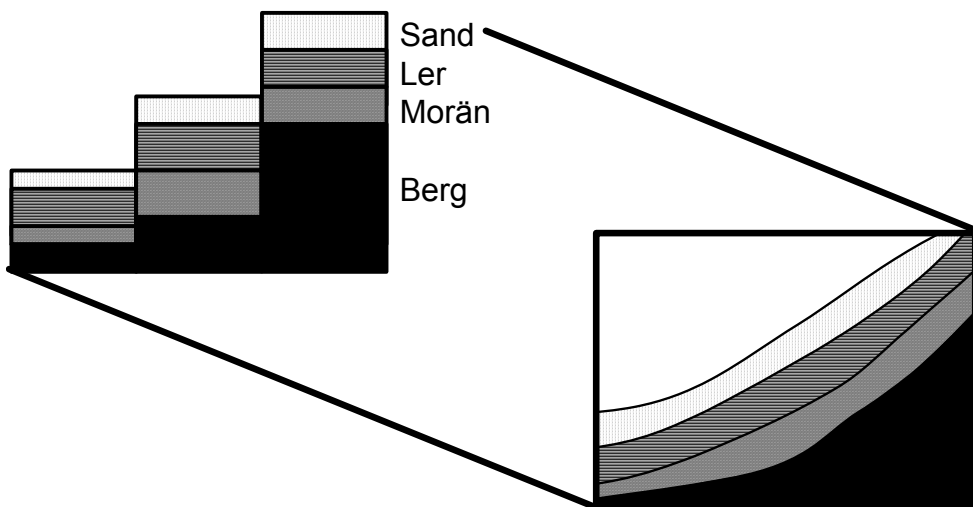
Allmänt är det viktigt att vara uppmärksam på vilket/vilka koordinatsystem och höjdsystem som indata finns i. Man bör uppmärksamma att koordinater i "Rikets nät" kan redovisas i olika varianter, och att många kommuner har lokala koordinatsystem. Samma sak gäller höjdsystem.

I samband med redovisning av grundvattenmodellering skall tydligt anges vilket eller vilka koordinat- och höjdsystem som har använts.



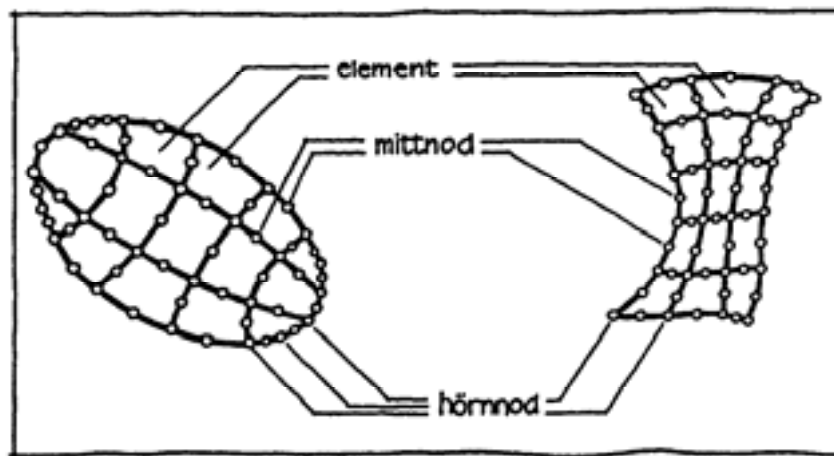
Figur 15. Exempel på hur koordinatsystemet justerats (vridits) för att bättre passa de berggrum som skall beskrivas i modellen.

En tredimensionell FDM modell är in princip uppbyggd av flera lager som lagts på varandra. Vid idealisering av geologiska lager/enheter kan det bli svårt att helt efterlikna verkligheten. Till exempel kan branta sluttningar skapa problem vid idealiseringen av geologin då det kan bli svårt att få kontinuerliga lagerflöjder i modellen (Figur 16).



Figur 16. Diskretisering av en sluttning med kontinuerliga (i x- och y-led) lager kan skapa problem då modellen får svårt med kontinuerligheten hos lagren utan att skapa många celler.

Finite Element Modeller brukar vara betydligt mer flexibla när det gäller att hantera olika geometriska data (som avgränsning av akvifären, sprickzoner etc). Hur flexibel en FEM-modell är beror dock på vilken typ av finita element som utnyttjas.



Figur 17. Exempel på en typ av finita element ("quadratic isoparametric elements"), med både hörnnoder och mittnoder på elementens sidor. Med denna typ av finita element kan även komplexa geometrier beskrivas med ett fåtal element (från Naturvårdsverket 1985).

4.3 Modellavgränsning

Den numeriska modellen kan inte ha en obegränsad utsträckning, utan måste avgränsas. Dess yttre gräns (d v s begränsning eller avgränsning) i en viss riktning kallas på engelska för boundary. Villkoren som gäller vid gränsen kallas "boundary conditions". På svenska använder man ofta uttrycken rand och randvillkor. Detta kommer från ett matematiskt synsätt. Begreppet "rand" heter i plural "ränder".

Modellen måste ha en sådan rumslig omfattning att den inkluderar de förlopp och processer som skall studeras. Vidare måste modellens avgränsningar ("ränder") vara väl definierade, och kontrollerbara. En modellrand måste även den efterlikna verkligheten, och får inte införa någon störning i det område i modellen, som belyses av simuleringarna, så att simuleringensresultaten blir felaktiga.

4.3.1 Val av lägen för modellrand

För att vi skall kunna definiera förhållanden (randvillkor) vid modellens yttre begränsningar (d v s modellens ränder) måste vi ha god information vid dessa lägen. Alternativt måste det gå att anta förhållanden med god säkerhet.

4.3.2 Typ av modellrand

De olika typer av modellränder som brukar finnas är:

- Nollflödesrand - tät rand
- Konstant tryckhöjd
- Infiltration
- Drän
- Konstant flöde
- Variabel tryckhöjd
- Variabelt flöde

- Rand med inducerat flöde
- Fast gradient

Nollflödesrand - tät rand: Denna typ av rand motsvarar en helt tät begränsning (eller möjligen en begränsning med så lågt flöde detta kan bortses från i förhållande till övriga flöden i modellen). Detta kan exempelvis vara ett tätt berg i anslutning till en genomsläpplig jordakvifär, eller en spont som är tämligen (men inte helt) tät. En nollflödesrand kan också läggas längs en stabil strömlinje. I detta senare fall sker grundvattenströmning ju längs med randen, men inte tvärs den.

Konstant tryckhöjd: Vid en rand med ”constant head” råder en konstant tryckhöjd. Denna kan variera från cell till cell, eller vara lika för hela randen. Vid en transient (icke-stationär) simulering kan tryckhöjden ibland definieras att variera över tiden enligt angivna värden. Vi får då en rand med variabel tryckhöjd. Sjöar och andra ytvatten beskrivs ofta som konstanta trycknivåer. Det resulterar i att sjön kan fungera som både källa och sänka beroende på om grundvattennivån ligger under eller över den bestämda trycknivån.

Infiltration: Denna typ av randvillkor appliceras oftast på det översta lagret i modellen för att simulera grundvattenbildningen eller möjlig grundvattenbildning. Det är ofta svårt att i fält bestämma grundvattenbildningen och man kan med fördel använda sig av andra modeller som är specifikt utformade för att beräkna detta (exempel på sådan modell är DRASTIC, se Knutsson och Morfeldt, 2002). En annan möjlighet är att bestämma grundvattenbildningen genom modelleringsarbetet. Grundvattenbildningen är en funktion av nederbörden, evapotranspirationen, hydrauliska egenskaperna hos de geologiska enheterna samt topografien.

Drän: Ett randvillkor som kan ansättas för att efterlikna en dränering, t ex en ledningsgrav där grundvattnet vid en viss trycknivå avleds. I de celler där man ansatt ett dränvillkor kommer inte trycknivån att överskrida den valda/ansatta dräneringsnivån. Detta randvillkor kan med fördel användas för att simulera ytvattenavrinning genom att man ansätter en drän strax under markytan över utströmningsområden (eller hela modellen).

Konstant flöde: Vid denna typ av rand ansätts över tiden konstant flöde. Detta skulle kunna vara ett flöde i längdriktningen i en större grusås, på stort avstånd från uttagspunkter eller infiltration. Om flödet varierar över tiden, och detta är av betydelse, måste simuleringen utföras som transient och flödet ansätts att variera över tiden enligt angivna värden. Detta fall ger en rand med variabelt flöde.

Rand med inducerat flöde: I detta fall ansätts en referenstrycknivå som motsvarar trycket på ett visst avstånd från det verkliga läget för randen, samt en konduktans som anger hur genomsläpplig randen är (enligt specificerad definition). Inflödet vid randen beror på hur mycket trycknivån kommer att avsänkas vid randen jämfört med referenstrycknivån. Om det inte blir någon avsänkning blir det inget inflöde. Och ju större avsänkning desto större blir inflödet vid randen. På detta vis kan man sätta en rand närmare en brunn eller annan dränerande anordning än vad annars hade varit lämpligt.

Brunnar: Både uttags- och infiltrationsbrunnar är en typ av flödesvillkor där flödet kan varieras med tiden eller hållas konstant. (Om brunnar egentligen skall

räknas som randvillkor råder det delade meningar om, eftersom uttaget vid en 3-D modell sker ”inne” i modellen och inte vid en yttre rand).

4.4 Indata – flödesmodell

4.4.1 Allmänt

När man ansätter indata till en ny modell är det viktigt att ge bra indata så att modellen fungerar från början. Om man ansätter mycket indata, och mycket detaljerad indata för att modellen skall bli så lik verkligheten som möjligt kan man hamna i situationen att modellen inte fungerar när man väl skall ”köra” den. Med mycket indata blir ”felsökningen” mer omfattande och svårare, än om man börjat med en enklare modell som efter hand förfinas och detaljeras. ”Ju enklare ju bättre” gäller oftast. Man skall bara inkludera den information som är nödvändig i modellen.

4.4.2 Egenskapsområden

När det gäller att urskilja olika egenskapsområden identifierar man olika geologiska enheter som kan tänkas ha likartade hydrauliska egenskaper. Goda geologiska kunskaper och erfarenheter, samt en väl genomarbetad konceptuell modell är bra utgångspunkter. Därefter gäller att tilldela dessa områden riktiga egenskaper. Dessa fås bäst om man i fält kan testa de olika geologiska enheterna med hjälp av hydraultest. Vissa test ger mycket lokal information, som exempelvis slug-test eller vattenförlustmätning (med korta mätintervall) i kärnborrhål i berg. Andra test som storskalig propumpning kan ge information över och beträffande större områden om de utförs på lämpligt vis. Resultaten från hydraultest jämförs med annat material som kan ge information om hydrauliska egenskaper. Kornstorleksanalyser och lagermäktigheter är normalt mest intressanta här.

Om inga eller få hydraultest tidigare har utförts är det önskvärt att få ett antal nya sådana test utförda. I annat fall får man börja med att använda ”handboksdata”, grova bedömningar och översiktliga beräkningar av hydraulisk konduktivitet från kornstorleksdata.

4.4.3 Nederbörd, avdunstning och grundvattenbildning

Nederbörd, evaporation, transpiration (ibland evapotranspiration) och grundvattenavrinning/bildning är ytterligt betydelsefulla indata vid grundvattenmodellering, men relativt svåra att hantera. Figur 18 är en principskiss över vattenbalansen för ett tempererat barrskogsområde i Norden (efter Knutsson och Morfeldt, 2002). Vattenbalansen för ett område kan skrivas:

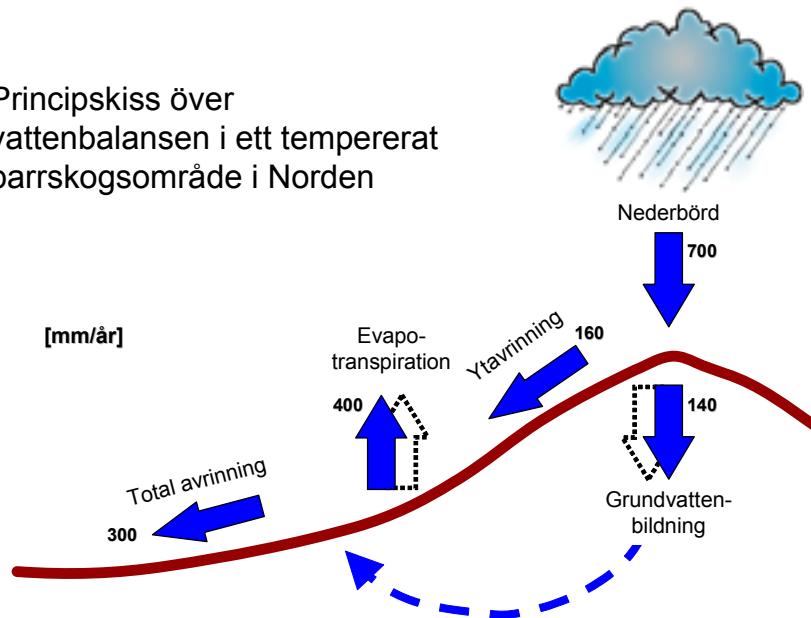
$$P = ET + R_S + R_G - \Delta M / \Delta t$$

där

P =	Nederbörd (Precipitation)
ET =	Evapotranspiration (avdunstning från markyta och vegetation)
R _S =	Ytavrinning

$R_G =$ Grundvattenavrinning/bildning
 $\Delta M/\Delta t =$ Magasinsförändring

Principskiss över
vattenbalansen i ett tempererat
barrskogsområde i Norden



Figur 18. Principskiss över vattenbalansen i ett tempererat barrskogsområde i Norden (efter Knutsson och Morfeldt, 2002). De streckade pilarna visar att det ibland finns en större potentiell grundvattenbildning respektive evapotranspiration.

Observera att i detta uttryck omfattar magasin såväl sjöar, vattendrag, omättad zon och grundvatten. Vid mer detaljerade studier av mindre områden söker man skilja mellan magasinförändringar i dessa olika magasin.

Beroende på vilket tidsperspektiv man är intresserad av (medelvärden över längre tidsperiod eller skeenden under kortare tid) blir hanteringen och behovet av indata olika. Om man betraktar medelvärden eller jämviktstillstånd över en längre period kan man vanligen bortse från magasinförändringar. SMHI har tagit fram ett antal kartor som anger medelvärden på nederbörd, avdunstning respektive medelvärden på avrinning.

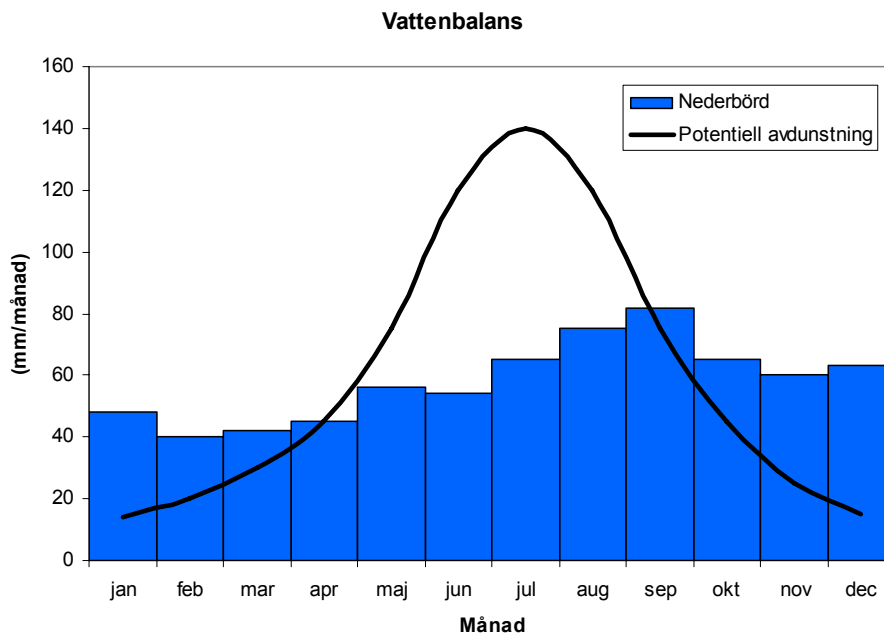
Möjlig grundvattenbildning på en given plats styrs dels av vilken maximal mängd vatten som finns tillgänglig vid aktuell tidpunkt, hur genomsläppligt jorden eller berget är samt aktuella gradienter. Vid vertikalt flöde är gravitationsgradienten $I = 1$ (om ingen dämning av vatten sker vid markytan), medan den gradient som styr grundvattenflödet (och vidare borttransport av infiltrerat vatten) kan vara mycket liten, d v s mycket mindre än 1.

Detta kan illustreras med följande exempel. Grundvattenflödet i berg sidledes från ett flackt bergsområde blir mycket begränsat på grund av liten gradient. Infiltrationen till berg blir i detta fall begränsad av den långsamma borttransporten. Detta kan även beskrivas som att infiltration förhindras eftersom grundvattnet står vid bergsöverytan. Skulle det sedan byggas en tunnel (som inte tätas) genom

samma bergmassa kommer borttransport av grundvatten att ske även genom inläckage till tunneln. Detta senare flöde kan ha betydligt större flödesgradient eftersom det är riktat i huvudsak vertikalt. Genom att tunneln byggs kan vi således förvänta oss att ytavrinningen från området minskar, och infiltration till berget ökar. Detta visar på risken med att bestämma grundvattenbildningen till ett (för lågt) konstant värde för ett stationärt tillstånd, och sedan använda samma konstanta grundvattenbildning för en helt annan situation där gradienterna i grundvattenmagasinet blir helt annorlunda.

Om man önskar modellera transienta förhållanden under en period måste indata ha lämplig tidsupplösning. Mätta nederbördsdata och beräknade avdunstningsdata kan beställas från SMHI.

Vid grundvattenmodellering är den sk nettonederbörden av särskilt intresse, dvs den nederbörd som inte avdunstar. Nettonederbörden är detsamma som den totala avrinningen (P-ET). Nettonederbörden fördelar sig olika över året och över landet beroende på temperatur och nederbörd vilket illustreras nedan.



Figur 19. Exempel på vattenbalans (efter Knutsson och Morfeldt, 2002).

4.4.4 Hydraulisk konduktivitet

Vid simulering av stationärt grundvattenflöde räcker det att ange hur vattengenomsläppliga de olika geologiska enheterna är. Detta beskrivs m h a den så kallade hydrauliska konduktiviteten (K).

När vi studerar och diskuterar vattenflöde i porösa media som exempelvis jord (eller sprickor i berg) är det viktigt att klart skilja på olika hastighetsbegrepp när det gäller vattnets flöde. Vid grundvattenströmning kan tre olika hastighetsbegrepp urskiljas (enligt Carlsson och Gustafson 1991):

- Grundvattnets bruttonastighet (v) eller Darcy-hastighet definierad som grundvattenflödet per tvärsnittsarea bestående av såväl porer (sprickor) som fast material. Betecknas ibland med q i annan litteratur (t.ex. Domenico och Schwartz, 1997).
- Grundvattnets nettostastighet (v_n) eller transporthastighet som utgör den hastighet med vilken en vattenpartikel transporteras mellan två punkter i en akvifär.
- Grundvattnets punkthastighet (v_p) som är grundvattnets verkliga hastighet i en punkt.

Grundvattnets bruttonastighet eller Darcy-hastighet (v) kan uttryckas genom Darcy's lag (endimensionellt fall):

$$v = \frac{Q}{A} = -K \frac{\partial h}{\partial l} \quad (\text{m s}^{-1})$$

där v = grundvattnets bruttonastigheten i flödesriktningen (m s^{-1})
 Q = vattenflöde ($\text{m}^3 \text{s}^{-1}$)
 A = tvärsnittsarea vinkelrätt flödesriktningen (m^2)
 K = hydraulisk konduktivitet (m s^{-1})
 $\partial h / \partial l$ = hydraulisk tryckpotentialskillnad (dimensionslös)

Grundvattnets nettostastighet (v_n) och det advektiva flödet kan uttryckas:

$$v_n = -\frac{K}{n_e} \frac{\partial h}{\partial l} \quad (\text{m s}^{-1})$$

där v_n = grundvattnets nettostastighet i flödesriktningen (m s^{-1})
 n_e = effektiv porositet (dimensionslös)

Vi måste i modellen ansätta antingen hydraulisk konduktivitet för olika lager eller alternativt transmissivitet (T) för hela akvifären. Sambandet mellan dessa parametrar är:

$$T = K \times b$$

där

T = transmissivitet ($m^2 s^{-1}$)

K = hydraulisk konduktivitet ($m s^{-1}$)

b = vattenförande mäktighet (m)

Eftersom man vanligen inte har en homogen lagerföljd så beräknas horisontell transmissivitet (i horisontell riktning) som summan av transmissiviteten i n lager:

$$T = \sum K_i \times b_i$$

där

i = nummer på respektive lager (går från 1 till n)

n = antalet lager

Om simuleringarna avser transienta förhållande (dvs icke-stationära förhållanden) måste även bra värden ges för magasinskoefficienten.

4.4.5 Magasinsegenskaper

Vid transient simulering med fluktuerande trycknivåer och grundvattenflöden krävs kännedom om akvifärernas magasinsegenskaper. Med detta menas hur stor volym vatten som kan dräneras från en enhetsvolym vid en trycknivåsänkning om 1 m. Detta kallas vattenavgivningstal (specific yield, S_y , enhetslöst). Vid en fri grundvattenyta (öppen akvifär) är den dränerbara volymen vatten ungefär densamma som den effektiva porositeten, m a o om vi sänker grundvattenytan med 1 m i en sandakvifär med en effektiv porositet om 30 % kommer vi minska magasinet med $0.3 m^3/m^2$ grundvatten. En sänkning av en fri grundvattenyta innebär även att transmissiviteten, T , hos denna akvifär kommer att minska. Varierande grundvattennivåer ger varierande transmissivitet.

Vattenavgivningstalet för våra vanliga jordarter finns tabellerat i t ex Knutsson och Morfeldt (2002).

För en sluten akvifär innebär en trycksänkning att kornskelettet komprimeras och att vattnet expanderar något. Detta medför att den mängd vatten som kan avges från en enhetsvolym ur en sluten akvifär kommer vara betydligt mindre än för en öppen. Mängden vatten som kan avges ur en sluten akvifär per enhetsvolym kallas magasinskoefficienten (S_s, m^{-1}) (Knutsson och Morfeldt, 2002). Magasinskoefficienten kan variera mycket och ligger i storleksordningen $10^{-3} - 10^{-6} m^{-1}$. Magasinsegenskaperna bestäms bäst genom provpumpning eftersom man då kan bestämma och kontrollera uttagsflöden mot trycknivåer i uttagsbrunnen och observationsbrunnar mot tiden (se exempel Figur 21).

4.4.6 Densitetspåverkat flöde

Beroende på vilken typ av förorening det är fråga om kan förorenat vattnet vara både lättare och tyngre än det (inte förorenade) vattnet som ursprungligen finns i akvifären. Vatten med högt innehåll av salter kan ha en densitet som är hög, medan vatten förorenat av lätta kolväten kan ha en låg densitet.

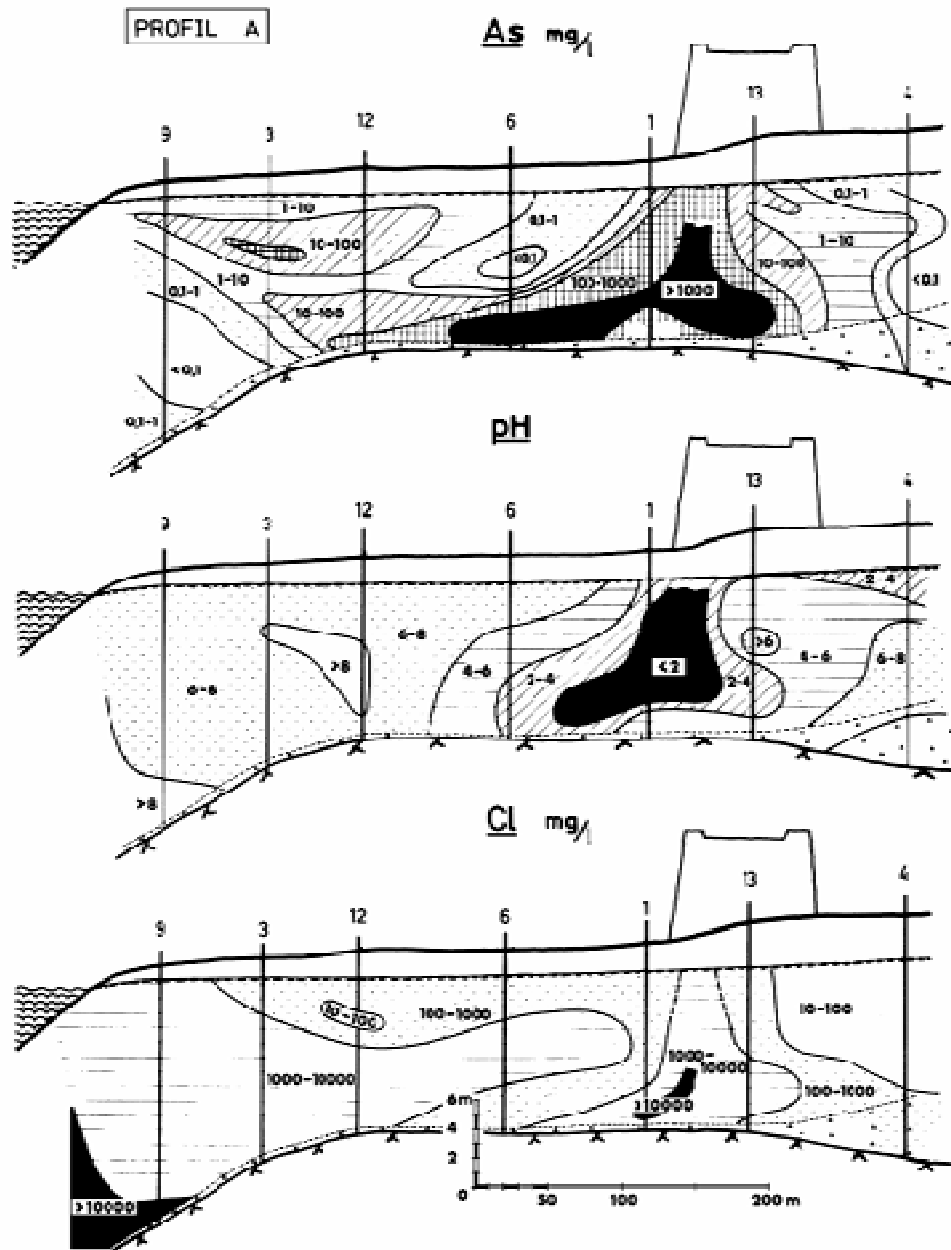
När det vatten som tillförs (d v s infiltrerar) till en akvifär har en densitet som avviker från den densitet som vattnet i akvifären har kommer det tillförda vattnet att beroende på sin densitet antingen ”flyta ovanpå” eller ”sjunka ner” jämfört med den flödesväg vattnet skulle ha tagit om det hade samma densitet som vattnet i akvifären.

I närheten av en kustlinje, eller där det av geologiska skäl finns relict saltvatten, återfinns det tyngre saltvattnet under det söta grundvattnet. Saltvattnets densitet är (förutsatt att sammansättningen motsvarar havsvattens sammansättning):

$$\rho = 1000 + 0,741 S \quad (\text{kg/m}^3)$$

där S = salinitet i promille (‰).

Ett exempel på densitetsstyrt flöde när lakvattnet har högre densitet än det i akvifären förekommande rena sötvattnet ges i Figur 20.



Figur 20. Förorening från lakvatten från en avfallsdeponi. Från Gedda och Ejdeling (1987).

I figuren syns tydligt hur lakvattnets högre densitet gör att As-föroreningen först sjunker och därefter transporteras i grundvattenströmningens riktning, för att sedan "tvingas upp" till ytligare nivåer när grundvattnet möter saltvatten. Saltvattnet är här tyngre än både sötvatten och lakvatten och bildar en kil in från kustlinjen.

4.4.7 Existerande fältdata

Fältdata (förutsatt rätt utvärderade) är alltid bättre än data framtagna med indirekta metoder eller "handboksdata". Handboksdata kan dock vara bra att ha som jämförelse med erhållna fältdata för att kontrollera rimligheten i de resultat/indata som

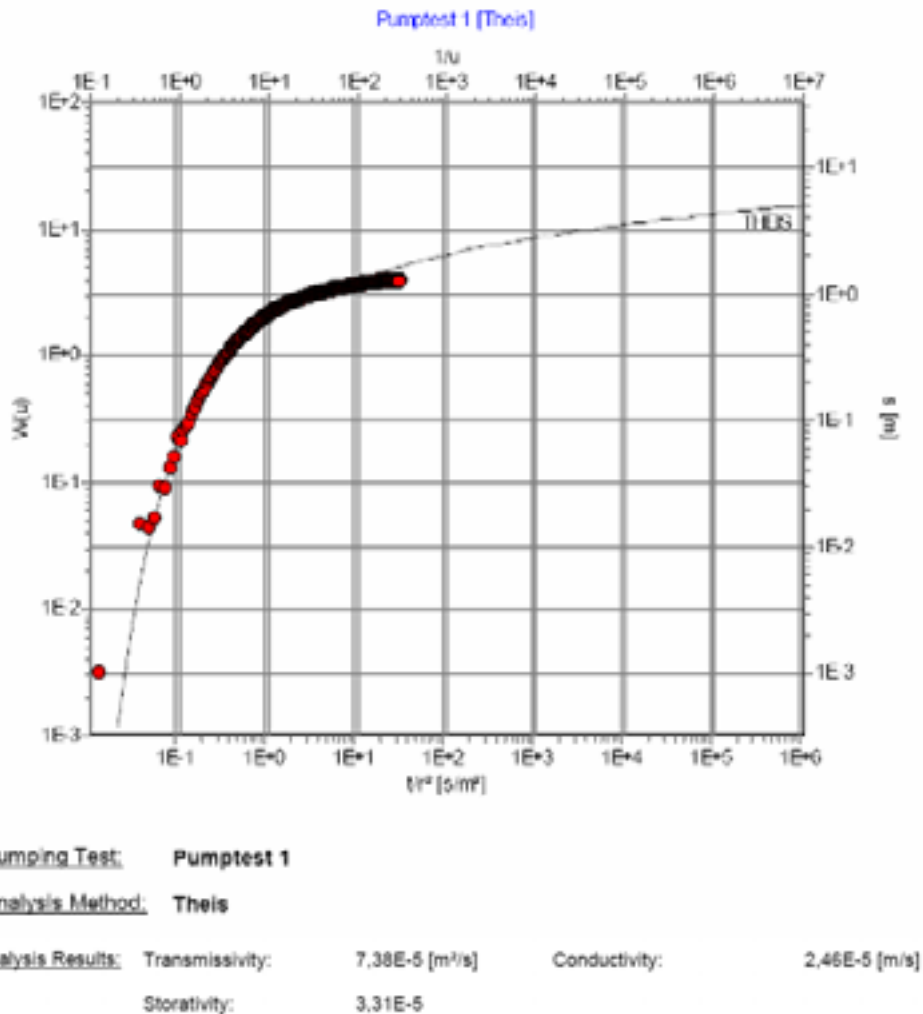
används i modelleringsarbetet. Existerande fältdata är viktiga att kunna utnyttja. Detta innebär att det vanligen är väl värt mödan att utföra ”arkivgrävning” för att få reda på vilka redan existerande fältdata som kan finnas.

4.4.8 Fältundersökningar

Nya fältundersökningar är oftast nödvändiga. Dessa kan omfatta geofysiska undersökningar (seismik, geoelektrik, georadar m m), borring av nya observations- och provtagningsbrunnar, mätning av grundvattennivåer i befintliga och nya observationspunkter (ofta med högre tidsupplösning än tidigare) samt olika så kallade ”hydraultester”. Exempel på sådana är ”slug-test” och provpumpningar för att få så bra data som möjligt beträffande hydrauliska grundvattenmagasinets (eller magasinens) hydrauliska egenskaper. För att särskilja vilka sektioner av en brunn och den geologiska formation i vilken denna är utförd, kan man använda sig av så kallade ”flowlog”. Man bör dock vara uppmärksam på följande i samband med undersökning av förekomst av förorening och föroreningstransport i grundvatten:

- Vid provpumpning kan man riskera att pumpa vatten som är förorenat. Detta kan störa den befintliga föroreningsbilden, samt kan även innebära att man måste rena uppumpat vatten innan detta kan återföras till grundvattenmagasinet eller släppas till recipient.
- I samband med att pumpbrunn eller observationsbrunnar utförs finns risk att man penetrerar tätande lager. Man kan således skapa nya transportvägar för föroreningarna.

Riskerna ovan måste vägas mot den bättre information om grundvattenmagasinet som erhålls genom ett storskaligt hydraultest, d v s provpumpning. Beskrivning av utförande och utvärdering av provpumpningar beskrivs i mer detalj exempelvis i Carlsson och Gustafson (1991), Driscoll (1987), Fetter (1994), Freeze och Cherry (1979), Kruseman och De Ridder (1990), Langguth och Voigt (1980), Osborne (1993) och Todd (1980). Exempel på en utvärdering av en icke-stationär provpumpning visas i Figur 21.

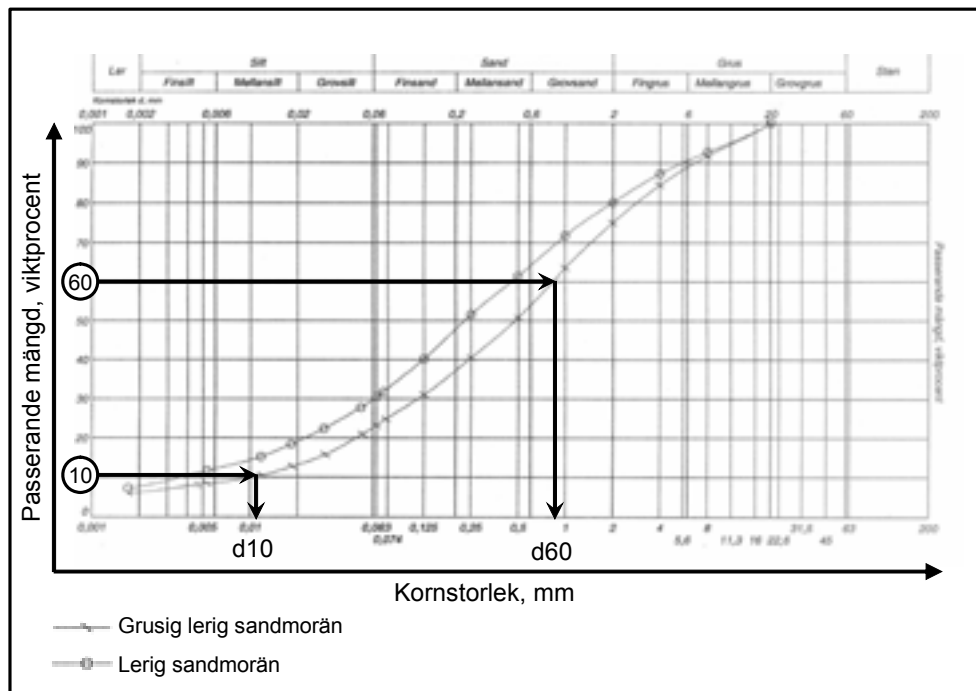


Figur 21. Exempel på en utvärdering (m h a Theis typkurvemethod) av en icke-stationär prov-pumpning.

4.4.9 Prediktion av hydrauliska parametrar

Hydraulisk konduktivitet: Kornstorleksfördelningen hos ett naturligt sediment ger goda möjligheter att karakterisera detsamma. Flera olika metoder har tagits fram att korrelera olika hydrauliska egenskaper till några kornstorlekskurvan i sin helhet, eller till karakteristiska korndiametrar eller sorteringsmått. Några av de vanligaste av dessa är:

- | | |
|--|-----------------------|
| Hydrauliskt karakteristisk korndiameter: | - vanligen d_{10} |
| Mediankorndiameter | - d_{50} |
| Sorteringsgrad (uniformity) | - $U = d_{60}/d_{10}$ |



Figur 22. Utvärdering av d_{10} och d_{60} från en kornstorleksfördelningskurva.

Ett antal författare har angivit samband mellan en karakteristisk korndiameter (vanligen d_{10}) och hydraulisk konduktivitet enligt:

$$K = C \times d_{10}^2 \text{ (där } C \text{ är en konstant som bestäms från experimentella data, se nedan)}$$

Den troligen mest välkända och sannolikt mest använda formen av denna ekvation brukar benämnas "Hazen's formel" efter Hazen (1892). I denna version anges ekvationen gälla för väl sorterade sandiga material ($U = d_{60}/d_{10} < 5$):

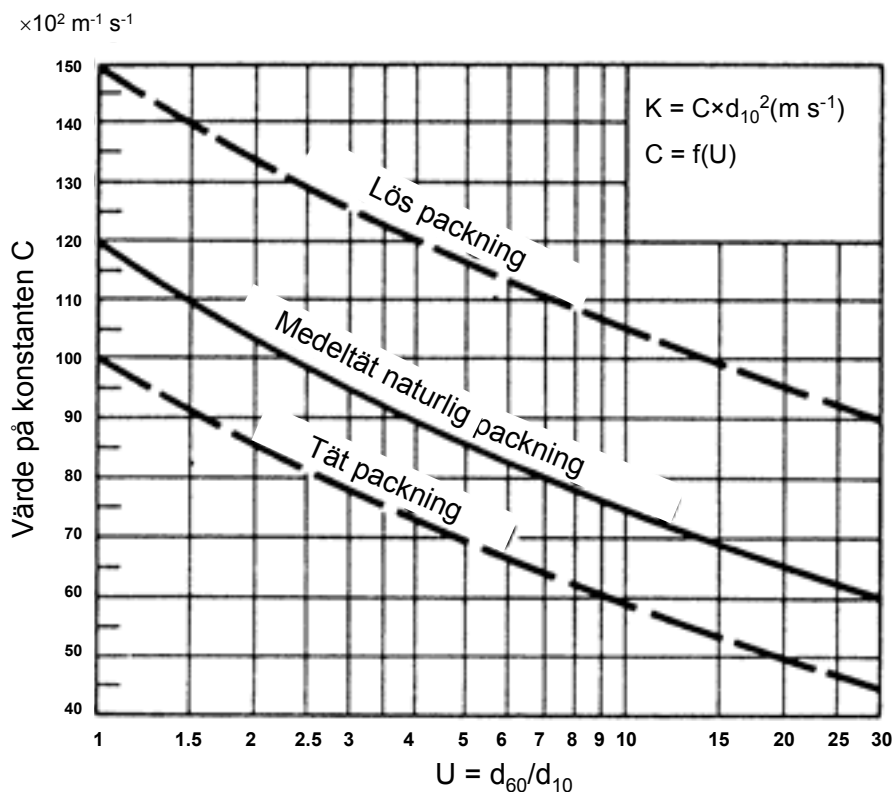
$$K = 116 \times 10^2 \times d_{10}^2 \quad (K \text{ i m/s, } d \text{ i m)}$$

Ekvationen förekommer även ofta med andra enheter än SI-enheter:

$$K = 0,0116 \times d_{10}^2 \quad (K \text{ i m s}^{-1}, d \text{ i mm}) \quad \text{Blandade enheter}$$

$$K = 1000 \times d_{10}^2 \quad (K \text{ i m d}^{-1}, d \text{ i mm}) \quad \text{Blandade enheter}$$

I Langguth och Voigt (1980) redovisas ett diagram framtaget av Beyer och Schweiger (1969) i vilket värdet på konstanten C varierar både med materialets sorteringsgrad och med dess lagringstäthet. Detta innebär att ekvationen kan tillämpas på något mer osorterade sandiga och grusiga sediment. Sambanden visas i figuren nedan.



Figur 23. Värde på konstanten C i ekvation för beräkning av hydraulisk konduktivitet som funktion av sorteringsgraden ($U = d_{60}/d_{10}$) för sand och grus. I figuren visas sambandet för lös packning, medeltät naturlig packning och tät packning. Efter Langguth och Voigt (1980) baserat på Beyer och Schweiger (1969).

Det finns andra likartade ekvationer, exempelvis av Fair och Hatch (1933) som är framtagna för att beräkna hydraulisk konduktivitet för mindre väl sorterade jordar.

Porositet och effektiv porositet: Effektiv porositet är något omständligt att bestämma experimentellt. Denna parameter kan bestämmas genom laboratorieanalys, varvid ett jordprov dräneras. Parametern kan även bestämmas på olika sätt i fält, dels genom att volumetrisk vattenhalt in situ bestäms med radiometrisk metod i samband med att grundvattensänkning sker (naturlig eller orsakad genom provpumpning). Och slutligen kan den effektiva porositeten (för större volymer) bestämmas genom utvärdering av provpumpningsdata.

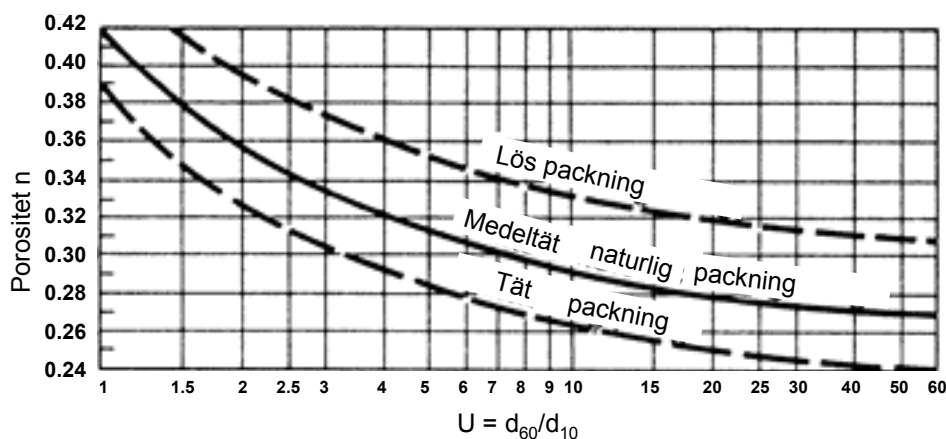
Eftersom alla dessa metoder har sina svårigheter och är relativt tidsödande är det ofta intressant att utnyttja litteratordata (empiriska data – erfarenhetsdata) eller korrelativa metoder. Naturligtvis är detta betydligt mer osäkert än experimentella metoder, men kan ge snabba och grova värden för överslagsberäkningar. I tabellen nedan ges intervall för effektiv porositet för olika geologiska material.

Tabell 4. Effektiv (eller kinematisk) porositet n_e i några olika akvifärdtyper. Från Carlsson och Gustafson (1991)

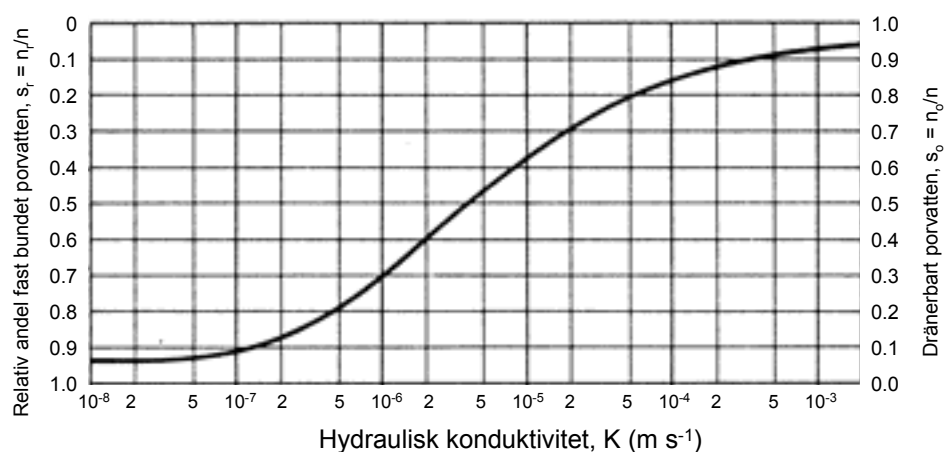
Akvifär	Effektiv porositet n_e
Grus - Sand	0.05 – 0.2
Morän	0.01 – 0.1
Homogent kristallint berg	0.0001 – 0.001
Sprickzon i kristallint berg	0.001 – 0.01
Sedimentär berggrund	0.005 – 0.05

En annan väg att uppskatta effektiv porositet för sandiga jordar är att använda följande relation (Naturvårdsverket, 1985):

$$n_e = 0,452 + 0,045 \times \ln K \text{ (där } K \text{ anges i } m \text{ s}^{-1}\text{)}$$

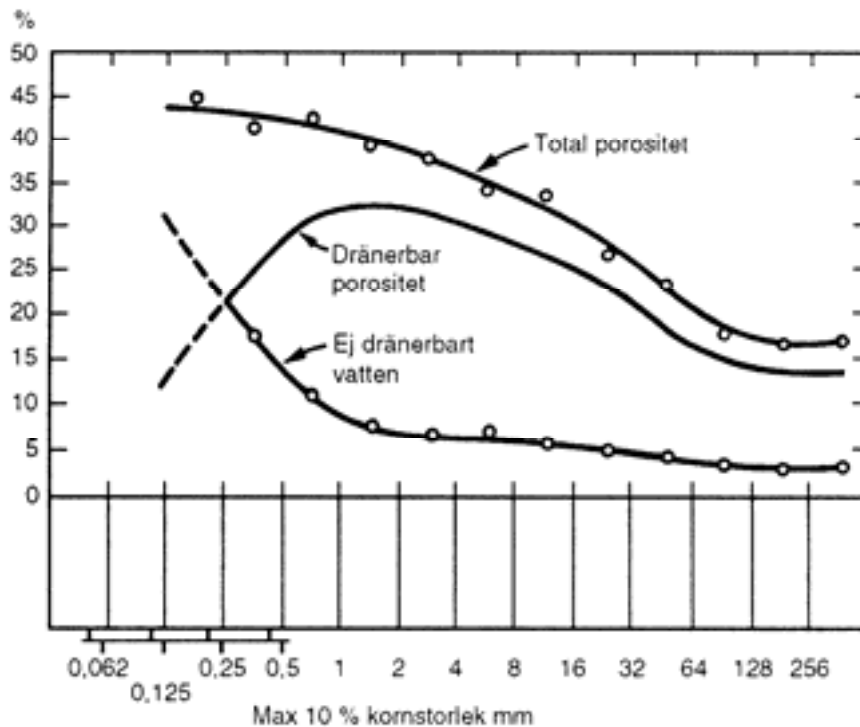


Figur 24. Porositet (n) som funktion av sorteringsgraden ($u = d_{60}/d_{10}$) för sand och grus. I figuren visas sambandet för lös packning ("lockere Lagerung"), medeltät naturlig packning ("mittlere natürliche Lagerung") och tät packning ("dichte Lagerung"). Efter Langguth och Voigt (1980) baserat på Beyer och Schweiger (1969).



Figur 25. Relativ andel av fast bundet porvatten ($s_r = n_0/n$) respektive dränerbart porvatten ($s_o = n_0/n$), som funktion av hydraulisk konduktivitet hos sand och grus. I figuren visas sambandet för lös packning ("lockere Lagerung"), medeltät naturlig packning ("mittlere natürliche Lagerung") och tät packning ("dichte Lagerung"). Efter Langguth och Voigt (1980) baserat på Beyer och Schweiger (1969).

En uppskattning av effektiv porositet skulle då bli: $n_e = n \times s_o$



Figur 26. Total porositet, dränerbar porositet och ej dränerbart vatten som funktion av kornstorlek. Från Knutsson och Morfeldt (2002) som refererar att figuren är efter Todd (1959). Langguth och Voigt (1980) anger att ursprunget baserar sig på Eckis (1934). Max 10% kornstorlek innebär att 10% av materialet är större än angiven kornstorlek, dvs 10% är kvarvarande material vid denna siktstorlek. Detta motsvarar 90% passerande material vid diametern, eller d_{90} .

Figur 26 ovan är väl spridd och välkänd, men idag är förutsättningarna för hur den tagits fram inte väl kända. Hur pass välsorterade eller osorterade de sediment eller jordarter som data i figuren tagits från framgår inte av senare referenser. Denna figur är i huvudsak pedagogisk. Detta eftersom den visar att vid mindre kornstorlek har sedimenten större specifik yta, och därigenom ökar andelen hårt bundet vatten, samtidigt som det finns betydligt färre grova porer som är lätt dränerbara. I senare upplaga (Todd, 1980) finns inte längre Figur 26 med.

Observera att handboksdata tagna från tabeller bör enbart användas för översiktliga beräkningar som avser att visa storleksordningar, samt som första approximation till dess att fältdata har kunnat skaffas. Beträffande beräkning av överlagsvärden på hydrauliska egenskaper från kornstorleksinformation, måste man vara uppmärksam på vilka begränsningar som gäller för respektive ekvation, så att dessa ekvationer inte tillämpas felaktigt.

5 Modelluppbyggnad - mass-transport av föroreningar

Föroreningar kan transporteras i grundvattensystemet som lösta joner, komplex, partikulärt bundna eller i egen fas. Den drivande kraften för transporten är tryckpotentialskillnader eller förekommande koncentrationsgradienter i grundvattensystemet. Spridning av föroreningen påverkas till stor grad av dess egna egenskaper samt den omgivande geologin med dess fysikaliska och kemiska förhållanden.

Simulering av masstransport, med hänsynstagande till omblandning, spridning, sorption och kemiska reaktioner, i grundvattensystemet medför att en rad ytterligare parametrar (biologisk nedbrytning, adsorption, etc.) måste bestämmas och kalibreras vilket medför att modellens komplexitet ökar.

Transport och spridning av ett ämne i ett grundvattensystem sker genom **advektion** (konvektion), **dispersion** och **diffusion**. Om föroreningen (eller vattenlösning av den) är lättare eller tyngre än det icke förorenade vattnet kan vi få en **densitetspåverkad strömning**. Strömningen kan ske som 1-fasströmning (vattenlöslig förorening) eller 2-fasströmning (ej eller mindre vattenlöslig förorening). Till det kommer ett antal kemiska reaktioner såsom adsorption, nedbrytning och utfällning. Dessa processer medför någon form av fördröjning, utarmning och/eller omblandning eller utspädning av den lösta föreningen.

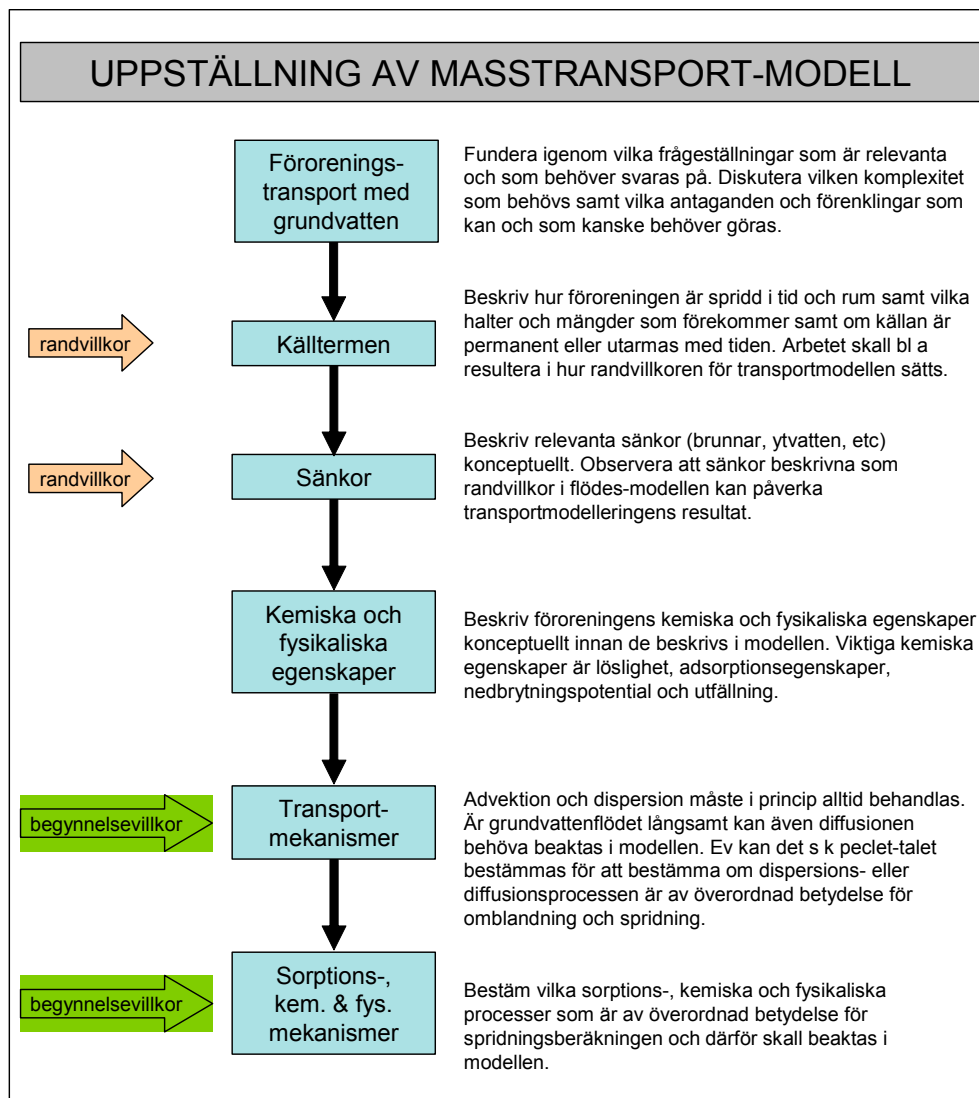
Samtliga ovan nämnda processer är olika viktiga vid olika förhållanden. Exempelvis är diffusionsprocesser inte viktiga vid ett mycket snabbt flöde, nedbrytning inte aktuellt för metaller osv (Tabell 1). Inför uppsättning av masstransportmodellen är det viktigt att en konceptuell förståelse av systemet finns för de processer som kan förväntas påverka masstransporten. Huruvida de senare verkligen skall beaktas i simuleringen beror på hur nära sanningen man behöver komma. Eftersom flera av processerna innebär en fördröjning eller en utspädning av en löst förening kan en konservativ betraktelse av systemet vara fördelaktigt om syftet med modelleringen ändå kan nås. Då kan man minska komplexiteten samtidigt men på bekostnad av stringensen. Alternativt kan en känslighetsanalys göras för att visa att vissa processer inte påverkar resultatet i relevant omfattning. Dessa processer (som inte påverkar transporten och spridningen) kan då eventuellt utslutas ur modelleringsarbetet.

5.1 Arbetsordning

Vid uppställning av masstransportmodellen behövs nya indata beträffande rand- och begynnelsevillkor för parameterisering av de geologiska formationerna och fysikaliska och kemiska egenskaper samt de aktuella föroreningarna.

Figur 27 beskriver arbetsordningen med uppsättningen av masstransportmodellen. I de följande kapitlen beskrivs sedan hur de vanligaste transport-, spridnings- och kemiska processer som alla påverkar masstransporten i en akvifär kan

beskrivas i en modell. Vidare finns exempel på parametervärden för respektive process, förklarande bilder samt referenser till andra mer omfattande källor.



Figur 27. Protokoll för arbeten med uppsättning av masstransportmodell.

5.2 Modellavgränsning

Det kan vara bra att börja med en större flödesmodell och sedan göra en mindre masstransportmodell. Detta innebär att man får en rimligt god bild av hur flödes-situationen ser ut i grundvattenmagasinen i området innan mer i detalj studerar föroreningstransporten. Tabell 5 beskriver behov av indata beroende på modellens komplexitet.

Tabell 5. Modellens komplexitet och krav på indata

Komplexitet	Krav på indata
Dispersion	Dispersionskoefficient
Diffusion	Diffusionskoefficient
Sorption	Fördelningskoefficienter Skrymdensitet Porositet
Nedbrytning	Nedbrytningskonstanter ¹
Kemisk reaktion	Halveringstider ¹ Andra beskrivningar av reaktionsförlopp

¹ Uttrycks ofta på samma vis i programvaran/koden

5.3 Indata - masstransport

5.3.1 Egenskapsområden

Att urskilja olika egenskapsområden och ansätta rimliga värden på indata för modellering av advektion, diffusion, dispersion, adsorption och nedbrytning är svårt. Det krävs en genomtänkt strategi för att vårt modelleringsarbete inte skall bli onödigt tids- och resurskrävande, komplicerat eller svårtolkat. Vi bör tidigt i arbetet fundera igenom och eventuellt testa om några av processerna är av underordnad betydelse för vår simulering och därför kan förenklas och/eller uteslutas. Till exempel kanske nedbrytningen ”går så långsamt” att den processen inte kommer påverka/minska den förväntade koncentrationen i en nedströms liggande brunn eller så kanske spridningen genom diffusion kommer vara av underordnad betydelse pga en hög strömningshastighet. För att modellera ett ämnes spridning behöver vi först beskriva dess egenskaper och sedan det medium som ämnet transporteras i.

När det gäller att urskilja olika egenskapsområden identifierar man olika geologiska enheter som kan tänkas ha likartade egenskaper med avseende på transportprocesserna. Goda geologiska, kemiska och biokemiska kunskaper och erfarenheter, samt en väl genomarbetad konceptuell modell är bra utgångspunkter. Därefter gäller att tilldela dessa områden riktiga egenskaper. Dessa fås bäst om man i fält kan testa de olika geologiska enheterna i kombination med laboratorieförsök. Vissa test ger mycket lokal information medan andra test, såsom spårämnesförsök, ger en mer lokal/regional bild av spridningsförhållandena. Handboksdata och grova bedömningar kan användas för scenario-analys och worst-case scenarion.

De indata som behövs beror således på hur komplex modellen (Kapitel 3.4) skall vara samt vilket arbetssätt (Kapitel 3.1.1) som tillämpas. Den typ av information som direkt eller indirekt genererar indata till modellering av transportprocesser varierar beroende av vilken process som avses. Nedan listas några av de viktigare storheterna som kan behöva bestämmas för modellering av respektive transportprocess.

Advektion

- Grundvattenflöde
- Hydraulisk konduktivitet
- Effektiv porositet

Dispersion

- Skalan för studien/spridningen
- Heterogeniteter hos det porösa transportmediet
- Kornstorleksfördelning
- Grundvattnets hastighet

Diffusion

- Koncentrationsskillnader
- Ämnets kemiska egenskaper
- Grundvattnets hastighet

Adsorption och jonbyte

- Ämnets kemiska egenskaper
 - molekylens laddning, sammansättning och storlek (specie)
 - förmåga till komplexbildning
- Jorden och/eller bergets egenskaper
 - specifika yta
 - laddningsförhållanden (kan variera vid t ex olika pH)
 - organsikt innehåll i jorden (god adsorbent för organiska ämnen)
- Grundvattnets kemi
 - jonstyrka och sammansättning
 - konkurrens om absorptionsplatser
 - komplexbildning
 - pH
 - redoxförhållanden

Nedbrytning

- Redoxförhållanden
- Grundvattnets sammansättning
- Syreförhållanden
- Tillgång på elektronacceptorer
- Temperatur
- Förekomst och tillväxt av mikroorganismer

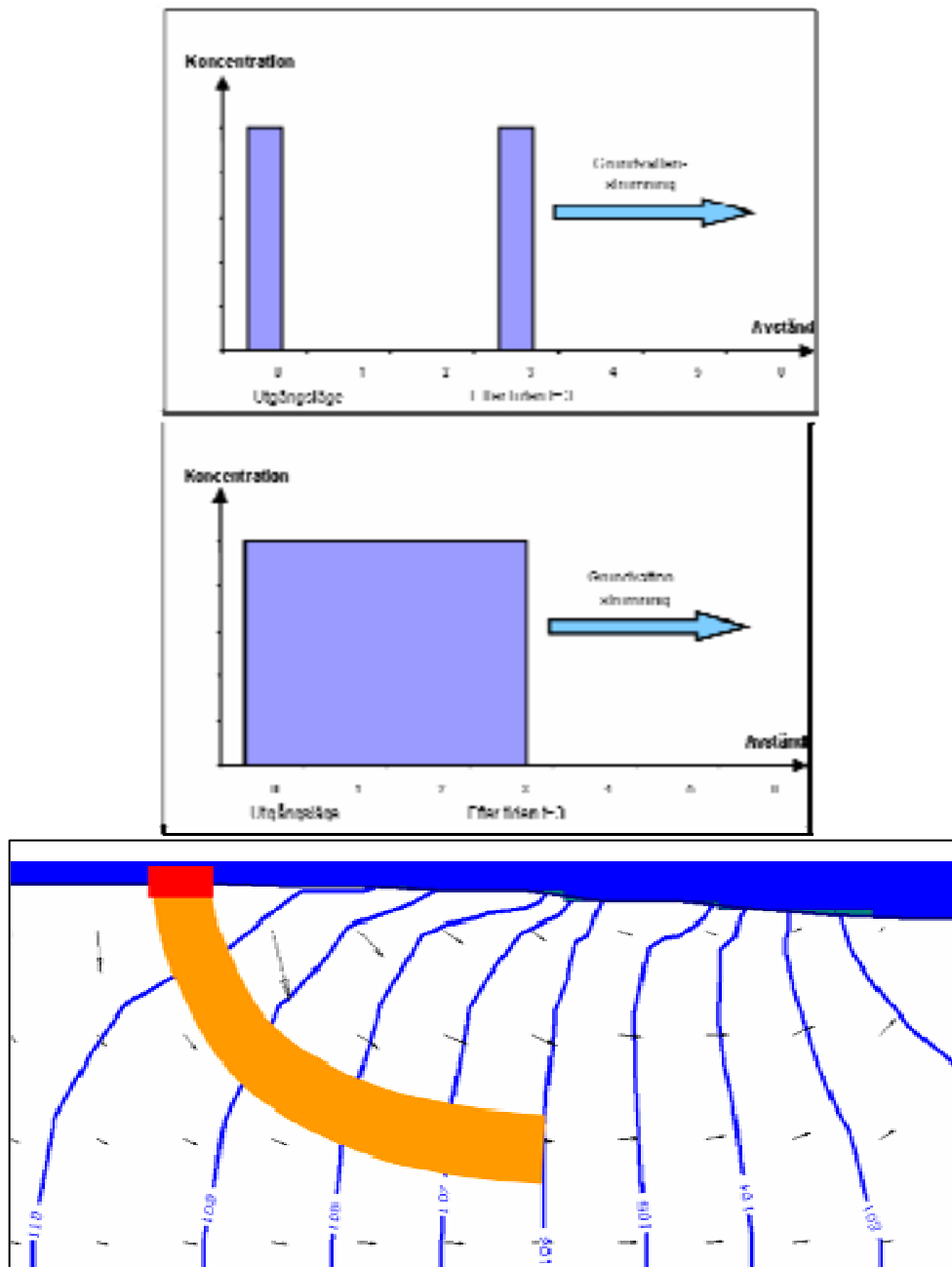
5.3.2 Advektion

Advektion innebär att ett ämne transporteras löst med vattenflödets medelhastighet som en bulktransport helt utan spridning eller fastläggning (Sracek och Zeman, 2004). Den drivande kraften är tryckpotentialskillnaderna i akvifären och hastigheten med vilken ämnet transporteras är proportionell mot den hydrauliska gradienten (Domenico och Schwartz, 1997). Masstransport med advektion innebär

att man utgår från att flödet har en jämn hastighet (Figur 28). Detta är som vi kommer att se nedan en kraftig förenkling av verkligheten då fler processer inverkar på transporten. Det finns flera sätt att uttrycka den advektiva transporten med Darcy's lag, en enkel beskrivning är (Sracek och Zeman, 2004):

$$J_A = v_n n_e C = vC \quad (\text{kg m}^{-2} \text{ s}^{-1})$$

där J_A = masstransport ($\text{kg m}^{-2} \text{ s}^{-1}$)
 v_n = nettohastighet i flödesriktningen (m s^{-1})
 v = bruttohastighet
 n_e = effektiv porositet (dimensionslös)
 C = koncentration (kg l^{-1})



Figur 28. Här visas transport av en förorening med enbart advektion efter a) ett punktsläpp och b) med en kontinuerlig källterm och c) i sektion för fallet med kontinuerlig källterm.

5.3.3 Diffusion

Molekylär diffusion är en spontan process som sprider ett löst ämne som ett resultat av värmerörelser hos molekylerna vilket medför spridning. I en koncentrationsgradient kommer lösta ämnen att transporteras från ett område med högre koncentration till ett lägre. Masstransporten är således proportionell mot koncentrationsgradienten. Den här processen kan alltså pågå även i stagnant vatten ($v = 0$)

eller till och med i motsatt riktning av flödet. Denna process beskrivs enligt Ficks första lag genom:

$$J_D = -D_e \frac{\partial C}{\partial x} \text{ (kg m}^{-2} \text{ s}^{-1}\text{)}$$

där J_D = masstransport (kg m⁻² s⁻¹)
 D_e = effektiv diffusionskoefficient (m² s⁻¹)
 C = koncentration (kg m⁻³)
 x = avstånd (m)

Diffusionskoefficienter för ämnen i fria vattenvolymer minskar med ökad molekylvikt och är relativt lätta att återfinna i litteraturen (Tabell 6). I en akvifär måste dock jonerna följa en längre transportväg runt mineralkornen och i porerna och därför är den molekylära diffusionen i ett grundvattensystem inte lika snabb som i ett öppet vattenkärl. Därför används den effektiva diffusionskoefficienten (D_e) som således är mindre än diffusionskoefficienten (D_w) för fritt vatten och de förhåller sig till varandra enligt (Sracek och Zeman, 2004):

$$D_e = D_w \theta \frac{1}{\tau_l}$$

där θ = volumetrisk vattenhalt
 τ_l = tortuositet

Tortuositet är relationen mellan den slingrande flödessträckan (l_e) och raka vägen mellan de två punkterna (l) där (Bengtsson, 1996):

$$\tau_l = \frac{l_e}{l}$$

Ett väl sorterat material har ett lägre värde på tortuositet än ett osorterat.

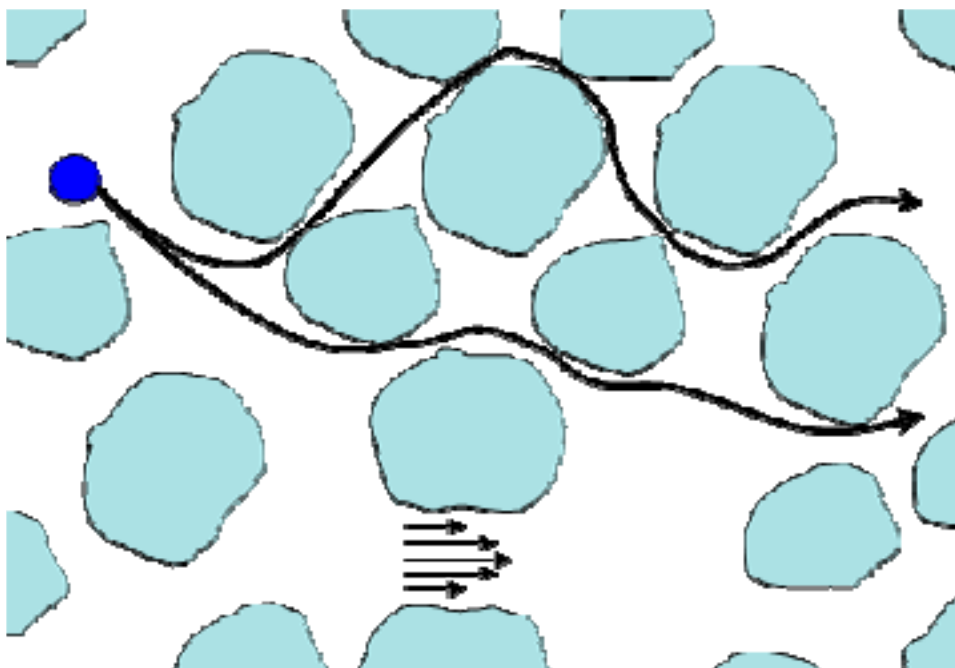
Tabell 6. Diffusionskoefficient, D_w , för fritt vatten (Domenico och Schwartz, 1997)

Katjon	D_w ($10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$)	Anjon	D_w ($10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$)
H ⁺	93,1	OH ⁻	52,7
Na ⁺	13,3	F ⁻	14,6
K ⁺	19,6	Cl ⁻	20,3
Cs ⁺	20,7	Br ⁻	20,1
Mg ²⁺	7,05	HS ⁻	17,3
Ca ²⁺	7,93	HCO ₃ ⁻	11,8
Sr ²⁺	7,94	CO ₃ ²⁻	9,55
Ba ²⁺	8,48	SO ₄ ²⁻	10,7
Mn ²⁺	6,88		
Fe ²⁺	7,19		
Cr ³⁺	5,94		

5.3.4 Dispersion

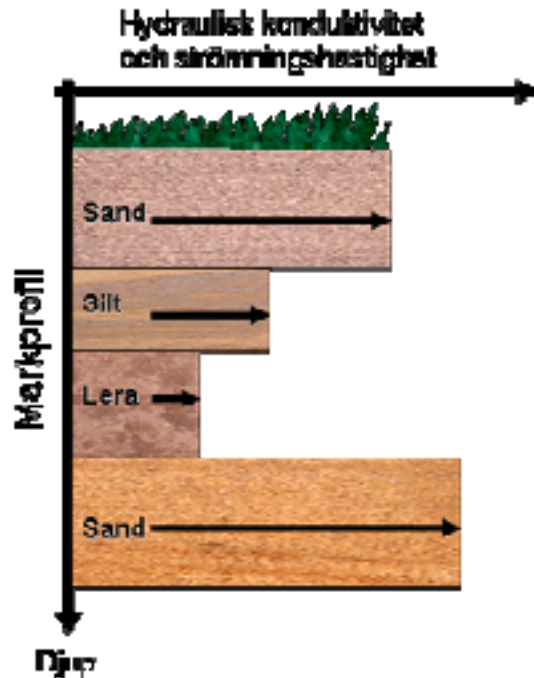
Med dispersion förstås i en utspridning av föroreningen utöver transport genom advektion och diffusion. Dispersion kan delas upp i två komponenter, dels mekanisk dispersion och dels molekylär diffusion.

Den mekaniska dispersionen beror på varierande flödes hastighet i ett poröst media. Flödes hastigheten varierar i både porskala och större skala. I porskalan är olika porer (i ett material som i sig är homogent) olika stora och olika långa och detta medför att vi från ett flödes tvärsnitt till ett annat får en fördelning av olika transporttider. Vissa vattenmolekyler har en kort transporttid, och andra har en lång transporttid.



Figur 29. Beroende på flödesväg får olika vattenmolekyler olika transporttid mellan två olika punkter, eller snarast mellan två olika flödes tvärsnitt (efter Bengtsson, 1996).

I en mer makroskopisk skala kan vi konstatera att de flesta sediment har en viss heterogenitet i form av växellagring etc. I grövre sediment är den hydrauliska konduktiviteten större än i finkornigare sediment. Därigenom finns det snabbare flödesvägar och långsammare dito.



Figur 30. Bilden visar ett exempel på lager (i en jordprofil) med olika hydraulisk konduktivitet (efter Naturvårdsverket, 1985).

I naturliga lagerföljder förekommer ofta lager med olika hydraulisk konduktivitet. Även tydliga lager har en begränsad utbredning. Om man har god information beträffande olika lagars mäktighet och utsträckning kan detta inkluderas i en modell. Det innebär i så fall att modellen kommer att beräkna olika flödesvägar och olika flödeshastighet. Ofta vet man bara medelvärden på hydraulisk konduktivitet för vissa punkter i en geologisk bildning. Hela variationen i flödeshastigheter måste då inkluderas i dispersiviteten.

En låg dispersivitet (α) innebär att utspridningen av föroreningen blir liten p g a små skillnader i flödeshastighet. Flödet sker i så fall i ett material och system som är relativt homogent. Dispersiviteten längs med strömningsriktningen kallas longitudinell, den mot strömningsriktningen vinkelräta dispersiviteten kallas transversell respektive vertikal. I de flesta fall är $\alpha_L > \alpha_T > \alpha_V$.

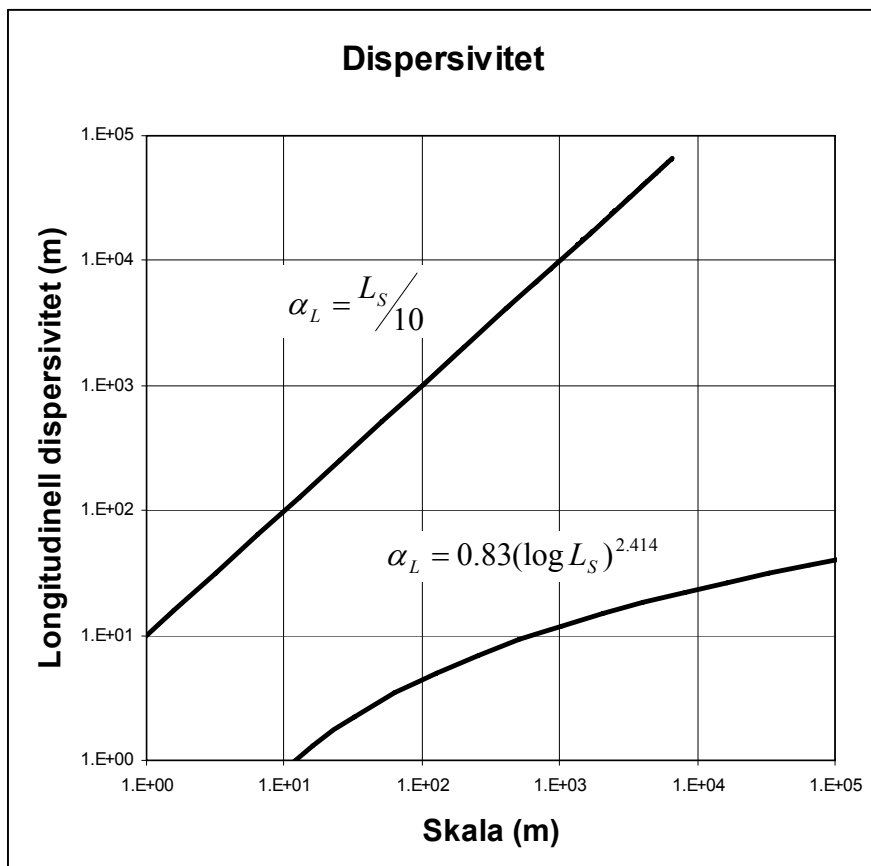
Dispersionen är matematiskt analogt med diffusionsprocessen. I en akvifär med en grundvattenströmning kan den mekaniska dispersionen och molekyllära diffusionen inte särskiljas utan ett gemensamt uttryck, hydrodynamisk dispersion används:

$$D_L = \alpha_L v_n + D_e$$

- där D_L = hydrodynamisk dispersion
 α_L = longitudinell dispersivitet
 D_e = effektiv diffusionskoefficient ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)
 v_n = nettohastighet i flödesriktningen (m s^{-1})

Då det advektiva flödet närmar sig noll ($v \rightarrow 0$), t ex i lera, ser vi att $D_L = D_e$, dvs den hydrodynamiska dispersionen är lika med diffusionskoefficienten. Dispersionen är dock inte konstant utan ökar med transportsträckan på grund av att akvifärernas inneboende heterogeniteter och dispersiviteten kan variera så mycket som mellan 10^{-2} till 10^4 m (Gelhar et al, 1992). En tumregel är att dispersiviteten är ca 1/10 av transportsträckan. Den mest kända matematiska beskrivningen av hur dispersiviteten varierar med transportsträckan har dock Xu och Eckstein (1995) gjort (Figur 31):

$$\alpha_L = 0.83(\log L_S)^{2.414}$$



Figur 31. Longitudinell dispersivitet mot transportsträckan av föroreningen (efter Gelhar et al. 1992).

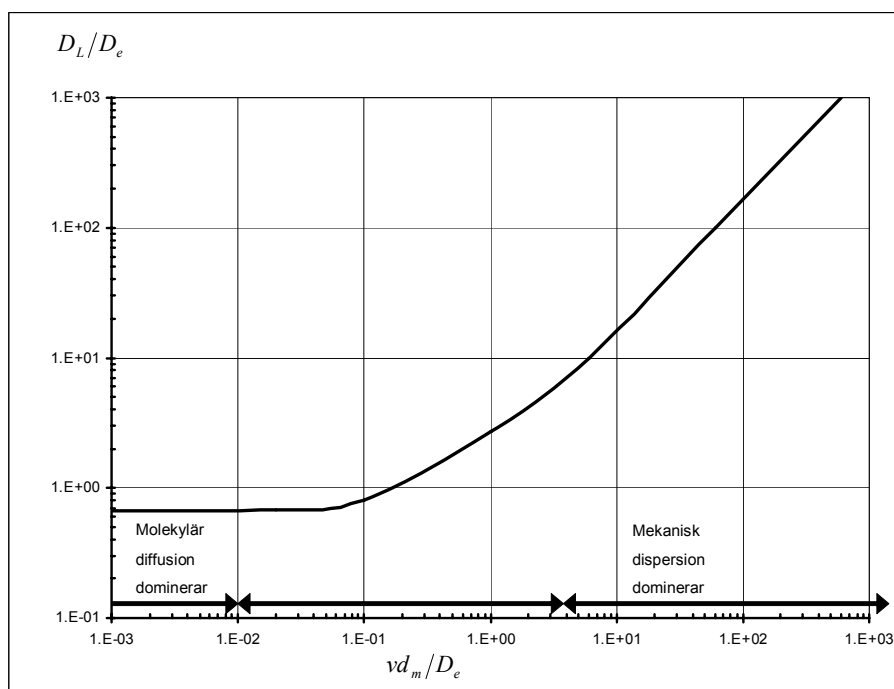
Som synes kan dispersiviteten variera en hel del och försiktighet bör iaktas vid parameteriseringen. En känslighetsanalys kan dock ofta lätt göras för dispersiviteten för att bedöma hur den påverkar resultaten av simuleringen.

Vattnets hastighet (v) och jordens kornstorlek (d_m) är de faktorer som påverkar den hydrodynamiska dispersionen mest. Genom att studera kolonnförsök kunde Pfannkuch (1962) beskriva förhållandet mellan den hydrodynamiska dispersionen, diffusionen och vattnets hastighet (Figur). Med hjälp av det så kallade Peclet-talet kan man bestämma om advektion eller diffusion och dispersion är den dominerande omblandnings- och transportmekanismerna. Detta förhållande kan användas vid upprättandet av modellen och känslighetsanalysen av de olika parametrarna för att fokus skall hamna på ”rätt” parameter. Peclet-talet uttrycks med (Bear, 1972):

$$N_{PE} = \frac{v_n d_m}{D_e}$$

där N_{PE} = Peclet-tal
 v_n = nettohastigheten hos flödet ($m\ s^{-1}$)
 d_m = karakteristisk flödeslängd, medellängd av sedimentpartiklarna (m)

För låga N_{PE} ($<0,01$) ändras inte förhållandet mellan D_L/D_e vilket indikerar att diffusion är den dominerande processen. Vid ökande N_{PE} ($0,01 - 4$) är omblandningen inte endast beroende av diffusion utan även dispersion och vid högre N_{PE} ($4 - 10^4$) dominerar mekanisk dispersion.



Figur 32. D_L/D_e som funktion av Peclet-talet N_{PE} , baserat på experimentella data från kolonnförsök (efter Perkins och Johnson, 1963).

5.3.5 Adsorption

För att bestämma jordens förmåga att adsorbera ett ämne vid olika koncentrationer används olika adsorptions-isotermer varav Langmuir och Freundlich isotermer är de mest kända. Är förhållandet linjärt mellan mängden adsorberat och löst ämne kan ett så kallat K_d -värde användas för att beskriva förhållandet. Detta kommer dock endast gälla över vissa koncentrationsintervall, vid höga halter kommer antalet tillgängliga adsorptionsplatser bli övermättade och på föroreningen. Isotermerna bestäms empiriskt genom ett batch-experiment (skak-lakförsök). Den adsorberade mängden plottas sedan mot koncentrationen i lösningen (grundvattnet) och den adsorberade mängden kan beskrivas enligt följande isotermer (Figur 33 och Figur 34; Sracek och Zeman, 2004):

$$\text{K}_d/\text{linjär} \quad K_d = \frac{S}{C} \quad (1 \text{ kg}^{-1})$$

där K_d = fördelningskoefficient
 S = adsorberad mängd av ämnet
 C = halten i grundvattnet

Ett högt K_d värde innebär således en starkare adsorption.

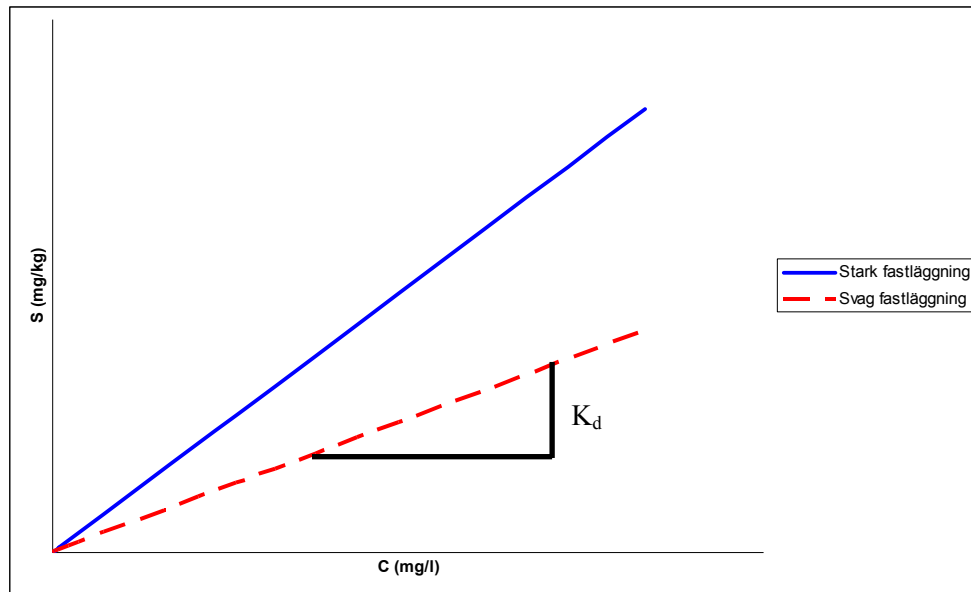
$$\text{Freundlich} \quad S = K_F C^n \quad (1 \text{ kg}^{-1})$$

där K_F = Freundlich fördelningskoefficient
 n = ytterligare en koefficient (vanligen mellan 0,7-1,2)

Här tar man hänsyn till att adsorptionsplatserna blir upptagna allt eftersom koncentrationen av ämnet ökar.

$$\text{Langmuir} \quad S = \frac{S_{\max} K_L C}{1 + K_L C} \quad (1 \text{ kg}^{-1})$$

där K_L = Langmuirs fördelningskoefficient
 S_{\max} = maximala mängden som kan adsorberas



Figur 33. Linjär adsorptionsisoterm (K_d). Ett högre K_d värde innebär en starkare adsorption.

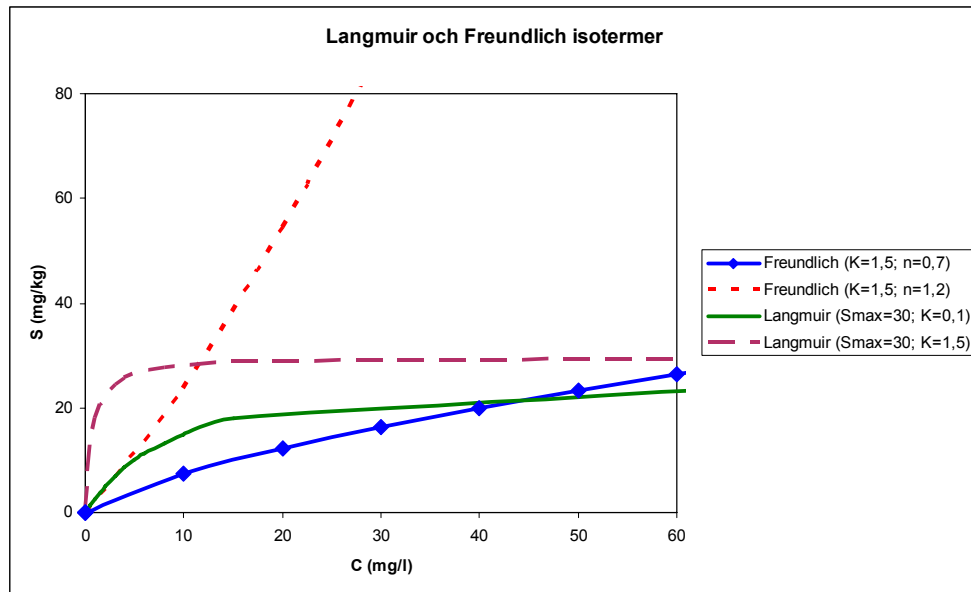
I Naturvårdsverkets rapport 5536 (Naturvårdsverket 2006b) har man bestämt intervall för K_d -värden för ett antal metaller under olika pH-förhållanden, lerhalter och halter organiskt material (Tabell 7). För mer information om respektive ämne samt beskrivning av förslag på framtagande av K_d -värde, se Naturvårdsverket (2006b).

Tabell 7. K_d - värden för metaller (efter Naturvårdsverket, 2006b)

Ämne Metall	MARK-FÖRHÅLLANDE		
	pH = 4,5 lerhalt = 0% org C = 3%	pH = 6 lerhalt = 10% org C = 2%	pH = 7,5 lerhalt = 20% org C = 1%
	K_d (l kg ⁻¹)	K_d (l kg ⁻¹)	K_d (l kg ⁻¹)
Sb	>1000	100-1000	10-100
As	100-1000	>1000	100-1000
Ba	10-100	100-1000	100-1000
Pb	>1000	>1000	100-1000
Cd	10-100	100-1000	>1000
Co	10-100	100-1000	>1000
Cu	100-1000	>1000	100-1000
Cr³⁺	100-1000	>1000	>1000
Cr⁶⁺	>1000	100-1000	10-100
Hg	>1000	>1000	100-1000
Mo	>1000	100-1000	10-100
Ni	10-100	100-1000	>1000
Se	>1000	100-1000	10-100
Ag	100-1000	>1000	>1000
Sn	>1000	>1000	>1000
V	>1000	>1000	100-1000
W	>1000	>1000	100-1000
Zn	10-100	100-1000	>1000

Som synes varierar K_d -värdena mycket och stora osäkerheter föreligger. Dessutom varierar fördelningskoefficienten med halten varför samma K_d -värde inte kan användas över hela koncentrationsintervallet. Istället kan Langmuir eller Freundlich-isotermerna användas. Bestämning av dessa kräver dock ett mer omfattande laboratoriearbete och kan knappast bestämmas experimentellt inom ramen för ett mindre projekt.

Det är viktigt att vid framtagande av K_d värden betänka vilken fastfas-analys som används för beräkningen. Eftersom vissa föroreningar sitter inbundna i mycket svårslösliga kristallina strukturer skall sådana analyser inte användas. Vid beräkning av K_d skall den fastlagda (d v s kemiskt lakbara) andelen av ämnet tas med i beräkningen, se vidare Naturvårdsverket (2006b).



Figur 34. Exempel på Freundlich- och Langmuir-isotermer (efter Domenico och Schwartz, 1997).

För organiska ämnen har det visat sig att en den linjära fördelningskoefficienten, K_d , relativt bra kan bestämmas genom:

$$K_d = K_{oc} f_{oc}$$

där K_{oc} = fördelningskoefficienten mellan ämnet bundet till organiskt kol
 och bundet till vatten

f_{oc} = viktsfraktionen organiskt kol i marken

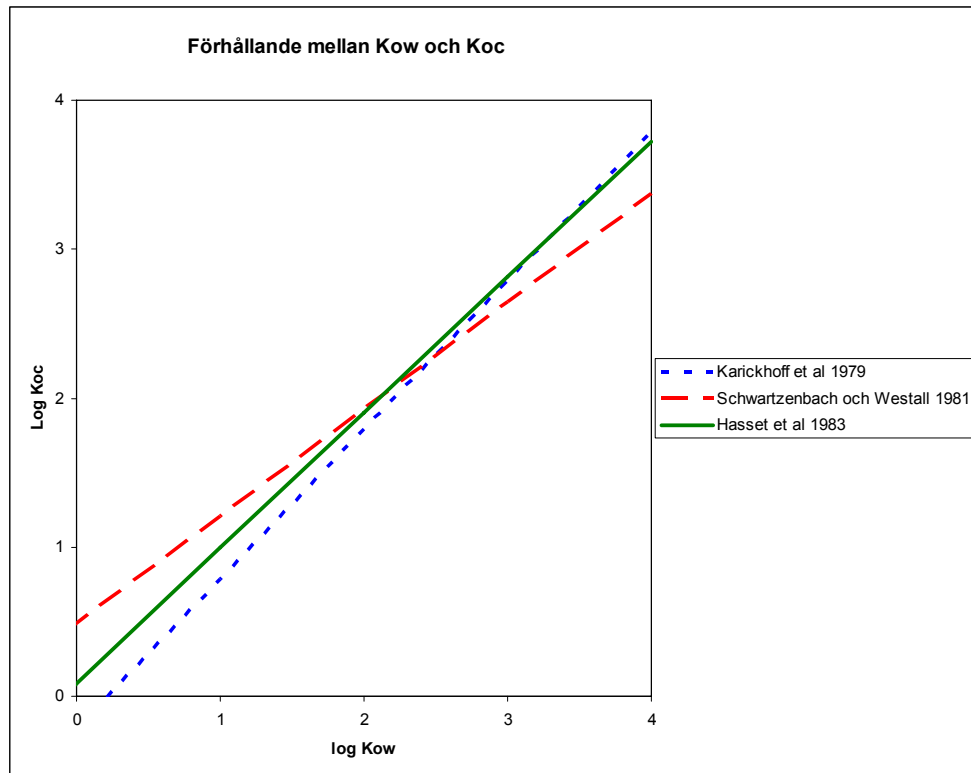
När K_{oc} och f_{oc} är kända kan K_d bestämmas, f_{oc} kan lätt bestämmas på laboratorium medan K_{oc} är svårare. Det finns dock en god relation mellan K_{oc} och $^1K_{ow}$ som finns tabulerat för många ämnen (Tabell 8). Relationen mellan K_{oc} och K_{ow} finns väl beskriven av ett antal författare (Domenico och Schwartz, 1997) och skillnaden sinsemellan är inte stor (Figur35):

$$\log K_{oc} = -0,21 + \log K_{ow} \quad \text{Karickhoff et al, 1979}$$

$$\log K_{oc} = 0,49 + 0,72 \log K_{ow} \quad \text{Schwartzenbach och Westall, 1981}$$

$$\log K_{oc} = 0,088 + 0,909 \log K_{ow} \quad \text{Hasset et al, 1983}$$

¹ Fördelningskoefficienten mellan ämnet i oktanol och vatten.



Figur 35. Förhållandet mellan K_{oc} och K_{ow} för olika bestämningar.

Kom ihåg att organiska ämnens löslighet varierar stort vilket måste tas hänsyn till vid koncentrationer som närmar sig lösligheten.

Tabell 8. Tabulerade K_{oc} värden för MTBE och BTEX-ämnen (USEPA 2006).

Ämne	K_{ow}
MTBE	11
Bensen	83
Toluen	300
Etylbensen	1100
Xylen	894

Vid modellering av masstransport används ofta en s.k. retardationsfaktor (fördröjningsfaktor) för att simulera den fördröjning och utspädning som adsorptions-desorptionsprocessen medför. Retardationsfaktorn bestäms genom:

$$R = \frac{v_n}{v_c} = 1 + \left(\frac{\rho_b}{n}\right)K_d$$

- där v_n = vattnets nettohastighet
 v_c = ämnets transporthastighet
 ρ_b = skrymdensiteten (kg dm^{-3})
 n_e = effektiva porositeten

Termen ρ_b/n beskriver den mängd (kg) material som är i kontakt med 1 l vatten. När ρ_b och K_d är konstanta är R dimensionslös. Om t ex $R = 4$ så innebär det att föroreningstransporten är 4 gånger så långsam som vattnets hastighet.

Räkneexempel

Beräkna transporthastigheten (v_c) för bensen i en akvifär.

Förutsättningar:

$$\begin{aligned}K &= 1 \times 10^{-4} \text{ m s}^{-1} \\h/l &= 0,001 \\n_e &= 0,25 \\ \rho_b &= 1,8 \text{ kg dm}^{-3} \\f_{oc} &= 0,01 \text{ (1\%)} \\ \log K_{ow} \text{ (bensen)} &= 1,92\end{aligned}$$

Lösning:

Den advektiva transporthastigheten (netto hastigheten) beräknas:

$$v_n = \frac{K}{n_e} \frac{h}{l} = \frac{10^{-4}}{0,25} \cdot 0,001 = 4 \times 10^{-7} \text{ m s}^{-1} \text{ eller } 12,61 \text{ m år}^{-1}$$

Vi tar logaritmen av båda sidorna i $K_d = K_{oc} f_{oc}$ och får:

$$\log K_d = \log K_{oc} + \log f_{oc}$$

Byter vi ut $\log K_{oc}$ mot $0,49 + 0,72 \log K_{ow}$ (enligt Schwartzenbach och Westall, 1981) får vi:

$$\begin{aligned}\log K_d &= 0,49 + 0,72 \log K_{ow} + \log f_{oc} = 0,49 + 0,72 \times 1,92 + \log 0,01 = -0,1276 \\ \Rightarrow \\ K_d &= 10^{-0,1276} \text{ eller } 0,75 \text{ l kg}^{-1}\end{aligned}$$

Retardationsfaktorn beräknas genom:

$$R = 1 + \left(\frac{\rho_b}{n_e}\right) K_d = 1 + \frac{1,8}{0,25} \cdot 0,75 = 6,4$$

Transporthastigheten för bensen blir således:

$$v_{bensen} = \frac{v_n}{R} = \frac{12,61}{6,4} = 1,97 \text{ m år}^{-1}$$

5.3.6 Nedbrytning

Kemiska reaktioner, längs med transportsträckan i grundvattnet, innebär att tidsfaktorn måste inkluderas i reaktionen som sker. Antag att ett ämne (A) reagerar och omvandlas (t ex vid biologisk nedbrytning) till en produkt (P), $A \rightarrow P$. Hastigheten av denna reaktion kan beskrivas genom (Keily, 1997):

$$\text{0:e-ordningens reaktion} \quad -\frac{\partial C}{\partial t} = k_0$$

$$\text{1:a ordningens reaktion} \quad -\frac{\partial C}{\partial t} = k_1 C$$

$$\text{2:a ordningens reaktion} \quad -\frac{\partial C}{\partial t} = k_2 C^2$$

där C = koncentrationen av ämnet
 t = tiden
 $k_0 = \text{mol l}^{-1} \text{s}^{-1}$
 $k_1 = \text{s}^{-1}$
 $k_2 = \text{l mol}^{-1} \text{s}^{-1}$

Integrerar vi ekvationerna ovan får vi ekvationer som är direkt användbara för beskrivning av ett reaktionsförlopp såsom biologisk nedbrytning av ett ämne.

Eftersom ämnets koncentration lätt kan mätas vid olika tidpunkter kan en kurva plottas och koefficienten bestämmas för de givna förhållandena (36). Halveringstiden ($t_{1/2}$ [dag⁻¹]) är ett begrepp som ofta används i modelleringssammanhang och som beskriver den tid det tar för mängden av ämnet att halveras. Halveringstiden beror av flera olika förhållanden beroende av vilken reaktion som beskrivs. För nedbrytning är kännedom om syreförhållanden viktiga p g a att nedbrytning är starkt beroende av huruvida aeroba eller anaeroba förhållanden gäller. Om man integrerar de olika ekvationerna för 0:e, 1:a och 2:a ordningens reaktioner och löser dessa för halveringstiden (se t ex Kiely, 1997) får man:

$$\text{0:e-ordningens (integrerad)} \quad C_t = C_0 - k_0 t$$

$$\text{Halveringstid} \quad t_{1/2} = \frac{C_0}{2k_0} \quad (\text{dag}^{-1})$$

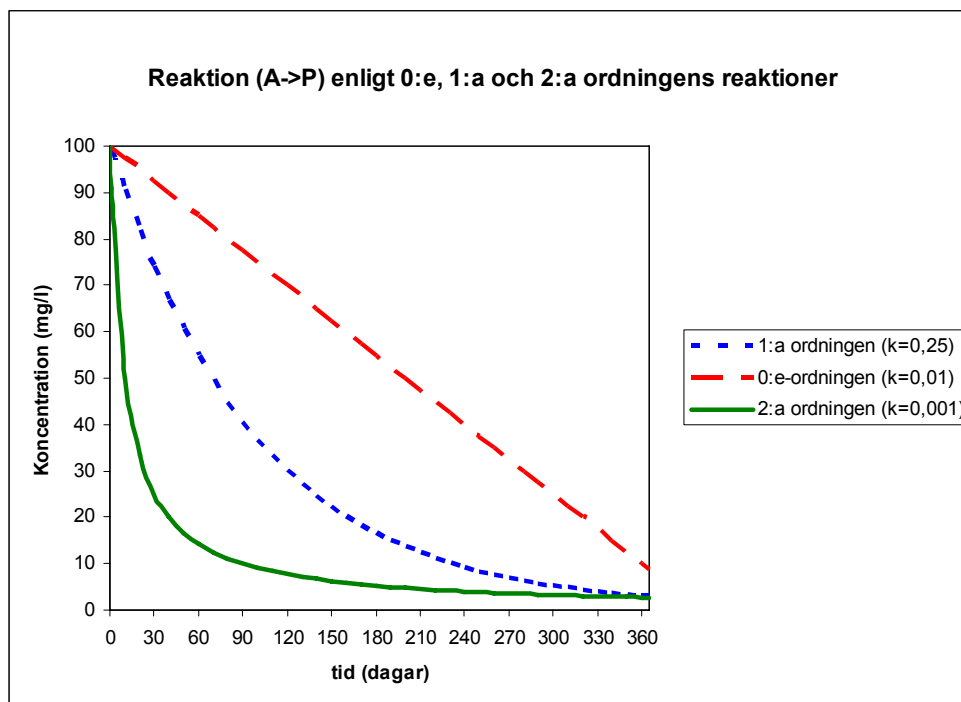
$$\text{1:a ordningens (integrerad)} \quad C_t = C_0 e^{-k t}$$

$$\text{Halveringstid} \quad t_{1/2} = \frac{0,693}{k} \quad (\text{dag}^{-1})$$

$$\text{2:a ordningens (integrerad)} \quad \frac{1}{C_t} = \frac{1}{C_0} + k_2 t$$

$$\text{Halveringstid} \quad t_{1/2} = \frac{1}{k_2 C_0} \quad (\text{dag}^{-1})$$

Figur 36 nedan visar hur reaktionsförloppet $A \rightarrow P$ sker över tiden. Reaktionsförloppet kan t ex vara nedbrytning av bensen i en akvifär eller avdunstning av xylener från en vattenyta alternativt reaktion med ett annat ämne varvid mängden av ämne A minskar över tiden.



Figur 36. Exempel på ett reaktions- förlopp illustrerat genom en s k 0:e, 1:a respektive 2:a ordningens reaktioner.

Halveringstider för organiska ämnens biologiska nedbrytning i grundvatten finns relativt väl dokumenterat (Howard et al, 1991) men varierar mycket beroende på de platsspecifika förhållandena då de bestäms av tillgången på syre eller annan oxidant. Saknas oxidant avstannar nedbrytningen. Detta innebär att kalibrering av en modell med hänsynstagande av kinetik och halveringstid är mycket komplicerat. En känslighetsanalys av systemet eller en worst-case approach är ofta lämplig.

Tabell 9. Halveringstider för BTEX-ämnerna i grundvatten (från Howard et al, 1991).

Ämne	Grundvatten $t_{1/2}$ (tim ⁻¹)
Bensen	240-17280
Toluen	168-672
Etylbensen	144-5472
Xylener	336-8640

6 Körning av numerisk modell

Innan prediktiva simuleringar kan utföras måste modellen kalibreras. I samband med att man lägger in indata i modellen är det nödvändigt att kontrollera att modellen är ”körbar” och att resultaten ser någorlunda rimliga ut. Man kan möjligen säga att denna process är en första grov kalibrering.

Om modellen räknar men inte avslutas på rätt sätt (d v s inte uppnår konvergens) kan det föreligga numeriska problem i modellen. Dessa kan bero på ett antal olika förhållanden. Vanligt beträffande FDM-modeller är att det i så fall i modellen finns för stora skillnader i storlek mellan närliggande celler, det finns för stora kontraster i hydraulisk konduktivitet mellan celler, eller att celler med avvikande egenskaper ligger helt inbäddade i annat egenskapsområde.

Ett vanligt alternativ är även att modellen räknar ”nästan rätt” men att kriterierna för att konvergens skall anses ha uppnåtts är strängare än vad modellen med givna parametrar klarar. Normalvärdet (”default”) i modellen kan vara att beräknad grundvattennivå i två på varandra följande iterationer (beräkningssteg) inte får avvika mer än maximalt 0,01 m någon stans i modellen.

Om modellen når en lösning som innebär att variationen i beräknad grundvattennivå mellan två på varandra följande tidssteg är 0,03 m sker då inget normalt avslut av beräkningarna. Denna variation kan emellertid vara helt acceptabel, men modellören måste då ange detta som beräkningsförutsättning för den beräkningsalgoritm (”numeric engine”) som är vald. Och man bör senare även ange i rapport att noggrannheten i beräkning av trycknivåer är lägre än normalt.

Om konvergens inte uppnås kan man alternativt byta beräkningsalgoritm, till en som är mer lämpad för den kombination av geometri och indata som man har.

6.1 Kalibrering och validering

Kalibrering i egentlig betydelse innebär att man på ett objektivet sätt justerar modellen till dess att (en på förhand definierad grad av) överensstämmelse mellan konstaterade förhållanden och av modellen predikerade förhållanden (trycknivåer, flödesmängder etc) erhålls.

Kalibrering innebär att modellen och dess parametervärden justeras så att simulerade nivåer, flöden, transporttider, koncentrationer, etc. överensstämmer med uppmätta värden för kalibreringsperioden. För att sedan kunna värdera hur bra modellen är kalibrerad och överensstämmer med verkligheten bör den testas mot oberoende data (d v s data som den inte är kalibrerad mot). Det kan t ex vara från en annan tidsperiod eller från uppmätta nivåer eller flöden som ej använts för kalibreringen. Detta kallas validering.

6.1.1 Kalibrering mot vilka data

De data som oftast finns tillgängliga att kalibrera mot är dagens förhållanden. Dessa förhållanden är lättast att konstatera, och det är möjligt att komplettera dessa data om nödvändigt. För att på ett säkert sätt kunna prognostisera förhållanden som avviker från dagens förhållanden är det önskvärt med data som avviker från

varandra. Grundvattennivåer under torrare eller våtare förhållanden (gärna extremförhållanden) samt från innan dagens brunnar eller dränerande objekt i form av dräningar, avloppsledningar eller tunnlar utfördes är önskvärda. Finns inga historiska data kan man vara tvungen att antingen följa upp nivå- och flödesvariationer under viss tid framåt, eller alternativt åstadkomma rejäl störning av akvifären i form av pumpning eller infiltration. När vi har att göra med förorenad mark kan det sista alternativet vara mindre lämpligt.

Kalibrering kan ske **manuellt** eller ”automatiskt” **med hjälp av datorprogram**, som ofta är inkluderat i de kommersiella programpaketen. Ett vanligt förekommande sådant program är PEST (Parameter Estimation). Bägge dessa metoder har sina för- och nackdelar.

Vid manuell kalibrering ändrar modellören olika parametervärden och modifierar eventuellt även modellens uppbyggnad så att en bättre och bättre överensstämmelse mellan observerat och simulerat uppnås. Fördelen med detta är att modellören lär känna sin modell och förhållandena i verkligheten bättre och bättre. Fokus kan även sättas på att kalibreringen blir mycket god inom en del av modellen där det är extra viktigt. Nackdelen är att det kan ta tid att erhålla en optimal kalibrering.

Vid ”automatisk” kalibrering räknar datorn tämligen snabbt fram de parametervärden som ger bäst anpassning. Helt automatisk är ändå inte denna typ av kalibrering, eftersom modellören måste värdera om kalibreringen gett rimliga parametervärden.

Både vid manuell och ”automatisk” kalibrering är det viktigt att definiera vilka data (observationsrör, flöden, tidsperiod etc.) som är viktigast att uppnå överensstämmelse mot. Dessa får en större vikt än övriga data.

Kalibreringsresultaten måste dokumenteras. Vanligt är att man kan få ett mått på överensstämmelse i form av totalfel eller minstakvadratsumma dividerat med antal observationspunkter. Under förutsättning att alla uppmätta nivåer är lika viktiga och att avvikelsen mellan simulerat och uppmätt är ungefär lika stor, är detta bra mått på hur väl kalibreringen har lyckats. Lättare att förstå kan ett diagram som visar simulerade mot observerade nivåer vara.

6.1.2 Behov av kompletterande information och revidering av modell

När man kommit så långt i sin modelleringsprocess bör man ha fått en god uppfattning om hur långt befintlig information räcker, och vilken grad av säkerhet i beräkningar och prognoser som bör kunna uppnås. Det kan då vara lämpligt att stämma av detta med beställaren, och om nödvändigt komma överens om eventuella kompletterande undersökningar och revideringar av uppställd modell. Om sådana inte krävs är modellen klar att användas för hydraulisk simulering och färdig för att kompletteras med indata beträffande kemikalietransport, samt kalibreras för denna typ av simuleringar.

6.2 Numeriska problem

Numeriska problem är något som måste undvikas. Detta kan vara att den numeriska modellens approximationer och interpolationer inte närmar sig ett stabilt värde med litet fel jämfört med vad en exakt matematisk lösning hade givit. Vi kan råka ut för att den numeriska modellen inte konvergerar mot ett approximativt värde nära det verkliga värdet i en viss punkt utan istället börjar svänga eller divergerar. Den approximativa numeriska lösningen på vårt problem uppnår inte ett tillräckligt noggrant (approximativt) värde.

Detta förhållande kan man råka ut för trots att de indata som getts till modellen är rimliga. Problemet kan då bestå i att den numeriska modellen inte klarar av för stora skillnader beträffande cell- eller elementstorlek, eller mycket stor variation i hydrauliska parametrar eller gradienter. De alternativ som man vanligen har i detta fall är att byta ”numeric engine” eller ”solver”, ändra parametrar i denna numeriska metod, ändra cell- eller elementstorlek, ändra modellgeometri, ändra parametervärden i celler eller element etc.

Om inte manualen eller mer erfaren kollega kan ge indikationer på vad som kan vara problemet, återstår att ta kontakt med den ”support” för programvaran som programvarutillverkaren vanligen tillhandahåller.

7 Rapportering

När det gäller själva modelleringsprocessen (och valmöjligheter/beslutspunkter i denna process) finns ett antal bra flödesscheman uppställda, se exempelvis Andersson och Woessner (1992), ASTM (1993) eller Naturvårdsverket (1997). Den senare rapporten ger även många goda råd inte bara beträffande uppställning av grundvattenmodeller, utan också beträffande rapportering av erhållna resultat. I Naturvårdsverket (2006a) redovisades exempel på innehållsförteckning för en modelleringsrapport. I rapport från DHI (Naturvårdsverket, 2006c) ges exempel på en snarlik mall. Nedan ges ett förslag på hur en modelleringsrapport kan var upplagd.

Tabell 10. Exempel på innehållsförteckning i en modelleringsrapport Från Naturvårdsverket (2006a), modifierad från Naturvårdsverket (1997).

1	Inledning
1.1	Bakgrund
1.2	Platsbeskrivning
1.3	Problemformulering, omfattning och syfte
2	Konceptuell modell
2.1	Geologi
2.2	Grundvattenförhållanden
2.3	Hydrologiska gränser
2.4	Hydrauliska egenskaper
2.5	Källor och sänkor
2.6	Vattenbalans
2.7	Vattenkemi
2.8	Föroreningskälla eller – källor
3	Programkod
3.1	Programval
3.2	Programbeskrivning
4	Konstruktion av modellen
4.1	Antaganden, förenklingar och parameterisering
4.2	Modelldiskretisering
4.3	Hydrauliska egenskaper
4.4	Randvillkor
4.5	Transport-, fastläggnings- och nedbrytningsparametrar
4.6	Kalibreringsobjekt och mål
5	Kalibrering och validering
5.1	Känslighetsanalys
5.2	Validering av modellen
6	Prediktiva simuleringar
6.1	Redovisning av specifika förutsättningar vid enskilt simulerat fall
6.2	Redovisning av resultat från enskilt simulerat fall
7	Diskussion och slutsatser
7.1	Modellantaganden och begränsningar
7.2	Beskrivning och värdering av osäkerheter
7.3	Modellprediktioner
7.4	Rekommendationer
8	Referenser
	Bilagor (utvalda in- och utdata mm)

8 Referenser

Anderson M & Woessner W, 1992: *Applied groundwater modeling. Simulation of flow and advective transport*, Academic Press Inc., New York, USA.

ASTM, 1993: *Standard guide for application of a ground-water flow model to a site-specific problem, ASTM D 5447-93*, American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, USA

Bear J, 1972: *Dynamics of Fluid in Porous Media*, American Elsevier, New York, 1972

Beyer W & Schweiger K H, 1969: *zur Bestimmung des entwässerbaren Porenanteils des Grundwasserleiter*. WWT 19: s 57-60. Berlin.

Bengtsson M-L, 1996: *Hydrogeologisk sårbarhetsklassificering som verktyg i kommunal planering, Med exemplifiering i Lerums kommun*. Licentiatuppsats, Chalmers Tekniska Högskola, Publ. A 81.

Carlsson L & Gustafson G, 1991: *Provpumpning som geohydrologisk undersökningsmetodik*. Bygghörsningsrådet, Rapport R66:1991. Reviderad utgåva av R41:1984.

Domenico P A & Schwartz F W, 1997: *Physical and chemical hydrogeology*. Wiley, New York. 2nd ed. 881 sid.

Driscoll F G, 1987: *Groundwater and Wells*. Johnson Division, St. Paul, Minnesota 55112, 1098 sid.

Espeby B & Gustafsson J-P, 2001: *Vatten och ämnestransport I den omättade zonen*, Avd för Mark- och vattenresurser, KTH och Naturvårdsverket, Stockholm

Eckis R, 1934: *Geology and ground water storage capacity of valley fill*. Calif. Div. Water Resources Bull. 45 (sid 91-246).

Fair G M & Hatch L P, 1933: *Fundamental factors governing the streamline flow of water through sand*. Journ. Amer. Water Works Assoc., vol 25, s 1551-1565.

Fetter C W, 1994: *Applied Hydrology*. Third Edition, Prentice-Hall, Inc., Upper Saddle River, New Jersey, 691 sid.

Freeze R A & Cherry J A, 1979: *Groundwater*. Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey 07632, 604 sid.

Gedda C & Ejdeling G, 1987: *Grundvattenprovtagning i jordlager. Provtagningsmetodens betydelse vid grundvattenkontroll*. Naturvårdsverket rapport 3387.

Gelhar L W & Adams E E, 1992: *Field Study of Dispersion in a Heterogeneous Aquifer 2. Spatial Moments Analysis*, Water Resources Research, vol 28, Issue 12, s 3293-3307.

Hasset R W, Banwart W L & Griffin R A, 1983: *Correlation of compound properties with sorption characteristics of non-polar compounds by soils and sediments: Concepts and limitations*. In C. W. Francis and S. I. Auerbach (eds.), Environment and Solid Wastes: Characterisation, Treatment and Disposal. Butterworth Publishers, Kap 15, s 161-178.

Hazen A, 1892: *Some physical properties of sands and gravels with special reference to their use in filtration*. Twenty-fourth annual report, Mass. State Board of Health, s 541-556. Boston, Mass.

Henriksen H J, Sonnenborg T, Christensen H B, Refsgaard J C, Harrar B, Rasmussen P & Brun A, 2001: *Retningslinier for opstilling af grundvandsmodeller*. Arbejdsrapport fra Miljestyrelsen Nr 17.

Karickhoff S W, Brown D S & Scott T A, 1979: *Sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments*. Water Res., vol 13, s 241-248

Kiely G, 1997: *Environmental Engineering*, McGraw Hill, England, UK, 1997.

Knutsson G & Morfeldt C-O, 2002: *Grundvatten, Teori och Tillämpning*. Tredje, reviderade upplagan. AB Svensk Byggtjänst. Stockholm. ISBN 91-7332-972-X.

Kruseman G P & de Ridder N A, 1990: *Analysis and evaluation of pumping test data*. Second edition (Completely revised). ILRI Publication 47. Int. Inst. for. Land Reclamation and Improvement. Wageningen, Netherlands, 377 sid.

Langguth H-R & Voigt R, 1980: *Hydrogeologische Methoden*. Springer Verlag. ISBN 3-540-10174-8 (Berlin, Heidelberg, New York). 486 sid.

Naturvårdsverket 1985: *Avloppsvatteninfiltration – Förutsättningar, funktion, miljökonsekvenser*. Naturvårdsverket / Nordiska Ministerrådet. ISBN 91-7590-221-4.

Naturvårdsverket, 1997: *Modeller för miljögeotekniska tillämpningar, En rapport från en arbetsgrupp tillsatt av miljögeotekniska kommittén inom Svenska Geotekniska Föreningen, Efterbehandling och Sanering*, Naturvårdsverket Rapport 4836.

Naturvårdsverket, 1999a: *Bedömningsgrunder för miljö kvalitet, Grundvatten*, Rapport 4915.

Naturvårdsverket, 2006a: *Modeller för transport och spridning av föroreningar; Förstudie - Användning av numeriska beräkningsmodeller för beskrivning av transport och spridning av föroreningar i grundvatten*, von Brömssen M, Gunne-my L, Lindstrand O & Jonasson S, Naturvårdsverket Rapport 5541.

Naturvårdsverket, 2006b: *Metallers mobilitet i mark och vatten*, Berggren Kleja D, Elert M, Gustafsson J-P, Jarvis N & Norrström A-C, Naturvårdsverket Rapport 5536.

Naturvårdsverket, 2006c: *Datormodeller för föroreningsspridning fas I*, Gustafsson L-G, Refsgaard A & Sabel U, Naturvårdsverket Rapport 5534.

Osborne P S, 1993: *EPA Groundwater Issue: Suggested Operation Procedures for Aquifer Pumping Tests*. EPA/540/S-93/503, February 1993.

Persson K, 2004: *Modellering av föroreningstransport i grundvattnet från området kring Componenta's gjuteri i Alvesta till Lekarydsån*, Mark och Vattenteknik, KTH, Examensarbete, 2004.

Perkins T K & Johnson O C, 1963: *A review of diffusion and dispersion in porous media*. Society of Petroleum Engineers Journal, vol 3, s. 70-84.

Pinder G F & Gray W G, 1977: *Finite element simulation in surface and subsurface hydrology*. Academic Press. New York. ISBN 0-12-556950-5.

Schwarzenbach R P & Westall J, 1981: *Transport of nonpolar organic compounds from surface water to groundwater. Laboratory studies*. Environ. Sci. Technol., vol 15, s 1300-1367.

Sracek O & Zeman J, 2004: *Introduction to environmental hydrogeochemistry*, Faculty of Science, Masaryk University in Brno.

Todd D K, 1959: *Groundwater hydrology*. John Wiley & Sons. New York.

Todd D K, 1980: *Groundwater hydrology*. Second edition. John Wiley & Sons. New York. ISBN 0-471-08641-X.

Modeller för transport och spridning av föroreningar

fas 2

RAPPORT 5692

NATURVÅRDSVERKET
ISBN 91-620-5692-1
ISSN 0282-7298

Rapporten syftar till att underlätta användningen av modellverktyg för beskrivning av föroreningstransport med grundvatten. Rapporten beskriver hur man kan strukturera arbetet vid uppställning av enklare eller måttligt komplicerade grundvattenmodeller för simulering av transport och spridning av föroreningar. Vidare redovisas litteratur- och erfarenhetsvärden beträffande hydrogeologiska och hydrologiska parametrar samt lämpliga metoder för att ta fram värden för dessa parametrar.

Naturvårdsverket har inte tagit ställning till innehållet i rapporten. Författarna svarar ensamma för innehållet, 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.