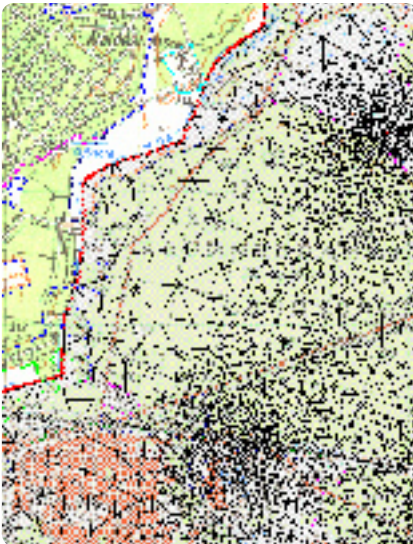
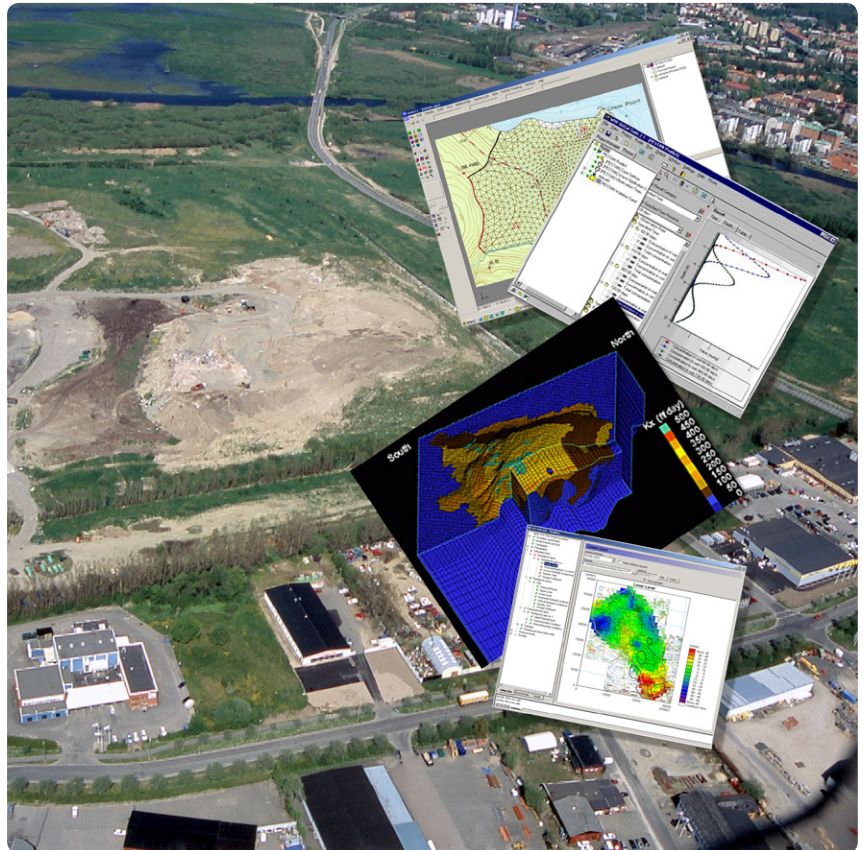


Datormodeller för föroreningsspredning fas 1

RAPPORT 5534 • FEBRUARI 2006



Kunskapsprogrammet



Datormodeller för föroreningsspredning fas 1

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

Beställningar

Ordertel: 08-505 933 40

Orderfax: 08-505 933 99

E-post: natur@cm.se

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

Internet: www.naturvardsverket.se/bokhandeln

Naturvårdsverket

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

E-post: natur@naturvardsverket.se

Postadress: Naturvårdsverket, SE-106 48 Stockholm

Internet: www.naturvardsverket.se

ISBN 91-620-5534-8.pdf

ISSN 0282-7298

© Naturvårdsverket 2006

Elektronisk publikation

Omslagsfoto: Tony Pearce. Flygbild över Härlövstippen i Kristianstad

Förord

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

Naturvårdsverket har därför initierat kunskapsprogrammet Hållbar Sanering.

Den här rapporten redovisar projektet ”Utvärdering av datormodeller för föroreningsspridning – fas 1”. Projektet påbörjades i augusti 2004 och har slutförts i mars 2005.

Rapporten berör olika datormodellens begränsningar och lämplighet vid riskbedömning av föroreningsspridning och ger på så vis en överblick över tillgängliga modeller.

Projektet har bedrivits av en arbetsgrupp huvudsakligen bestående av Lars-Göran Gustafsson, Anders Refsgaard och Ulrika Sabel, samtliga vid DHI Water & Environment. Dessa är även författare till denna rapport. Naturvårdsverket har inte tagit ställning till innehållet i den här rapporten. Författarna svarar själva för innehåll, slutsatser och eventuella rekommendationer.

Ivars Neretnieks från KTH har varit Hållbar Sanerings kontaktperson i projektet.

Naturvårdsverket januari 2006

Innehåll

Förord	3
Innehåll	4
Sammanfattning	6
Summary	8
1 Bakgrund	10
2 Syfte	11
3 Utvärdering av existerande modellsystem	12
3.1 Behov vid modellering	12
3.2 Urval och utvärderingsresultat	15
3.3 Modellers begränsningar och lämplighet	17
3.3.1 Kalibrering av flödes- och transportmodeller	17
3.3.2 Osäkerheter	18
3.3.3 Modellbegränsningar och lämplighet	20
4 Exempel på användning av modeller	21
4.1 Introduktion	21
4.2 Vigs avfallsdeponi	22
4.2.1 Bakgrund	22
4.2.2 Metodik	22
4.2.3 Indata	23
4.2.4 Modellberäkningar	23
4.2.5 Resultat	24
4.2.6 Slutsatser	25
4.3 Slutförvar av kärnbränsle	27
4.3.1 Bakgrund	27
4.3.2 Metodik	28
4.3.3 Indata	28
4.3.4 Modellberäkningar	29
4.3.5 Resultat	30
4.3.6 Slutsatser	31
5 Kvalitetssäkring och dokumentation vid modellering	32
5.1 Introduktion	32
5.2 Upplägg för en modellrapport	33
6 Referenser	38
Bilaga 1 – Utvärdering av existerande modellsystem	1
1 Introduktion	1
2 Metodik	2
2.1 Urvalskriterier	2
2.2 Tillgängliga modeller	2
2.3 Utvalda modeller för vidare utvärdering	7
3 Referenser	34
Bilaga 2 – Ekvationer för flöde och transport av lösliga ämnen	1
1 Introduktion	1

2	Grundvattenflöde	2
3	Flöde i den omättade zonen	5
4	Transport i grundvatten	6
5	Transport i den omättade zonen	8
6	Källor och utlopp	9
6.1	Transport i spruckna media	9
6.2	Sorptionsprocesser	9
6.3	Nedbrytning	11
6.4	Växtupptag	12
6.5	Monod-liknande reaktioner	12
6.5	Geokemiska och övriga reaktioner	12
7	Referenser	13
Bilaga 3 – Exempel på användning av modeller vid riskbedömning av föroreningsspridning i grundvatten		1
1	Indledning	1
2	Vigs avfallsdeponi	2
2.1	Bakgrund	2
2.2	Hydrogeologiska och andra fysiska förhållanden	2
2.3	JAGG-modellen	3
2.4	Modellberäkningar	4
2.5	Resultat	6
2.6	Slutsatser	7
2.7	Rekommendationer om ytterligare användning av beräkningsmodeller	8
2.8	Referenser	9
3	Slutförvar av kärnbränsle	10
3.1	Bakgrund	10
3.2	Metodik	10
3.3	Indata	13
3.4	Modeller	14
3.5	Slutsatser	18
3.6	Referenser	19
Bilaga 4 - Begrepp, termer och förkortningar		1
	Begrepp och termer	1
	Förkortningar	6

Sammanfattning

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

Grundvattenmodellen kan förutspå grundvattennivåer och/eller transport av lösliga ämnen som förorenar miljön. Dess förmåga att representera grundvattnets flöde varierar dock, då olika modeller kan vara framtagna för olika ändamål.

För att korrekt simulera transport och utspädning av lösliga ämnen krävs en korrekt beskrivning av hydrologin. Eftersom flödesförhållandena ofta varierar stort och med stora rumsliga variationer, rekommenderas generellt fysiskt baserade modeller med begränsad rumslig och begreppsmässig förenkling av parametrar. I tillägg till beskrivning av flödesförhållanden, så beror transporten av lösliga ämnen på den effektiva porositeten, dispersionen och de kemiska och geokemiska egenskaperna hos jorden och de lösliga ämnena.

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

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

Modellbegränsningar bidrar till resultatens osäkerhet. Det är därför uppenbart att man måste överväga lämpligheten hos en viss modell vid en viss riskbedömning.

Valet av modellverktyg i förbindelse med genomförandet av ett modelleringsprojekt kommer typiskt att avgöras av vilka strömningsmässiga och ämnestransportmässiga förhållanden som skall beskrivas med modellerna, vilket i sin tur ställer en rad krav på modellen. Det finns många alternativ gällande modellsystem som kan användas i samband med riskbedömningar kring grundvattenföroreningar.

Detta projekts övergripande syfte har varit att värdera olika modellsystems relevans, lämplighet och förmåga att beskriva strömning, transport och omsättning av ämnen i jord och grundvatten, och därmed dess lämplighet och förmåga att skapa underlag till en riskbedömning. Delmomenten i projektet har inkluderat en översiktlig sammanställning och utvärdering av existerande modellsystem, modellens generella lämplighet och begränsningar med fokus på modellkonceptualisering, kalibrering och osäkerheter i anknytning till modelleringen, samt exemplifiering på användning av modeller under olika förutsättningar. Det slutliga momentet har sammanfattat behov och utförande av kvalitetssäkring och dokumentation vid användning av modeller vid riskbedömning.

Ett flertal existerande grundvattenmodeller (26 st.) har valts ut genom litteratur- och Internetbaserade studier. Dessa modellsystem har översiktligt utvärderats genom att poängsätta deras tillgänglighet, användarvänlighet, tillgång till dokumentation och utbildning, möjlighet att simulera miljökonsekvenser under svenska förhållanden samt antal användare och spridning i världen. Poängsättningen har följt vissa kriterier, och har sedan legat som underlag till ett urval av modeller för vidare analys. Baserat på detta kriterium har åtta modeller valts ut för vidare granskning: WHI Unsat Suite, FEFLOW, FEMWATER, Visual MODFLOW Pro, GMS, MIKE SHE, Groundwater Vistas och MODFLOW SURFACT. Vi har dessutom valt att inkludera FRACTRAN-modellen för dess förmåga att modellera sprucket medium.

I rapporten presenteras två utvalda modelleringsprojekt. Ett exempel är taget ifrån Danmark gällande riskbedömning av en avfallsdeponi och ett ifrån Sverige gällande risker kopplade till djupförvaring av använt kärnbränsle. Dessa exempel visar tillämpning av modeller vid riskbedömning i ett område med sedimentära avlagringar och ett område med kristallin berggrund. Båda dessa typer av geologi återfinns i Sverige. Dessa två projekt speglar två olika typer av modelleringsmetodik och är varandras ytterligheter gällande komplexitet. Riskbedömningen för avfallsdeponin är relativt enkel och översiktlig, men samtidigt effektiv. Riskbedömningen gällande slutförvar av kärnbränsle är betydligt mer omfattande och modelleringen är avancerad, detaljerad och komplex och har i relation krävt en större arbetsinsats. Båda dessa exempel visar hur man kan tillämpa modellering vid en riskbedömning, fast med olika syften, modellverktyg, komplexitet, indatabehov, arbetsinsats och resulterande i olika osäkerheter och resultat.

I rapporten beskrivs det även hur modellarbete generellt bör dokumenteras och kvalitetssäkras, samt de krav som ställs vid användning av modeller vid en riskbedömning. Likaså behovet av att kunna kvantifiera osäkerheter i modellarbetet, som slutligen reflekteras i modellresultaten och därmed även i riskbedömningen.

Summary

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

Groundwater models can predict groundwater levels and/or transport and fate of solutes contaminating the environment. However, their ability to represent the groundwater flow varies, as different models have been developed with different purposes.

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

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

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

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

The general purpose of this project has been to evaluate different models suitability and ability to simulate flow and transport of solutes in the sub-surface system. The project has included a summary and evaluation of existing modelling systems and the description of two project applications. The project also includes a description of quality control and model documentation.

Several existing modelling systems (26) have been evaluated and ranked based on information gathered from the Internet and literature. The ranking has followed certain criteria: availability, user interface, documentation and training, ability to simulate EIA (Environmental Impact Assessment) problems under Swedish condi-

tions and market share. Based on the above evaluation, eight models were selected for further analysis: WHI Unsat Suite, FEFLOW, FEMWATER, Visual MODFLOW Pro, GMS, MIKE SHE, Groundwater Vistas and MODFLOW SURFACT. However, the FRACTRAN model was also included because of its ability to model fractured media.

Two modelling projects are presented in the report: a waste dump risk assessment in Denmark and a nuclear waste risk assessment in Sweden. Both these examples illustrate the use of models in a risk assessment. However, with different modelling aims, tools, methodology, input data, complexity and type of modelling results and inaccuracy.

The documentation and quality aspect of modelling is also included in the report with the purpose of illustrating the need of quantifying uncertainties in the modelling work, results and risk assessment.

1 Bakgrund

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

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

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

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

2 Syfte

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

Projektet innefattar ett antal delmoment:

- 1) litteraturstudie av existerande modellsystem
- 2) utvärdering av utvalda modellsystems egenskaper
- 3) beskrivning av exempel på användning av modeller
- 4) rapportering och diskussion kring databehov, möjligheter

Syftet med moment 1 är att översiktligt sammanställa existerande modellsystem så att en jämförelse dem emellan kan göras. Syftet med moment 2 är att sammanställa utvalda modellers egenskaper vad gäller beskrivning av strömning, transport och omsättning i jord och grundvatten relevanta för svenska förhållanden så att de slutligen kan utvärderas. Syftet med moment 3 är att ge exempel på användning av modeller under olika geologiska, hydrogeologiska och omsättningsmässiga förhållanden och därmed värdera den praktiska användningen av modellerna, deras datakrav, brister i vetenskaplig nivå etc. Syftet med det slutliga moment 4 är att avrapportera projektet, så det kan användas för råd och anvisningar omkring användning av modeller vid riskbedömning, bl.a. vad gäller val av modellkomplexitet, med dess möjligheter och begränsningar och databehov.

3 Utvärdering av existerande modellsystem

3.1 Behov vid modellering

Grundvattenmodeller används ofta i projekt med anknytning till miljöpåverkan eller riskbedömning. Grundvattenmodellen kan förutspå grundvattennivåer och/eller transport av lösliga ämnen som förorenar miljön och kan t.ex. direkt användas i bedömning av mänsklig exponering.

Grundvattenmodellernas förmåga att representera grundvattnets flöde varierar dock, då de kan vara framtagna för olika ändamål. T.ex. att endast simulera flöde, flöde baserat på en jämn densitetsfördelning tillsammans med föroreningstransport och flöde baserat på en varierande densitetsfördelning tillsammans med föroreningstransport. De matematiska beräkningarna kan vara anpassade för simulering av grundvattennivåer, -tryck eller koncentration av lösliga ämnen. Akvifererna kan betraktas som slutna eller öppna, spruckna eller porösa. Beräkningarna kan ske i två (endast horisontell strömning) eller tre dimensioner (horisontell och vertikal strömning) och i ett Kartesiskt koordinatsystem eller i ett tvådimensionellt cylindriskt koordinatsystem. Integrerade yt- och grundvattenmodeller kan ha samma grad av variabilitet eller omfattning gällande komponenter för både ytvatten, markvatten och grundvatten.

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

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

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

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

För att etablera och bygga upp pålitliga modeller för simulering av flöde och transport krävs en stor mängd indata. Flöde i den omättade zonen beräknas traditionellt med Richards ekvation (Maidment, 1992 eller Bilaga 2), som beskriver förhållandet mellan vattenflöde, markfuktighet och hydraulisk konduktivitet. Randförhållandena är vanligtvis i form av infiltration i den övre delen av grundvattenytan. Det antas ofta att flödet i den omättade zonen är vertikalt, d.v.s. modellering i en dimension. Grundvattenflödet är ett masskonserverat och tredimensionellt fenomen som styrs av Darcys lag (Maidment, 1992 eller Bilaga 2).

Det bör nämnas att vi har begränsat denna studie/utvärdering till modeller som hanterar upplösta/lösliga ämnen. Hänsyn har inte tagits till transporten av NAPLS (Non Aqueous Phase Liquids) och DNAPLS (Dense Non Aqueous Phase Liquids) trots att sådana komponenter kan vara betydelsefulla för riskbedömning vid förorenade områden. Denna studie/utvärdering inkluderar även modeller som hanterar densitetsberoende flöde och transport. Den matematiska grunden för sådana flödes- och transportfenomen finns dock inte beskrivna i Bilaga 2.

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

- jordegenskaper, t.ex. pF-diagram och relationskurva mellan mätnad och hydraulisk konduktivitet
- hydrogeologiska egenskaper, t.ex. hydraulisk konduktivitet och porositet
- externa randförhållanden, t.ex. vattendrag, sjöar och andra vattenkroppar
- interna randvillkor, t.ex. grundvattenuttag och återinfiltration
- kalibreringsdata, t.ex. uppmätta grundvattennivåer, uppmätta nivåer i vattendrag och sjöar och profiler över markfuktighet.

Transport av reaktiva lösliga ämnen är också ett mycket dynamiskt och rumsligt varierande fenomen. Den styrs av ekvationen för advektion-dispersion kompletterad med reaktionsparametrar som svarar för förändringar i koncentration orsakad av biogeokemiska reaktioner (se Bilaga 2).

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

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

Vissa biogeokemiska processer kan beskrivas med makroparametrar, t.ex. retardationskoefficienter och nedbrytningskonstanter. Dessa beror ofta på fysiska egenskaper i jord och hos lösliga ämnen, t.ex. K_d (fördelningskoefficient som bestämmer förhållandet mellan upplöst ämne och i jorden adsorberat ämne) och $\log K_{ow}$ (fördelningskoefficient mellan oktanol och vatten). Sådana parametervärden återfinns ofta i litteratur för specifika lösliga ämnen under olika markförhållanden. Dessa kan dock behöva justeras genom kalibrering mot uppmätta koncentrationer.

3.2 Urval och utvärderingsresultat

Ett flertal existerande grundvattenmodeller (26 st.) har valts ut genom litteratur- och Internetbaserade studier (för detaljerad specificering av modellsystem se Bilaga 1). Genom att endast välja kommersiella modellsystem har vi medvetet uteslutit punktspecifika modeller och modeller som endast är tillgängliga för den lokala utvecklaren. Detta har inneburit att ett flertal modellsystem som nyligen har framtagits eller som är under pågående utveckling på universitet/högskolor även har uteslutits.

Dessa modellsystem har översiktligt utvärderats genom att poängsätta deras tillgänglighet, användarvänlighet, tillgång till dokumentation och utbildning, möjlighet att simulera miljökonsekvenser under svenska förhållanden samt antal användare och spridning i världen. Poängsättningen har följt vissa kriterier, se Tabell 3-1 och har sedan legat som underlag till ett urval av modeller för vidare analys. Genom användandet av denna matris har en relativt objektiv analys av modellsystemen utförts. De modellsystem som ingår i en vidare analys och utvärdering har en utvärderingssumma på minst 15 och ett poängvärde på minst 3 eller 4.

Tabell 3-1 Urvalskriterier vid utvärdering av modeller för vidare analys.

Utvärderingskriterier	Poäng			
Beskrivning	1	2	3	4
Tillgänglighet	Ny produkt – okänd för de flesta potentiella användarna	Känd för vissa potentiella användare	Känd för de flesta potentiella användarna	Industristandard
Användarvänlighet	Inget gränssnitt tillgängligt	Grundläggande, inbyggt eller allmänt domänbaserat grafiskt användargränssnitt	Patentskyddat grafiskt användargränssnitt tillgängligt	Omfattande och modernt grafiskt användargränssnitt tillgängligt
Dokumentation och utbildning	Inte tillgänglig	Liten	Måttlig	Omfattande
Möjlighet att simulera miljökonsekvenser under svenska förhållanden	Inte kapabel att simulera grundvattenflöde och transport av reaktiva lösliga ämnen i tre dimensioner	Kapabel att simulera mindre delar av miljökonsekvensproblem under svenska förhållanden	Kapabel att simulera stora delar av miljökonsekvensproblem under svenska förhållanden	Fullt kapabel att simulera miljökonsekvensproblem under svenska förhållanden
Användare/kommersiell spridning	Platsspecifik modell	Endast ett fåtal användare (mindre än 250)	Fler än 250 användare, men i ett begränsat antal länder	Används över hela världen av mer än 250 användare

I Tabell 3-2 presenteras en sammanfattning av resultaten från modellutvärderingen där ett antal modellsystem har uppnått en poäng som är högre än 15. Baserat på detta kriterium har åtta modeller valts ut för vidare granskning: WHI Unsat suite, FEFLOW, FEMWATER, Visual MODFLOW Pro, GMS, MIKE SHE, Groundwa-

ter Vistas och MODFLOW SURFACT. Vi har dessutom valt att inkludera FRACTRAN-modellen för dess förmåga att modellera sprucket medium.

Tabell 3-2 Sammanfattning av resultaten från modellutvärderingen.

Namn	Tillgänglighet	Användarvänlighet	Dokumentation och utbildning	Möjlighet att simulera miljökonsekvenser under svenska förhållanden	Använda-re/kommersiell spridning	Total summa
Aquachem	3	2	3	1	3	12
WHI Unsat Suite	3	3	4	3	3	16
FEFLOW	3	3	4	4	3	17
Visual MODFLOW Pro	4	4	4	3	4	19
MODFLOW-SURFACT	3	4	4	4	3	18
FLOWPATH II	2	3	3	1	2	11
FRACTRAN	2	3	2	2	3	12
FRAC3DVS	2	2	2	3	2	11
MIKE SHE	3	4	3	4	4	18
Risc WorkBench	3	3	3	1	3	13
Visual Groundwater	3	3	3	1	3	13
GMS	4	4	4	4	4	20
Groundwater Vistas	4	4	4	4	4	20
AQUA3D	3	2	2	2	3	12
SUTRA	2	2	2	4	2	12
HST3D	2	1	2	2	2	9
FEMWATER	4	4	4	4	2	18
DYNFLOW	2	2	2	2	1	9
SHETRAN	2	2	2	3	2	10
ECOFLOW	1	1	1	2	1	5
RiskVariabel-metoden	1	1	1	1	1	5
Coup-modellen	1	1	1	2	1	6
DarcyTools	1	1	2	3	1	8
Connectflow	1	1	1	3	1	7
FracMan/MAFIC	1	1	1	2	1	6
GEOAN	1	1	1	2	1	6
JAGG-modellen	2	2	2	1	1	8

Vidare granskning av dessa modeller har inneburit att testversioner eller fulla versioner av alla modellsystemen har införskaffats för installation. Modellerna har sedan testats genom att använda tillhörande manualer och övningar och/eller applicerats på verkliga fall. Det var dock inte möjligt att få tillgång till en testversion av FRACTRAN.

Någon objektiv värdering eller åsikt kring de valda modellerna har inte inkluderats. För en utförlig beskrivning av utvalda modellsystem, se Bilaga 1.

3.3 Modellers begränsningar och lämplighet

3.3.1 Kalibrering av flödes- och transportmodeller

Tillämpning av numeriska modeller kräver generellt uppskattning av modellparametrar. Rumsligt förenklade, konceptuella modeller innefattar konceptuella parametrar som är relaterade till aggregerade beskrivningar av hydrologiska processer. Dessa kan i allmänhet inte bestämmas utifrån ett områdes fysiska egenskaper och därmed behöver dessa modeller kalibrering. Gällande så kallade distribuerade och fysiskt baserade modeller, så skall modellparametrar i princip kunna samlas in från uppmätta data. I praktiken är det dock omöjligt att bestämma modellparametrar för varje individuell beräkningscell på grund av skalproblem (skillnader mellan uppmätt skala och den skala där de algoritmiska processbeskrivningarna härrör ifrån) liksom experimentella hinder. Av detta kan man dra slutsatsen att även distribuerade och fysikaliskt baserade modeller är i behov av kalibrering.

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

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

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

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

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

- flertal variabla mätningar, t.ex. grundvattennivåer, flöde (vattendrag) och vattenhalt i den omättade zonen
- flertal mätplatser, t.ex. flertal mätplatser, för samma variabel, distribuerad inom avrinningsområdet
- flertal reaktionstillstånd, t.ex. objektiva funktioner som mäter olika hydrologiska processers reaktioner såsom generell vattenbalans och maximala vattennivåer.

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

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

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

3.3.2 Osäkerheter

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

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

- De geologiska förhållandena i området; vilka jordarter som är representerade, vilken är jordskiktningen i den omättade zonen, var finns berggrunden, hur impermeabel är berggrunden, finns det sprickor och vilka är deras huvudriktningar och storlek, hur heterogent är systemet i den omättade zonen m.m.

- De hydrogeologiska förhållandena i området; vilka är de hydrauliska egenskaperna hos de geologiska formationerna (hydraulisk konduktivitet, magasin-koefficient, porositet, makroporer), finns det några linser med lägre permeabilitet där lösliga ämnen kan transporteras in och ut beroende på en diffusionsprocess, vilket är det hydrauliska trycket och förhållandena för grundvattennivån i de olika akvifererna och akvitarderna, vilken är gradienten för grundvattennivån och åt vilken riktning lutar den, vilka är de temporala variationerna m.m.
- De hydrologiska förhållandena i området; nederbörd, evapotranspiration, infiltration, vattendrag, sjöar eller liknande som påverkar flödesförhållandena, vilka är de temporala variationerna m.m.
- Vattenkvalitet; vilken styrka har föroreningen vid källan, hur länge har föroreningen läckt ner till grundvattensystemet, vilka är förhållandena för adsorption och nedbrytning för varje typ av förorening, densitetsberoende flöde och transport, DNAPL/NAPL, vilka är förhållandena för dispersion m.m.

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

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

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

- numeriska fel såsom numerisk dispersion, grov diskretisering, trunkering
- modellkoden kan inte beskriva det konceptuella problemet, t.ex. beskrivs ett spricksystem i en kontinuum modell eller i sprickmodeller som förenklar spricksystemet, stationära modeller som tillämpas att beskriva problem av transient karaktär, konservativa modeller som tillämpas för att beskriva migration av DNAPL/NAPL eller densitetsberoende transportfenomen, diffusion in och ut från jordmatrisen i ett sprucket system eller i heterogena formationer m.m.
- modellsystemet klarar inte av att beskriva biogeokemiska reaktioner korrekt; många modeller beskriver komplexa biokemiska reaktioner genom första gradens ekvation för nedbrytning, jämvikt eller kinetiska processer, tillväxt av biomassa m.m.

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

3.3.3 Modellbegränsningar och lämplighet

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

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

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

4 Exempel på användning av modeller

4.1 Introduktion

En riskbedömning gällande grundvatten skall användas för att bedöma om en förorening i jord och/eller grundvatten ger ett oacceptabelt bidrag av föroreningar till grundvattenresursen. Som grund till en riskbedömning finns det ett antal fördefinierade kriterier gällande grundvattenkvalitet. Dessa skall normalt uppfyllas i hela grundvattenmiljön (Miljöstyrelsen, 1998).

Sverige och Danmark saknar tradition gällande användning av numeriska beräkningsmodeller i samband med riskbedömningar. Den primära orsaken är att vägledningen inom området inte påpekar detta.

Få exempel finns därför på praktiska projekt. Två utvalda projekt, där modellering har tillämpats vid en riskbedömning, presenteras i följande kapitel. Ett exempel är taget ifrån Danmark gällande riskbedömning av en avfallsdeponi och ett ifrån Sverige gällande risker kopplade till djupförvaring av använt kärnbränsle. Dessa exempel har valts utifrån önskan att inkludera ett område med sedimentära avlagringar och ett område med kristallin berggrund, då båda dessa typer av geologi återfinns i Sverige.

Den danska miljöstyrelse påpekar, enligt ovan, att det genomförs en enkel bedömning och först därefter mer avancerade modellberäkningar utan att gå i detalj kring vad detta beräkningsmässigt innebär. Det finns ofta inte en ekonomisk grund för att genomföra avancerade modellberäkningar, även om det i en senare fas visar sig kunna spara pengar i förbindelse med åtgärder för att hindra ytterligare spridning av föroreningar.

4.2 Vigs avfallsdeponi

4.2.1 Bakgrund

Vigs avfallsdeponi är anlagd i ett tidigare grustag på den västliga delen av Själland vid Stora Bält. Deponin är utformad för att kunna ta emot ca 1 miljon m³ förorenad jord och det har utförts en riskbedömning gällande förorening av grundvatten och recipient i detta område (Bioteknisk Jordrens, 2000 och Soilrem, 2003). Riskbedömningen har fokuserat på utloppet i den primära recipienten, som är Stora Bält (ligger ca 1500 m nedströms deponin) och grundvattenmagasinet direkt under deponin. En lång rad ämnen har inkluderats i riskbedömningen, som i sin tur inkluderar ett antal scenarier för sluttäckning av deponin med varierande täthet.

4.2.2 Metodik

Arbetet med riskbedömningen har utgångspunkt i JAGG-modellen. Den har dock modifierats på flera punkter och använts på ett annat sätt än som ursprungligen var tänkt. JAGG-modellen är ett beräkningsprogram som har utarbetats i förbindelse med den danska Miljöstyrelsens vägledning kring riskbedömning (Miljöstyrelsen, 1998). JAGG-modellen är utvecklad för att utföra enkla riskbedömningar och för att underlätta genomförandet av de beräkningsrutiner som ingår i en riskbedömning och möjliggöra en grafisk presentation av bedömningsresultaten. Programmet är användarvänligt utformat så att användningen kräver minimal datorkunskap och möjliggör att man själv kan komplettera med data.

I förbindelse med nuvarande projekt är grundvattenmiljön och den omrättade zonen mest relevanta. Programmet innehåller en riskbedömning för grundvatten som är indelad i tre steg som gradvis nyanseras mer och mer.

- Steg 1 inkluderar användandet av en källnära utspädningsmodell, där det räknas med uppblandning i de översta 0.25 m av grundvattenmagasinet omedelbart under föroreningskällan.
- Steg 2 inkluderar användandet av en ”från källan avlägsen” utspädningsmodell, där tjockleken på uppblandningen i grundvattenmagasinet bestäms av ett avstånd svarande till att grundvattnet har strömmat ett år, dock maximalt 100 m från föroreningskällan. Principen är att desto längre grundvattnet strömmar, desto större blir uppblandningstjockleken och detta leder till en mindre föroreningskoncentration.
- Steg 3 inkluderar effekten av adsorption och nedbrytning i grundvattenmagasinet i bedömningen. Då det är svårt att förutsäga nedbrytningshastigheten, bör det alltid pågå en övervakning av platsen, så att den specifika nedbrytningshastigheten kan bestämmas. Baserat på övervakningsdata kan programmet beräkna nedbrytningshastigheten.

4.2.3 Indata

Det har utförts en del fältundersökningar i området i form av undersökningsbrunnar och hydrauliska test. Dessa undersökningar ligger till grund för en enkel konceptuell geologisk modell och uppskattningar gällande hydrauliska förhållanden i grundvattenmagasinen. Avfallsdeponin har direkt hydraulisk kontakt med ett övre grundvattenmagasin med relativt stor utsträckning, men med inhomogena hydrogeologiska förhållanden. Grundvattenmagasinet består av sedimentära avlagringar av smältvattensand varvat med andra smältvattenavlagringar och moränlera. Det finns ett nedre grundvattenmagasin som inte förväntas påverkas av deponin. Detta baseras på närvaron av mäktiga och täckande lågpermeabla lerlager mellan de två magasinen. Strömningen i det sekundära grundvattenmagasinet är riktad mot Stora Bält. Det förutsätts att det övre grundvattenmagasinet sträcker sig homogent från deponin till recipienten Stora Bält.

4.2.4 Modellberäkningar

Det har utförts modellberäkningar för ett antal tungmetaller (8 st.) och ett antal organiska föreningar (ca 40 st.). En beräkning har utförts omedelbart vid källan och en beräkning vid utloppet vid slutrecipienten.

4.2.4.1 MODELLERING VID KÄLLAN

Den källnära utspädningsmodellen tar inte hänsyn till adsorption, dispersion, nedbrytning eller utspädande effekter. Det antas att det infiltrerande och perkolerande vattnet blandas i de översta 0.25 m av grundvattenmagasinet och den resulterande koncentrationen bestäms enligt en enkel utspädningsekvation, se Ekv. 1 i Bilaga 3. Denna ekvation används i verkligheten för att bestämma den maximala koncentrationen på infiltrationen ut från gränsvärden för maximalt innehåll av det aktuella ämnet i grundvattnet. Denna koncentration omräknas efterföljande till ett maximalt innehåll av fast ämne i den deponerade jorden utifrån genomförda urlakande tester. Detta kan således direkt användas som deponeringskriterium för jord.

4.2.4.2 MODELLERING VID RECIPIENTEN

Längre bort från källan, vid recipienten, beräknas den resulterande koncentrationen av föroreningsskomponenter till följd av utspädning i grundvattenmagasinet. Voly-men grundvatten, där det perkolerande vattnet späds ut, beräknas genom att bestämma ett teoretiskt uppblandningsdjup på grund av dispersionseffekter. Beräkningen baseras på en grundvattentransport på 1 år eller maximalt 100 m, men används här för ett avstånd på 1500 m. Den resulterande koncentrationen beräknas enligt ekvation 2 redovisad i Bilaga 3.

Om det tas hänsyn till utspädning kommer den resulterande koncentrationen att spädas ut med det infiltrerande vattnet i området nedströms deponin enligt ekvation 3 redovisad i Bilaga 3. Effekten av adsorption och nedbrytning på den resulterande koncentration, har likaså inkluderats. Detta har skett genom att dels bedöma transporthastigheten under hänsynstagande till adsorption och därefter utföra en beräkning av nedbrytningen, där halveringstiden är bestämd, se ekvation 4, Bilaga 3.

4.2.4.3 NUMERISK MODELL

I beräkningarna ovan produceras kritiska värden för ett antal organiska föreningar gällande maximal koncentration av ett ämne i förhållande till standarden för gällande jordart. Det har därför utförts en beräkning med användning av en två-dimensionell numerisk strömnings- och transportmodell (MIKE SHE) för utvalda kritiska ämnen. Modellen antar inte homogena förhållanden för K_d -värden (se kapitel 3.1) och använder uppmätta koncentrationer för de utvalda kritiska ämnena.

4.2.5 Resultat

Resultaten är presenterade som tillåtna koncentrationer av källstyrkan och tillåtna koncentrationer av metallerna (inte utspädda). Beräkningarna har genomförts för olika antaganden omkring pH och omkring olika typer av övertäckning av deponin.

För metallerna i undersökningen fås ett resultat som visas i Tabell 4-1. Som det framgår här är det mycket stor spridning mellan min- och maxvärden.

Tabell 4-1 Tillåtna koncentrationer av undersökta metaller vid källnära modellering och modellering vid recipient (inklusive utspädning).

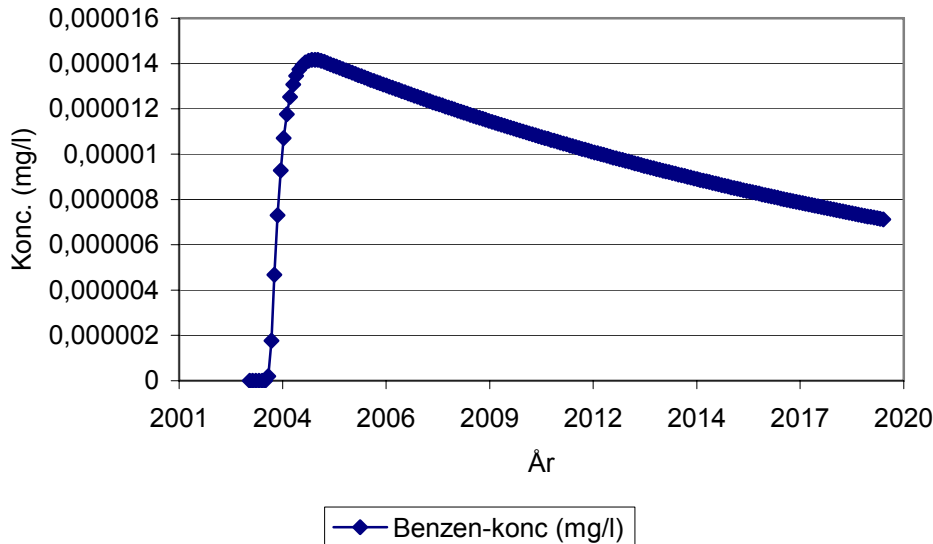
Ämne	Källnära modellering [mg/kg]	Modellering vid recipient [mg/kg]
As, Arsenik	3,2-28	8,5-76
Cd, Kadmium	13-41	35-110
Cr, Krom	11	28
Cu, Koppar	7,7-57	19-140
Pb, Bly	82-135	220-340
Zn, Zink	13-420	34-1100

För de organiska ämnena som är inkluderade i undersökningen har det utförts en beräkning av den resulterande koncentrationen vid recipienten utifrån antaganden kring innehållet av olika ämnen i den deponerade jorden (niveau 1 jord, Miljöstyrelsen, 1998). För de ämnen som överskrider gränsvärdena i grundvatten har det beräknats en maximal tillåten koncentration för infiltrerande vatten som återigen är omräknad till en koncentration (inte utspädd) hos den deponerade jorden. För de kritiska ämnena presenteras resultaten i Tabell 4-2.

Tabell 4-2 Tillåtna koncentrationer av utvalda organiska föreningar vid källnära modellering och modellering vid recipient (inklusive utspädning).

Ämne	Källnära modellering [mg/kg]	Modellering vid recipient [mg/kg]
Triklöretylen	0,04	0,1
Tetrakloretylen	0,04	0,1
Tetraklormetan	0,04	0,1
Kloroform	0,04	0,1
Klorbensen	0,004	0,01

Resultaten från de numeriska modellberäkningarna presenteras som genombrottskurvor för de utvalda ämnena i ett avstånd på 100 m nedströms deponin.



Figur 4-1 Genombrottskurva för bensen 100 meter nedströms deponin. Kriteriet för grundvattenkvalitet för bensen är 0,001 mg/l, och överskrids därmed inte.

4.2.6 Slutsatser

Det har utförts en riskbedömning i anslutning till anläggningen av en soptipp för att ta emot förorenad jord. Bedömningen har omfattat nästan 50 ämnen, både tungmetaller och organiska föreningar, och har inkluderat ett källnära område (grundvatten) och en recipient (havet).

Baserat på ett relativt magert dataunderlag har det utförts en beräkning av tillåtna koncentrationer i den jord, som skall deponeras. Det har för de utvalda ämnen även utförts en beräkning av strömnings- och transportförhållanden för att bestämma genombrottskoncentrationer för kritiska ämnen i en referenspunkt 100 m nedströms deponin.

Metoden är snabb och enkel och ger omedelbart de svar som kan läggas till grund för ett godkännande av jord som skall deponeras. Modellberäkningarna är dock relativt enkla och vissa antaganden är tvivelaktiga. Flera förhållanden kunde med stor fördel ha undersökts närmare med mer avancerade metoder. Det magra dataunderlaget begränsar dock på många sätt en mer avancerad metodik. Förutsättningarna gällande stationära förhållanden och homogenitet är ytterst tvivelaktiga. För det första är heterogeniteten i grundvattenmagasinet av ganska stor betydelse, både vad gäller mäktighet, hydrauliska egenskaper, dispersivitet och hydraulisk gradient. För det andra så är infiltrationen, gradienten och andra randförhållanden naturligtvis inte stationära. Bristen på information kring dessa förhållanden beroende på ett mycket sparsamt mätprogram gör det svårt att ändra antagandena. En fördel hade därför varit om dataunderlaget hade utökats med användning av geofysik kombinerat med ett antal brunnar för att undersöka tjockleken och utsträckningen på det övre grundvattenmagasinet. Detta hade inneburit att man skulle kun-

na tillämpa en dynamisk två- eller tredimensionell grundvattenmodell för beräkning av mer nyanserade flödes- och transportförhållanden. Detta kombinerat med beräkning av infiltrationens variation över ett eller flera år över området, skulle ge en bättre bild gällande utspädning i det övre grundvattenmagasinet. Detta är bara ett urval gällande möjliga förbättringar, se vidare i Bilaga 3.

4.3 Slutförvar av kärnbränsle

4.3.1 Bakgrund

Kärnavfall i Sverige hanteras av Svensk Kärnbränslehantering AB, SKB. Inom SKB's program för förvaltning av använt kärnbränsle, finns ett koncept gällande den slutliga förvaringen, där använt kärnbränsle kommer att placeras i en gjutjärnsinsats inuti kopparkapslar. Dessa deponeras sedan i ett slutförvar i mättat granitiskt berg och på ett ungefärligt djup av 500 m. Kapslarna omsluts slutligen av bentonitlera. Denna metodik benämns som KBS-3-metoden (SKB, september 2004).

Principiellt återstår två uppgifter i SKB's program. Dessa är lokaliserar, bygga och att driva i) det djupa slutförvaret (kan även benämnas djupförvar) och ii) en inkapslingsanläggning, där det använda kärnbränslet placeras i kapslar för deponering i djupförvaret. SKB ägnar sig för närvarande åt mark/platsundersökningar för ett möjligt djupförvar i kommunerna Östhammar (Forsmark) eller Oskarshamn, förutsatt att berggrunden och andra relevanta förhållanden anses vara lämpliga. En ansökan om att bygga ett djupförvar kommer, enligt nuvarande tidsplan, att göras i slutet av år 2008 (SKB, september 2004).

När SKB söker tillstånd för att få bygga inkapslingsanläggningen och djupförvaret kommer det att krävas en analys med uppgift att utreda den långsiktiga säkerheten för djupförvaret (SKB, september 2004). SKB:s senaste säkerhetsanalys kallas SR-97 och publicerades 1999. Nästa säkerhetsanalys SR-Can, som är i fokus i denna rapport, kommer att vara en del av underlaget till ansökan om att få bygga inkapslingsanläggningen. Målet med SR-Can är att visa att de kopparkapslar som ska förslutas i inkapslingsanläggningen kan ge ett djupförvar som uppfyller myndigheternas krav på säkerhet. SR-Can är alltså en analys av djupförvarets säkerhet – inte av säkerheten i inkapslingsanläggningen (www.skb.se).

Den metodik som tillämpas i denna säkerhetsanalys kan i korthet sägas bestå av att försöka besvara ett antal frågor gällande vilka förändringar förvaret kan tänkas genomgå med tiden, till följd av inre processer eller yttre påverkan. Vilka konsekvenser får dessa förändringar för säkerheten? Utgångspunkten i säkerhetsanalysen blir att noggrant beskriva hur djupförvaret för använt kärnbränsle ser ut när det har byggts och förslutits. Därefter kommer förhållandena i förvaret att förändras. Många förlopp är oundvikliga och vissa har samband med hur grundvattnet strömmar. Förändringar i klimatet kan här ha stor betydelse. Alla dessa frågeställningar är möjliga scenarier som tillsammans ska ge en rimlig bild av vad som kan tänkas inträffa i framtiden och vilka konsekvenserna blir för förvaret. Komplexiteten ökas dessutom av att många processer och händelseförlopp är sammankopplade, vilket leder till att matematiska modeller blir ett ovärderligt verktyg i beskrivningen av förvaret idag och tänkbara scenarier i framtiden, där värsta möjliga fall får sätta gränsen gällande utformningen av kapsel och säkerhetsbuffert samt till att välja den lämpligaste berggrunden (www.skb.se).

4.3.2 Metodik

Det första skedet i SR-Can-projektet är att demonstrera den metodik som kommer att tillämpas i förberedelse för den planerade ansökan för inkapslingsanläggningen. Metodiken innefattar användandet av både CPM-modeller (continuum porous medium) och DFN-modeller (discrete fracture network) i olika skalor för att undersöka grundvattenflödet och transporten av radioaktiva isotoper från ett djupförvar till biosfären. Modelleringen måste ta hänsyn effekterna av en variabel grundvattendensitet och dynamiska förlopp (transienter). Nyckelresultat från modelleringen kommer att vara grundvattenflöde, flödesvägar och värden för parametrar som beskriver transporten av de radioaktiva isotoperna längs flödesvägarna. Slutligen kommer resultaten från grundvattenmodelleringen att ingå i beräkningar av de radiologiska riskerna för mänskligheten.

För att demonstrera den föreslagna metodiken har en serie kopplade/nästlade modeller etablerats med Serco Assurances's CONNECTFLOW (SKB, september 2004). CONNECTFLOW är ett verktyg för modellering av grundvattenflöde och transport genom porösa och spruckna media (www.sercoassurance.com/ea/groundwater/conflow.htm).

Modellerna har etablerats på tre olika skalor:

- en regional (~10 km) CPM-modell med deterministiska storskaliga sprickzoner och hydrogeologiska egenskaper enligt den pågående Forsmark version 1.1. Syftet med denna modell är att studera transienter och förse modeller på mindre skala med randförhållanden
- en lokal (~1 km) DFN-modell nästlad inom den regionala CPM-modellen ovan för att beräkna långväga transportvägar, men även för att fånga de detaljerade transportvägarna omedelbart runt djupförvaret
- en CPM-modell för deponeringsschakt, EDZ (engineered damage zone) och deponeringstunnlar nästlad inom en DFN-modell i kapselskala (10-100 m). Denna modell används för att utföra detaljerade beräkningar av grundvattenflöde närliggande till kapslar och EDZ.

Projektets fokus har varit att illustrera och testa metodiken för geosfären för perioden efter förslutning (d.v.s. mellan nutid och 10 000 år efter nutid) i syfte att göra en riskbedömning (SKB, september 2004).

4.3.3 Indata

Indata som har använts i denna exemplifiering kommer från Forsmark i Östhammars kommun och benämns som Forsmark version 1.1. Dessa data är preliminära och platsen undersöks för närvarande av SKB som en av kandidatplatserna för ett KBS-3-förvar. Ännu är dock inte dataunderlaget tillräckligt för att tillåta en säkerhetsbedömning av Forsmark (SKB, september 2004).

Utifrån dessa sprickdata har det i Forsmark version 1.1 etablerats en konceptuell modell med beskrivning av sprickegenskaper. Datatolkningen som ligger bakom denna modell är primärt baserad på data från ett borrhål, KFM01A, vilket förklarar tonvikten på metodik och inte på ett platsspecifikt koncept. Tanken är alltså att använda data från Forsmark version 1.1 som en illustration av den före-

slagna metodiken och att genomföra en fullständig studie ledande till beräkningar för säkerhetsbedömning (SKB, september 2004).

Den konceptuella modellen beskriver en hierarki av sprickor på olika skalor. Hänsyn har tagits till tillämpbarhet för både modellering av grundvattenflöde och transport vid de olika skalorna för att ge en tillräcklig representation av nyckelresultat (SKB, september 2004).

4.3.4 Modellberäkningar

Det övergripande syftet är att etablera en regional CPM-modell med en nästlad DFN-modell kring djupförvaret för att bedöma transportvägar vid ett flertal tidpunkter i ett transient flödesfält. Perioden efter förvarets förslutning är av intresse, vilket motsvarar år 2000-12000. Modellsimuleringar har utförts för denna period (SKB, september 2004).

4.3.4.1 REGIONAL CPM-MODELL

Angreppssättet har varit att med CONNECTFLOW etablera en regional CPM-modell. För att parametersätta CPM-modellen med den tillgängliga sprickdatan i Forsmark version 1.1, etablerades även en regional DFN-modell med stokastiskt genererade sprickor och identifierad deterministisk karakteristik. Den regionala DFN-modellen har endast till syfte att uppskalera permeabiliteten för användning i den regionala CPM-modellen (SKB, september 2004).

Modellområdets laterala gränser sammanfaller med olika hydrologiska strukturer. Det antas att de strukturer som används som laterala gränser även kan tillämpas som gräns för grundvattenflöde och att de är impermeabla. Modellen sträcker sig ner till ett djup på 2300 m och lagerföljden följer topografin ner till ett djup på 400 m. Därefter är lagerföljden horisontell. Sprickzonerna når ner till ett djup på 2100 m. Längs modellens botten råder impermeabla förhållanden med en specificerad salinitet. Inget grundvatten kan strömma genom denna rand, men salinitet kan passera genom diffusion. Två olika randförhållanden har använts för modellens övre kant, en för regioner under havsnivå och en för landområden. Observera dock att randförhållandet här varierar med kustlinjens migration. Beräkningselementen är i huvudsak 100x100x100 m. (SKB, september 2004).

Efter att ha definierat de drivande krafterna bakom grundvattenflödet har modellberäkningar för grundvattenflöde utförts vid ett antal representativa tidpunkter. Därefter har det utförts transportberäkningar d.v.s. partikelspårningar i CPM-modellen. För att demonstrera metodiken har 604 platser för kapselförvaring använts som startpunkter vid utsläpp av partiklar. Partikelspårningen utfördes med ett strömningsfält beräknat för år 2500 samt för år 12000 (SKB, september 2004).

4.3.4.2 NÄSTLAD CPM/DFN-MODELL

För att förbättra representationen av flöde och transport i den omedelbara regionen som omger djupförvaret, har en del av den regionala CPM-modellen ersatts med en lokal DFN-modell. DFN-modellen täcker ett område på 3800x5200x1000 m som inkluderar hela djupförvaret och regionala sprickor med en längd på 1000 m ner till 50 m. Lokala sprickor med en längd mellan 50 m och 12.5 m har inkluderats i ett

60 m tjockt lager runt djupförvaret. Djupförvarets tunnelsystem har i DFN-modellen beskrivits som vertikala sprickor. Inom DFN-modellen har det dessutom i ett begränsat område nära tunnlarna gjorts en förfinad sprickspecifikation för att förbättra representationen av den lokala partikeltransporten. Genom denna förbättring kan partiklar spåras genom småskaliga sprickor till intermediära sprick-system och storskaliga sprickor, in i de deterministiska sprickorna och slutligen in och genom CPM-modellen (SKB, september 2004).

Kvasistationärt flödestillstånd beräknas i den nästlade CPM/DFN-modellen med användandet av en salinitetsfördelning interpolerad från en fullt transient CPM-modell (tidigare etablerad i projekt utanför SR-Can) vid ett antal olika tidpunkter, år 2500 och år 12000 (SKB, september 2004).

4.3.4.3 NÄSTLAD DFN/CPM-MODELL PÅ KAPSELSKALA

Syftet här är att konstruera en DFN-modell på kapselskala nästlad med en CPM-representation av tunnlar, deponeringshål och EDZ. För att demonstrera metodiken har DFN-modellen begränsats till en del av djupförvaret som innefattar 604 kapslar och 14 tunnlar. Bentonitleran och kapslarna är inte tydligt representerade. Istället tillämpas en låg konduktivitet vid dessa element. Modellen har en mäktighet på 100 m och täcker ett område motsvarande 590x410 m (SKB, september 2004).

CONNECTFLOW-modellen består av en CPM-modell som beskriver djupförvarets struktur inom en DFN-modell med sprickor ner till en längd på 3.5 m som skär kapslarna. Alla sprickor med en längd längre än 12.5 m har importerats från tidigare DFN-modeller. Extra sprickor med en längd mellan 3.5 m och 12.5 m har inkluderats i ett 60 m tjockt lager mellan $z=-370$ och $z=-430$, vilket skapar överensstämmelse med modellerna på större skala. Väldigt få kapslar är helt isolerade ifrån spricksystemet (SKB, september 2004).

Det översiktliga syftet för nästa fas av SR-Can är att ta fram en metod som möjliggör hänsynstagande åt alla 5026 kapslar i djupförvaret (SKB, september 2004).

Modellen har använts för att beräkna grundvattenflöde vid olika tidpunkter. Modelleringen är baserad på stationära beräkningar, men randförhållanden överförda från den regionala CPM-modellen (transient) vid lämpliga tidpunkter (SKB, september 2004).

Efter beräkningarna av grundvattenflöde har partikelspårningar genom kapselmodellen utförts. Totalt har 604 partiklar frisläppts, en för vardera kapsel. Partiklarna har spårats genom modellen till randen utifrån ett strömningsfält beräknat för år 2500 samt år 12000. Partikelspårningen har sedan i den regionala modellen omstartats. Partiklarna har då haft den position de hade då de lämnade kapselmodellen. Härifrån har de sedan spårats genom den regionala modellen (SKB, september 2004).

4.3.5 Resultat

Den föreslagna metodiken föreställer sig användandet av modeller på olika skalor för att undersöka grundvattenflödet och transporten av radioaktiva isotoper från ett djupförvar till biosfären. Modelleringen tar hänsyn till effekterna av en variabel

grundvattendensitet och av förändringar i klimathållande under perioden år 2000-12000 efter förslutning av djupförvaret. Resultaten från partikelspårningarna pekar generellt på att de större, högpermeabla och deterministiska sprickzonerna har stor påverkan på fördelningen av partiklarnas spridning och att de kan fungera som en rutt ut ur modellen. Detta är oberoende av modelltyp och tillämpad skala och gemensamt för all modellering. Därutöver är det naturligtvis skillnader i partikeltransporten och de olika skalorna reflekterar naturligtvis en varierande detaljgrad i resultaten.

4.3.6 Slutsatser

Metodikerna som har sammanfattats här inkluderar den kompletta modellkedjan från sprickdata, analys och etablering av konceptuell sprickmodell, etablering av modell för regional hydrologi till användandet av detaljerade nästlade modeller för att beräkna riskerna på olika skalor. Detta krävs av en säkerhetsbedömning. Metodiken har visat sig vara hanterbar och producerar realistiska och detaljerade fördelningar av risker. Ett antal scenarier har beaktats vilket demonstrerar styrka och flexibilitet i metodiken (SKB, september 2004).

Projektets fokus har varit att illustrera och testa metodiken som beskrivs ovan och man har under arbetets gång tvingats till vissa approximeringar. Ett centralt tema i all metodik gällande riskbedömningar är hantering av olika typer av osäkerheter. Viktigt är att tydliggöra vad man inte vet, att visa hur brister eller approximeringar i dataunderlaget har hanterats och vad de betyder för säkerheten. Den testade metodiken visar ett hanterbart sätt att fördjupa sig i dessa osäkerheter och deras innebörd, vilket kan användas för att skapa säkerhetsmarginaler.

5 Kvalitetssäkring och dokumentation vid modellering

Detta kapitel beskriver hur modellarbete bör dokumenteras och kvalitetssäkras. Genom att vara införstådd med detta, tydliggörs även de krav som ställs vid användning av modeller vid en riskbedömning. Likaså behovet av att kunna kvantifiera osäkerheter i modellarbetet, som slutligen reflekteras i modellresultaten.

5.1 Introduktion

I anslutning till ett modellarbete skall det utarbetas en rapport som beskriver såväl modelleringsmetodiken som resultaten. Modellrapporten skall klart dokumentera omfånget på den nuvarande systemförståelsen, kalibrerings- och valideringsresultaten, samt betydelsen av osäkerheter gällande indata, parametrar, processer och den konceptuella modellen.

Dokumentationen är speciellt betydelsefull för konceptualisering, kalibrering och simulering, men också i anslutning till senare förfining eller uppdatering av modellen. Det är viktigt att rapporteringen vid dessa milstolpar beskriver begränsningar i modellen och påpekar möjliga lösningar.

Sammanfattningsvis skall dokumentationen vara tillräckligt utförlig så att man vid ett senare tillfälle kan sätta sig in i modellarbetet och den fackmässiga grunden gällande modellresultaten och därefter vidareutveckla modellen och utföra nya beräkningar.

5.2 Upplägg för en modellrapport

En modellrapport skall innehålla följande (Henriksen et al., 1998; Middlemis, 2000; Harrar och Henriksen, 1996; Laase et al., 2000):

Rapporttitel	Välj en titel som klart och tydligt förmedlar projektet, syftet och modellresultaten.
Innehållsförteckning	Innehållsförteckningen skall vara standardiserad.
Kapitel 1 – Sammanfattning	Innehåller: En summering av modellens etablering, scenarier och resultat. En kort beskrivning av hur modellen har utvecklats och dess detaljgrad. En sammanfattning av osäkerheter och begränsningar i modellen och förslag på framtida lösningar av dessa problem.
Kapitel 2 – Introduktion	Innehåller beskrivning av syfte/mål med projektet, modellen och krav på modellnoggrannhet i specifika och kvantifierbara storlekar. Introduktion till modellområdet och tidigare undersökningar utförda i området, samt beskrivning av vattenresursaspekter som sätts i fokus i området. Innehåller även figur som visar modellområdets utbredning.
Kapitel 3 – Teknisk metodik	Här ges en beskrivning av modellanvändningen och den metodik som används. Om en integrerad hydrologisk modell tillämpas, beskrivs behovet av olika indata samt utdata. Motivering ges kring varför olika delar i den hydrologiska cykeln har valts att inkluderas respektive exkluderas i modelleringen. Beskrivning av eventuell parameterestimering, optimering, Monte Carlo metodik etc. Motivering ges kring valet av modell(er) och beräkningskoder. Förklaring ges till val och arbete med enkel konceptuell modell eller alternativa modeller.
Kapitel 4 – Dataanalys, geologisk karakteristik, etablering av hydrogeologisk modell	Innehåller detaljerad information kring den hydrologiska tolkningsmodellen och tillhörande hydrauliska parametrar för vattenförande och lågpermeabla lager inklusive uppskattningar av vattenbalansförhållanden. Kapitlet struktureras i följande avsnitt med stor vikt på visuell presentation i figurer: <u>4.1 Geologisk modell:</u> (a) regional geologi (b) stratigrafi (c) speciella heterogenitetsförhållanden med vikt på sprickor och sandfickor till följd av glacialtektonisk variabilitet och tektoniska förhållanden, förkastningar i kalksten etc. (d) analyser på bakgrund av detaljerade karteringar med hjälp av geofysik, borrhöggar, seismik eller georadar. Presentation av geologisk modell i tre dimensioner med hjälp av geologiska profiler, tolkade geologiska lagergränser, utbredning, över och underkant av linser, översiktskarta med brunnar etc.

4.2 Grundvattensystemet:

- (a) antaganden gällande reservoarförhållanden, heterogenitet och presentation av vald hydrostratigrafisk modell. Varje lager beskrivs inklusive hydraulisk konduktivitet m.m. För varje lager skapas en karta som beskriver mäktighet.
- (b) eventuella detaljer i den konceptuella modellen.

4.3 Hydrologiska avgränsningar:

- (a) randförhållanden i form av modellyta, dränering och vattendrag beskrivs.
- (b) yttre randförhållanden längs modellgränsen beskrivs.
- (c) definition av modellbotten.

4.4 Hydrologiska storlekar:

- (a) parametrar för hydrauliska egenskaper (vertikal och horisontell konduktivitet) för de olika geologiska typerna beskrivs baserat på provpumpningar, slug-tests eller erfarenhetsvärden från andra områden.
- (b) magasinskoefficienter och -tal beskrivs.
- (c) läckagekoefficienter för utväxling av vatten mellan grundvatten och vattendrag/sjöar beskrivs.

4.5 In- och utströmning/vattenbalans:

- (a) tidsmässig och rumslig variation i nederbörd och avdunstning inom modellområdet beskrivs.
- (b) tidsmässig och rumslig variation i utströmningförhållande inom modellområdet beskrivs.
- (c) beskrivning av nettonederbördens tidsmässiga och rumsliga variation och antaganden gällande fördelning av nettonederbörden mellan grundvatten och ytvatten, eventuellt "bypass-flow" etc.
- (d) övriga källor till grundvattenbildning i området, t.ex. infiltrationsanläggningar m.m.
- (e) vattenutvinning till vattenförsörjning, bevattning och industri i området.
- (f) grundvattenströmning till vattendrag och interaktionen mellan ytvatten och grundvatten.
- (g) förhållande gällande grundvattenpotential och tidsmässiga variationer i trycknivå utifrån uppmätta nivåer.
- (h) vattenbalans för modellområdet.

4.6 Vattenkvalitetsförhållanden:

- (a) beskrivning av naturliga vattenkvalitetsförhållanden i utvalda profiler.

4.7 Åldersdateringar:

- (a) beskrivning av ålder utifrån spårämnesanalyser.

Kapitel 5 –
Arbetsplan

- Plan för hantering av vattendrag och sjöar, omättad zon, densitetsförhållanden i modellen.
- Skiss gällande avgränsning av modellområde och diskretisering av mättad zon; horisontellt och vertikalt.
- Förslag till simuleringsperiod och diskretisering i tid.
- Plan för kalibrerings- och valideringsmetodik.
- Plan för osäkerhets- och känslighetsanalyser.
- Tidsplan, milstolpar och externa utvärderingar.
- Val av modellkod och verktyg för databearbetning.

Kapitel 6 –
Modelletablering

Innehåller beskrivning av modellområde, diskretisering, hydrauliska parametrar, in- och utdata till vattenbalansen, randförhållanden och val av kalibreringsmål/noggrannhetskrav.

6.1 Avgränsning av modellområde:

Beskrivning av UTM-kordinater för modellområdet och horisontell och vertikal diskretisering av beräkningslager.

6.2 Randförhållanden:

Yttre randförhållanden presenteras och förklaras i figur. Inre randförhållanden beskrivs och presenteras i figur.

6.3 Zonering av hydrauliska egenskaper:

Motivera zoneringsmed bakgrund på geologi eller provpumpningsresultat och visa fördelningar grafiskt. Presentera konstanta värden i tabellform. Ange ett ursprungligt värde och en realistisk variation för varje modellparameter som förväntas ingå i kalibreringen.

6.4 Zonering av grundvattenbildning:

Presentera den använda zoneringsmed gällande grundvattenbildning. Ange ett startvärde och realistiska variationer för vardera zon utifrån en analys av dataunderlaget.

6.5 Presentation av eventuellt alternativa konceptuella modeller:

Om det har valts att arbeta med flera modeller.

6.6 Numeriska parametrar:

Beskriv de använda konvergenskriterierna, tidsstegen och övriga numeriska parametrar som ingår i den använda modellkoden.

Kapitel 7 –
Kalibrering

Innehåller beskrivning av kvantitativa kalibreringsmål, kvalitativa mål och resultat från kalibrering och känslighetsanalyser.

7.1 Beskrivning av använd kalibreringsmetodik och använda kvantitativa och kvalitativa kriterier:

Statistiska krav på residualavvikelse i förhållande till trycknivå, flöde och kvalitativa krav på värdering i förhållande till potentialkartor, flödehydrografer och vattenkvalitetsdata. Användning av "trial-and-error"-metod, inverterad metodik, känslighetsanalyser m.m.

7.2 Kalibreringsmål:

Presentera en lista på de måldata som använts vid kalibrering och de data som planeras att användas vid valideringen. UTM-kordinater, beräkningslager eller z-nivå anges för samtliga uppmätta trycknivåer.

7.3 Kalibreringsjournal:

En beskrivning utförs i tabellform av de utvalda beräkningar där väsentliga förändringar har gjorts utifrån den konceptuella modellen eller zonering av parametervärden.

7.4 Kalibreringsresultat:

Kalibreringsresultat presenteras i form av:

- (a) vattenbalans, inklusive tidsserier för utvalda komponenter och årliga massbalanser för modellen som helhet och enskilda modellager.
- (b) massbalansfel (numerisk lösning, konvergenskriterium).
- (c) presentation av residualvärden för trycknivå och flöden och kalibreringsresultat i förhållande till statistiska mål.
- (d) jämförelse mellan beräknad och uppmätt trycknivå.
- (e) jämförelse mellan beräknat och uppmätt utbyte mellan grundvatten och ytvatten.

7.5 Resultat från känslighetsanalyser och inverterad modellering:

Beskrivning av de kalibrerade parametrarna i tabellform. Ange de mest känsliga parametrarna. Ange vilka parametrar som har inkluderats i en inverterad kalibrering och resultaten därifrån med hänsyn till uppskattade variationsintervall, uppskattade 95%-iga konfidensgränser, resultat från korrelationsmatriser m.m.

Kapitel 8 – Validering

Ange metod och resultat från modellvalidering utifrån "split-sample"-test, "proxy-basin"-test eller "differential split-sample"-test.

8.1 Valideringsmetod:

(stationär och dynamisk modell)

8.2 Kvantitativ bedömning av valideringstesten:

Presentation av statistiska kalibreringsmål för valideringsdata jämfört med kalibreringsresultatet med bakgrund av valideringsmål och analys av residualvärden.

8.3 Semi-kvantitativ/kvalitativ värdering av valideringen:

Presentation av tidsserier för valideringsperioden (beräknad och uppmätt flöde och tryck) samt kartor över beräknade och uppmätta tryck med hänsyn till kvalitativa värderingar av valideringsresultatet.

8.4 Alternativa parametrar:

Resultat gällande vattenkvalitet, åldersdateringar och eventuell föroreningsspridning från punktkällor jämförs med beräknad ålderfördelning och föroreningutbredning.

8.5 Jämförelse i förhållande till tidigare modeller för området:

Om det finns andra modeller i området kan det eventuellt utföras en jämförelse mellan resultat, förutsatt att båda modellerna är välkalibrerade och validerade.

Kapitel 9 – Begränsningar i modellen

Osäkerheter och svagheter i modellen i förhållande till den konceptuella modellen, diskretisering, erfarenheter från modellkalibrering, validering och beräkningar sammanfattas och förslag på lösningar beskrivs med hänsyn till såväl datainsamling som framtida modellutveckling.

Kapitel 10 – Modellberäkningar inklusive osäkerhetsanalyser

Resultat från de utvalda beräkningsscenarierna beskrivs i förhållande till det valda referensscenariet. Värdering av osäkerheter på beräkningresultaten.

10.1 Presentation av referensberäkning:

Trycknivå, strömningsförhållande, nettonederbörd, grundvattenbildning till olika magasin och vattenbalansförhållande presenteras genom kartor och tidsserier. Presentation av ändringar i övriga simuleringsscenarioer visas eventuellt i form av avvikelser från referensfallet.

10.2 Beräkningsscenarier:

Presenteras i tabellform och i figurer. Bearbetade tidsserier för användning i scenariberäkningarna presenteras.

10.3 Resultat från beräkningsscenarier:

Grundvattenbildning presenteras utifrån stationära och/eller transienta beräkningar i form av ackumulativa sannolikhetsfördelningar för modellområdet som helhet eller kartor som visar sannolikheter på 0.1, 0.5 och 0.9, på så sätt att osäkerheter gällande indata och parametervärden byggs in i resultaten.

Kapitel 11 – Slutsatser och rekommendationer	Resultaten från modellarbetet sammanfattas. Rekommendationer gällande scenarier och andra resultat från modellarbetet beskrivs.
Kapitel 12 – Referenser	Det utarbetas en referenslista med relevant litteratur.
Bilagor	Så mycket som möjligt av den detaljerade informationen presenteras i bilagor, förutsatt att rapportens läsbarhet förblir tillräckligt god.
Rapporttitel	Välj en titel som klart och tydligt förmedlar projektet, syftet och modellresultaten.
Innehållsförteckning	Innehållsförteckningen skall vara standardiserad.

6 Referenser

- Abbott, M.B., Bathurst, J.C., Cunge, J.A., O'Connell, P.E., and Rasmussen, J., 1986: *An introduction to the European Hydrological System - Système Hydrologique Européen*, SHE, 2: Structure of a physically-based, distributed modeling system. *J. Hydrol.*, 87, 61-77.
- Appelo, C.A.J, Postma, D., 1996. *Geochemistry, groundwater and pollution*. A.A. Balkema, Rotterdam, Holland.
- Bear, J. and A. Verruijt, 1987: *Modeling Groundwater Flow and Transport*. D. Reidel Pub. Com., Dordrecht, Holland.
- Bioteknisk Jordrens, 2000. Vig Specialdepot. *Risikovurdering af de miljømæssige konsekvenser for vandmiljøet*. Rapport udarbejdet af DHI – Institut for Vand og Miljø.
- Boesten, J.J.T.I. & van der Linden, A.M.A., 1991. *Modelling the influence of sorption and transformation on pesticide leaching and persistence*. *J. Environ. Qual.*, 20, 425-435.
- Burnett, R.D. and E.O. Frind, 1987: *Simulation of contaminant transport in three dimensions*. 2. Dimensionality Effects. *Water Resour. Res.*, 23(4), 695-705.
- Camp Dresser and McKee, 2001. *Evaluation of Integrated Surface Water and Groundwater modeling tools*. CDM Inc. Water Resources Research and Development Program, February 2001. (<http://www.dhisoftware.com/mikeshe/Reviews>)
- DHI Software, 2003. *MIKE SHE Users Guide*. DHI Water and Environment, DK-2970 Hørsholm, Denmark.
- ESI, 2004. *Command reference for Groundwater Vistas*, version 4. Environmental Simulations, Inc., Reynolds, PA 17569, USA.
- Freeze, R.A., Cherry, J.A., 1979: *Groundwater*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J.
- Harrar, W.G. och Henriksen, H.J., 1996. *Groundwater model for Sneum-Bramming-Holsted å. Aquifer System: setup and calibration*. Rekvirent Esbjerg kommune, forsyningsvirksomhederne och Ribe amtskommune. Mars 1996.
- Henriksen, H.J., Troldborg, L.T., Knudby, C.J., Dahl, M., Nygaard, P., Jakobsen, P.R. och Rasmussen, P., 1998. *National Vandressource Model*. Sjælland, Lolland, Falster och Møn. GEUS rapport 1998/109. www.vandmodel.dk
- Hill MC, 1998. *Methods and guidelines for effective model calibration*. US Geological Survey, Water Resources Investigations Report 98-4005.
- Kaiser-Hill, 2001. *Model Code and Scenario Selection Report*. Site-Wide Water Balance Rocky Flats Environmental Technology Site. Kaiser-Hill Company, February, 2001. (<http://www.dhisoftware.com/mikeshe/Reviews>)

- Konikow, L.F. and D.B. Grove, 1977: Derivation of Equations describing Solute Transport in Groundwater, US.G.S. Water Resour. Invest. 77-19.
- Laase, A.D., Rumbaugh, J.O. and Anderman, E.A., 2000. *Design, optimization and evaluation of the Kansas city plant interception system*. Report prepared by Oak Ridge National Laboratory, Grand Junction, Colorado for Environmental Restoration Program at the Kansas City Plant, U.S. Department of Energy. Kansas City, Missouri. Februari 2000.
- Lindberg, J., Olofsson, B., 1997: *Risk för salt grundvatten – en studie med hjälp av GIS över delar av Norrtälje kommun*. Rapport. KTH, Institutionen för Anläggning och Miljö, Avdelningen för Mark och Vattenresurser.
- Maidment, D.R. (editor), 1992: *Handbook of Hydrology*. McGraw-Hill Inc.
- Madsen, H., 2003. *Parameter estimation in distributed hydrological catchment modelling using automatic calibration with multiple objectives*. Adv. in Water Resources 26.
- Middlemis, H., 2000. *Draft groundwater flow modelling guideline*. Murray-Darling Basin Commission. Aquaterra Consulting Pty Ltd. Western Australia. Project No. 125. Juli 2000.
- Miljøstyrelsen, 1998. *Oprydning på forurenede lokaliteter – Hovedbind*. Vejledning fra Miljøstyrelsen (Danmark), no. 6, 1998.
- Miljøstyrelsen, 1998. *Oprydning på forurenede lokaliteter – Appendikser*. Vejledning fra Miljøstyrelsen (Danmark), no. 7, 1998.
- Rubin, Y., 2003. *Applied Stochastic Hydrogeology*. Oxford University Press. (http://www.oup.com/pdf/019513804X_01.pdf)
- Scheidegger, A.E., 1961: General theory of dispersion in porous media. Jour. of Geophys. Research, Vol. 66, no. 10.
- Singh, V.P. (editor), 1995. *Computer Models of Watershed Hydrology*. Water Resources Publications, Colorado, USA.
- SKB, september 2004. *Groundwater flow and radionuclide transport modelling using CONNECTFLOW in support of the SR-Can assessment*. SKB R-04-61
- SKB, augusti 2004. *Interim main report of the safety assessment SR-Can*. SKB Technical Report TR-04-11
- SKB, juni 2003. *Planning report for the safety assessment SR-Can*. Technical Report TR-03-08
- <http://www.skb.se>
- Soilrem, 2003. *Risikovurdering for Vig Specialdepot. Beregning af tilladelige udslip og modelberegninger for depot*. Rapport udarbejdet af DHI – Institut for Vand og Miljø.

Thunvik, R., Sokrut, N., 2002. *ECOFLOW – ett verktyg för integrerad modellering av yt- och grundvatten i avrinningsområden*. Grundvatten nr 1/02.

Waterloo Hydrogeologic, 2004. *Visual MODFLOW Pro reference manual*. Waterloo Hydrogeologic, Inc., Waterloo, Ontario, Canada.

US Army Corps of Engineers and South Florida Water Management District, 2002. Central and South Florida Project. *Comprehensive Everglades Restoration Plan. B2 Hydraulics – Final Model Evaluation Report*. EAA storage reservoirs – Phase 1. (<http://www.dhisoftware.com/mikeshe/Reviews>)

Bilaga 1 – Utvärdering av existerande modellsystem

1 Introduktion

Ett flertal existerande grundvattenmodeller (26 st.) har valts ut genom litteratur- och Internetbaserade studier. Många utvecklare av mjukvara för modellering presenterar sina system för grundvattenmodellering genom hemsidor på Internet. Genom att endast välja kommersiella modellsystem har vi medvetet uteslutit punkt-specifika modeller och modeller som endast är tillgängliga för den lokala utvecklarer. Detta har inneburit att ett flertal modellsystem som nyligen har framtagits eller som är under pågående utveckling på universitet/högskolor även har uteslutits.

2 Metodik

2.1 Urvalskriterier

Ett antal modeller har valts ut för vidare analys ut genom etablering av en matris med fyra urvalskriterier. Användandet av denna matris har möjliggjort en relativt objektiv analys av de modeller som utvärderas. Tabell 1 beskriver utvärderingskriterierna. Modellerna som ingår i en vidare analys har en utvärderingssumma på minst 15 och har ett rankingvärde på minst 3 eller 4.

Tabell 1 Urvalskriterier vid utvärdering av modeller för vidare analys.

Utvärderingskriterier	Ranking			
Beskrivning	1	2	3	4
Tillgänglighet	Ny produkt – okänd för de flesta potentiella användarna	Känd för vissa potentiella användare	Känd för de flesta potentiella användarna	Industristandard
Användarvänlighet	Inget gränssnitt tillgängligt	Grundläggande, inbyggt eller allmänt domänbaserat grafiskt användargränssnitt	Patentskyddat grafiskt användargränssnitt tillgängligt	Omfattande och modernt grafiskt användargränssnitt tillgängligt
Dokumentation och utbildning	Inte tillgänglig	Liten	Måttlig	Omfattande
Möjlighet att simulera miljökonsekvenser under svenska förhållanden	Inte kapabel att simulera grundvattenflöde och transport av reaktiva lösliga ämnen i tre dimensioner	Kapabel att simulera mindre delar av miljökonsekvensproblem under svenska förhållanden	Kapabel att simulera stora delar av miljökonsekvensproblem under svenska förhållanden	Fullt kapabel att simulera miljökonsekvensproblem under svenska förhållanden
Användare / spridning	Platsspecifik modell	Endast ett fåtal användare (mindre än 250)	Fler än 250 användare, men i ett begränsat antal länder	Används över hela världen av mer än 250 användare

2.2 Tillgängliga modeller

Ett stort antal modeller, för simulering av flöde i omättad zon, grundvattenflöde, transport och transport av reaktiva ämnen, finns tillgängliga på marknaden. I nedanstående tabell har de mest använda modellerna listats tillsammans med en beskrivning av deras huvudsakliga egenskaper.

Utvärderingen av modellerna har utförts baserad på information som samlats in från Internet. Viss information har varit svårtillgänglig. Detta har inneburit att man i vissa ifall tvingats till att göra vissa uppskattningar, t.ex. gällande antalet användare av ett visst modellverktyg.

Tabell 2 Lista över tillgängliga modeller samt urvalsmatris.

Namn	Beskrivning	Tillgänglighet	Användarvänlighet	Dokumentation och utbildning	Förmåga att simulera	Användare/spridning	Total summa	Källa/referens
Aquachem	Geokemiska analyser och rapportering av vattenkvalitetsdata från t.ex. förorenade brunnar. Inkluderar olika standardverktyg för framställning av diagram och figurer samt analyser.	3	2	3	1	3	12	Waterloo Hydrogeologic Inc., Canada Groundwater & Environmental Catalog, 2004. www.waterloohydrogeologic.com
WHI Unsat Suite	Kombination mellan fyra olika offentliga områdesmodeller – SESOIL, VLEACH, VS2DT and PESTAN – för analys av endimensionellt flöde och transport genom den omättade zonen.	3	3	4	3	3	16	Waterloo Hydrogeologic Inc., Canada Groundwater & Environmental Catalog, 2004. www.waterloohydrogeologic.com
FEFLOW	Finit elementmodell för simulering av markvatten och transport av lösliga ämnen, inklusive transport av reaktiva ämnen i den omättade och mättade zonen. Varierande densitetstransport och värmetransport kan simuleras.	3	3	4	4	3	17	WASY, GmbH, Germany www.feflow.de
Visual MODFLOW Pro	Ett MODFLOW-baserat modellsystem för simulering av grundvattenflöde och transport av lösliga ämnen inklusive transport av reaktiva ämnen (flera typer) och partikelspårning. Inkluderar MODFLOW, MODPATH, RT3D, MT3DMS och MODFLOW SURFACT.	4	4	4	3	4	19	Waterloo Hydrogeologic Inc., Canada Groundwater & Environmental Catalog, 2004. www.waterloohydrogeologic.com
MODFLOW-SURFACT	Finit differensmodell för simulering av integrerat flöde i omättad och mättad zon och transport av lösliga ämnen inklusive transport av reaktiva ämnen (flera typer) i olika faser och domäner.	3	4	4	4	3	18	Waterloo Hydrogeologic Inc., Canada Groundwater & Environmental Catalog, 2004. www.waterloohydrogeologic.com

HÅLLBAR SANERING
 Rapport 5534 Datormodeller för
 förorenings-spridning fas 1

Namn	Beskrivning	Tillgänglighet	Användarvänlighet	Dokumentation och utbildning	Förmåga att simulera	Användare/spridning	Total summa	Källa/referens
FLOWPATH II	Tvådimensionell grundvattenmodell för simulering av flöde samt partikelspårning för analys av transport av lösliga ämnen, flödesvägar och tillströmningszoner (capture zones).	2	3	3	1	2	11	Waterloo Hydrogeologic Inc., Canada Groundwater & Environmental Catalog, 2004. www.waterloohydrogeologic.com
FRACTRAN	Tvådimensionell, finit elementmodell för simulering av stationärt grundvattenflöde och transport av lösliga ämnen i sprucken media.	2	3	2	2	3	12	Waterloo Hydrogeologic Inc., Canada Groundwater & Environmental Catalog, 2004. www.waterloohydrogeologic.com
FRAC3DVS	Finit elementmodell för simulering av omättat flöde och grundvattenflöde samt transport i porös och sprucken media.	2	2	2	3	2	11	Waterloo Hydrogeologic Inc., Canada Groundwater & Environmental Catalog, 2004. www.waterloohydrogeologic.com
MIKE SHE	Finit differensmodell för simulering av omättat och mättat flöde och transport, inklusive transport av reaktiva ämnen (flera typer) i två domäner.	3	4	3	4	4	18	DHI Water and Environment, Denmark www.dhisoftware.com
Risc Work-Bench	Mjukvara för simulering av transport av lösliga ämnen inklusive riskbedömning. Följer US EPA -standard.	3	3	3	1	3	13	Waterloo Hydrogeologic Inc., Canada Groundwater & Environmental Catalog, 2004. www.waterloohydrogeologic.com
Visual Groundwater	Mjukvara för visualisering av miljödata, t.ex. föroreningsplymer i två och tre dimensioner samt diagram.	3	3	3	1	3	13	Waterloo Hydrogeologic Inc., Canada Groundwater & Environmental Catalog, 2004. www.waterloohydrogeologic.com

HÅLLBAR SANERING
 Rapport 5534 Datormodeller för
 förorenings-spridning fas 1

Namn	Beskrivning	Tillgänglighet	Användarvänlighet	Dokumentation och utbildning	Förmåga att simulera	Användare/spridning	Total summa	Källa/referens
GMS	Ett i princip MODFLOW-baserat modellsystem för simulering av grundvattenflöde och transport av lösliga ämnen inklusive transport av reaktiva ämnen (flertal typer) och partikelspårning. Inkluderar MODFLOW, MODPATH, RT3D, MT3DMS och FEMWATER, SEEP2D, SEAM3D.	4	4	4	4	4	20	Environmental Modeling Systems Inc., USA www.ems-i.com
Groundwater Vistas	Ett MODFLOW-baserat modellsystem för simulering av grundvattenflöde och transport av lösliga ämnen inklusive transport av lösliga ämnen (flertal typer) och partikelspårning. Inkluderar MODFLOW, MODPATH, RT3D, MT3DMS, MODFLOW-SURFACT, PATH3D, SEAWAT och GFLOW.	4	4	4	4	4	20	Environmental Simulations, Inc., USA www.esinternational.com
AQUA3D	Modell för simulering av grundvattenflöde och transport av lösliga ämnen samt värmetransport i ett finit elementnät.	3	2	2	2	3	12	www.scisoftware.com www.vatnaskil.is
SUTRA	Modell för simulering av omättat-mättat grundvattenflöde, transport av lösliga ämnen inklusive variabel densitet, värme och energitransport.	2	2	2	4	2	12	http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware/sutra.html
HST3D	Modell för transportsimulering av värme och lösliga ämnen i tre dimensioner.	2	1	2	2	2	9	http://water.usgs.gov/software/ground_water.html
FEMWATER	Modell för simulering av tredimensionellt grundvattenflöde och transport av lösliga ämnen, inklusive densitetsberoende flöde.	4	4	4	4	2	18	http://www.bossintl.com/html/femwater.html
DYNFLOW	Modell för simulering av tredimensionellt grundvattenflöde.	2	2	2	2	1	9	http://www.dynsystem.com/system/dynflow.html
SHETRAN	Finit differensmodell för simulering av omättat och mättat flöde inklusive partikelspårning i grundvattensystemet.	2	2	2	3	2	11	http://www.staff.ncl.ac.uk/geoff.parkin/SHETRAN_background.html
ECOFLOW	Modell för analys av integrerat yt- och grundvattenflöde.	1	1	1	2	1	6	Thunvik, R., Sokrut, N., 2002

HÅLLBAR SANERING
 Rapport 5534 Datormodeller för
 förorenings-spridning fas 1

Namn	Beskrivning	Tillgänglighet	Användarvänlighet	Dokumentation och utbildning	Förmåga att simulera	Användare/spridning	Total summa	Källa/referens
RiskVariabelmetoden, RV-metoden	Modell för riskbedömning av saltvatteninträngning.	1	1	1	1	1	5	Lindberg, J., Olofsson, B., 1997
Coup-modellen	Endimensionell modell för omättad zon. Två kopplade differentialekvationer för vatten- och värmeflöde.	1	1	1	2	1	6	KTH
DarcyTools	Finit volymkod baserad på stokastiska spricknätverk (DFN – Discrete Fracture Network).	1	1	2	3	1	8	http://www.skb.se/templates/skbiframe___9394.aspx
Connect flow	Finit elementkod för sprickflöde, vilket kan förändras mellan DFN (Discrete Fracture Network) och stokastiska kontinuum.	1	1	1	3	1	7	SKB
FracMan/MAFI C	Finit elementkod för sprickflöde (DFN – Discrete Fracture Network).	1	1	1	2	1	6	SKB
GEOAN	Finit differenskod med en metod baserad på stokastiska kontinuum.	1	1	1	2	1	6	SKB
JAGG-modellen	Kalkylprogram för modellberäkningar baserade på analytiska uttryck för utspädning	2	2	2	1	1	8	Se Bilaga 1, kapitel 2.3.

2.3 Utvalda modeller för vidare utvärdering

Baserat på ovanstående utvärdering, har nio modeller valts ut för vidare granskning: WHI Unsat Suite, FEFLOW, FEMWATER, Visual MODFLOW Pro, GMS, MIKE SHE, Groundwater Vistas, FRACTRAN och MODFLOW SURFACT. Åtta av dessa modeller uppfyller urvalskriterierna. Vi har dock valt att även inkludera FRACTRAN-modellen för dess förmåga att modellera sprucket medium. Vi övervägde även att utesluta en av de tre MODFLOW-baserade mjukvarorna, Visual MODFLOW Pro, GMS och Groundwater Vistas, eftersom de är väldigt snarlika. Vi har dock inkluderat dem alla för helhetens skull.

Testversioner eller fulla versioner av alla modellsystemen har införskaffats för installation. Modellerna har sedan testas genom att använda tillhörande manualer och övningar och/eller applicerats på verkliga fall. Det var dock inte möjligt att få tillgång till en testversion av FRACTRAN. All information kring denna modell har därför endast erhållits genom reklamblad. Modellsystem beskrivs mer i detalj i följande kapitel. Beskrivningarna av modellerna har ursprung från tillverkare/-litteratur. Någon objektiv värdering eller åsikt kring modellerna har inte inkluderats.

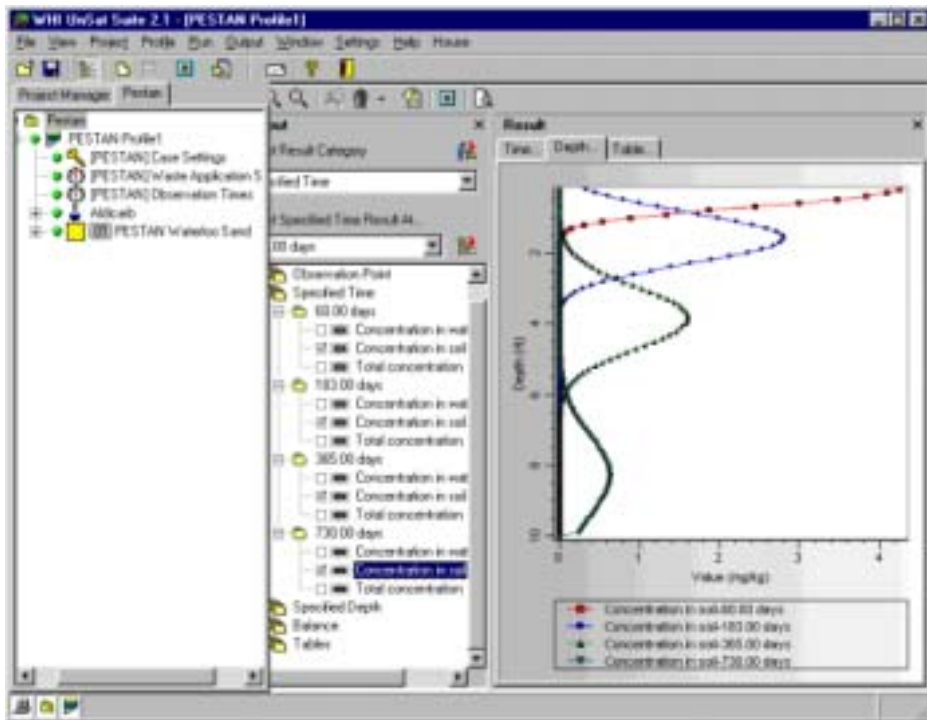
2.3.1 WHI UNSAT SUITE

WHI UnSat Suite är ett fullt integrerat modellsystem som kombinerar de mest populära och använda modellerna för simulering av endimensionellt grundvattenflöde och föroreningstransport i den omättade zonen (inkluderar SESOIL, VS2DT, VLEACH, PESTAN och HELP-modellen). Dessa modeller har alla kompilerats och optimerats för att användas som en ren Windowsapplikation och är integrerad med den grafiska modellmiljön i WHI UnSat Suite.

WHI UnSat Suite simulerar det vertikala och nedåtriktade flödet av grundvatten och migrationen av upplösta föroreningar i grundvattnet genom en tunn jordkolumn. Denna tunna jordkolumn benämns som en modellprofil.

Varje modellprofil som skapas har olika numeriska krav beroende på förhållandena vid platsen, tillgänglig data och syftet med modelleringen. Uppbyggnaden av modellens gränssnitt medger en enkel miljö där man snabbt kan etablera en endimensionell modell för den omättade zonen

(http://waterloohydrogeologic.com/software/whi_unsat_suite/whi_unsat_suite_ov.htm).



Figur 1 Exempel på resultat från WHI UnSat Suite

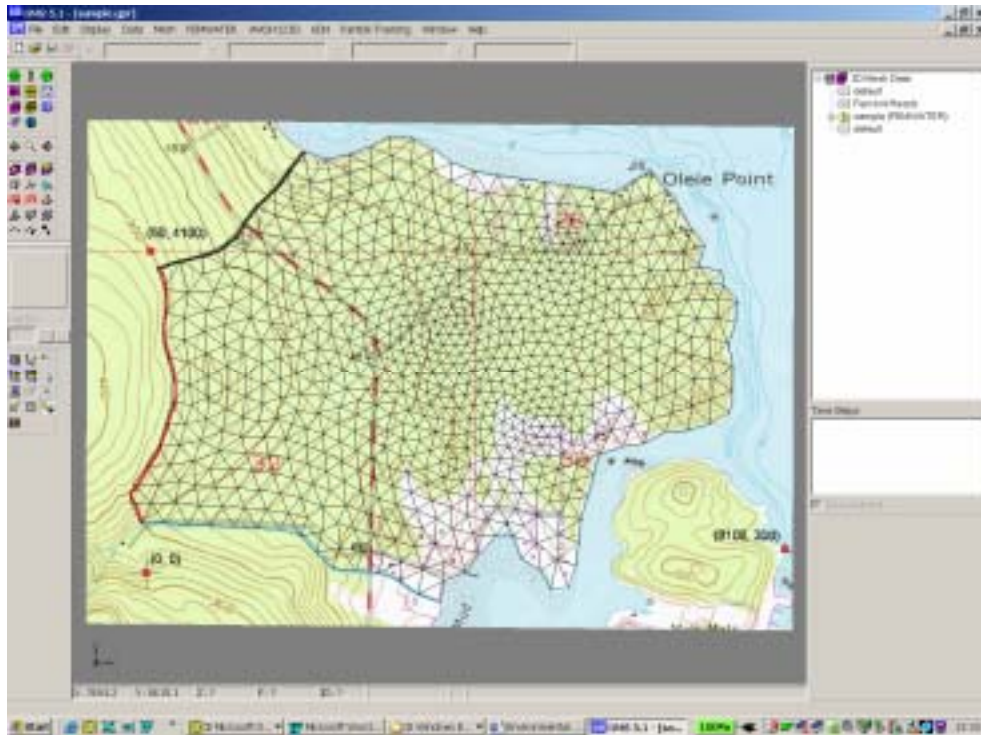
2.3.2 FEMWATER

FEMWATER är en tredimensionell grundvattenmodell baserad på finit elementmetoden. Den kan användas för att simulera flöde och transport i både den mättade och omättade zonen. Därefter kan dessa två kopplas samman för att simulera densitetsberoende problem, t.ex. salinitetsinträngning.

GMS inkluderar ett grafiskt gränssnitt för FEMWATER-modellen. Denna version av FEMWATER, som stöds av GMS, är en modifierad version. Modifieringen innebär en koppling till transportmodellen LEWASTE som möjliggör transportmodelleringen som beskrivs ovan.

En av fördelarna med finit elementmetoden, som används av FEMWATER, är att modellrand och stratigrafiska enheter kan modelleras noggrant. Innebörden av att FEMWATER även simulerar flöde i den omättade zonen, är att hela akviferen modelleras och att källor/sänkor direkt kan representeras i modellnät och modellrand. Nackdelarna med FEMWATER är att systemet kräver arbetsminne, modellsimuleringar kan vara tidskrävande och att konvergens under simuleringens förlopp kan vara svårare att uppnå.

GMS kan användas för att etablera komplexa FEMWATER-modeller. Den konceptuella modellmetoden kan användas för att förenkla modelleringsnät och parametrar/randförhållanden. En rad av kraftfulla tredimensionella verktyg för visualisering av modellresultat är tillgängliga inom modellsystemet. Dessa verktyg inkluderar animeringar av resultat, tvärsektioner och plottar med isolinjer (<http://www.bossintl.com/html/femwater.html>).



Figur 2 FEMWATERs gränssnitt – ett exempel från självstudierna i GMS

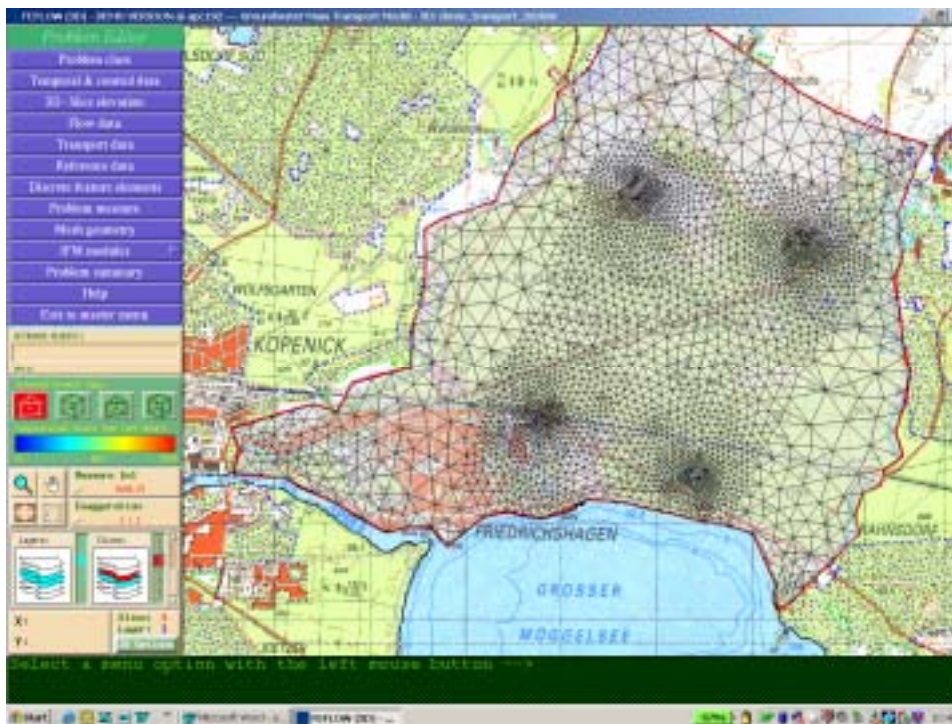
2.3.3 FEFLOW

FEFLOW är ett avancerat tredimensionellt modellverktyg baserat på finit elementmetoden. Modellsystemet erbjuder sofistikerade verktyg för analys och robusta numeriska algoritmer. FEFLOW är utvecklad med ett användarvänligt grafiskt gränssnitt som erbjuder alla kvaliteter som är nödvändiga för simulering av:

- transient eller stationärt flöde
- mättat och omättat flöde
- densitetsberoende flöde
- multipla grundvattennivåer
- masstransport och värmetransport
- transport genom spricksystem.

FEFLOW är ett fullt integrerat modellsystem som inkluderar alla nödvändiga verktyg för modellering av de mest komplexa modelleringsprojekt (Waterloo Hydrogeologic, Groundwater and Environmental Software Catalog, 2004).

Från beskrivningen av FEFLOW är det dock oklart om transporten av lösliga ämnen och biogeochemiska reaktioner även är aktiva i den omättade zonen.



Figur 3 FEFLOWs gränssnitt – ett exempel från självstudierna

2.3.4 MODFLOW (VISUAL MODFLOW PRO, GMS OCH GROUNDWATER VISTAS)

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

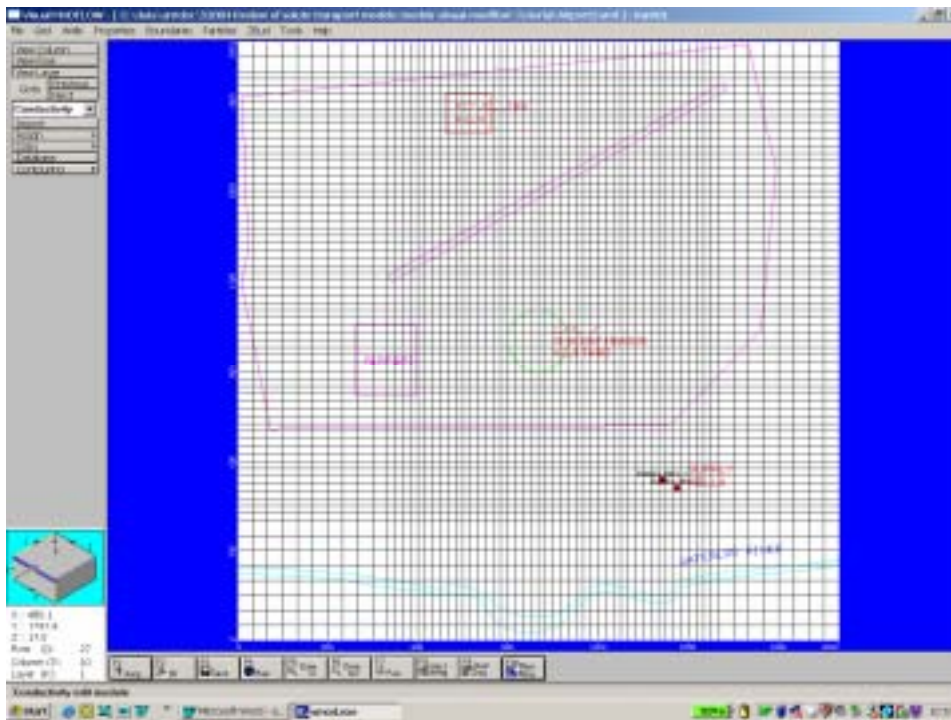
MODFLOW hanterar ekvationer för flöden i både öppna och slutna system/-akviferer och simulerar därmed grundvattensystem under både naturlig och mänsklig påverkan. MODFLOWs grundmodell kan representera variationer hos de hydrauliska egenskaperna i porösa media, naturlig och artificiell vattenbildning,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

Randförhållanden i originalversionen av MODFLOW behöver kännedom om skede och/eller infiltrationshastighet i ytvattensystemet. Dessa randförhållanden erbjuder inte heller ett sätt att automatiskt uppdatera skedet allt eftersom vatten fluktuerar in och ut ur vattenkroppar (Rumbaugh, 1999). Dock har moduler tagits fram för att adressera vissa av dessa problem gällande interaktionen mellan ytvatten och grundvatten. Exempel på sådana moduler är:

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

program är av värde vid prognostisering av effekten hos vattenkroppar vid underjordisk påverkan, t.ex. uppumpning av vatten eller gruvdrift (HIS GEOTRANS, 1999; Merit och Konikow, 2000).

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



Figur 4 Visual MODFLOWs gränssnitt – ett exempel från självstudierna i Visual MODFLOW

2.3.5 MIKE SHE

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

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

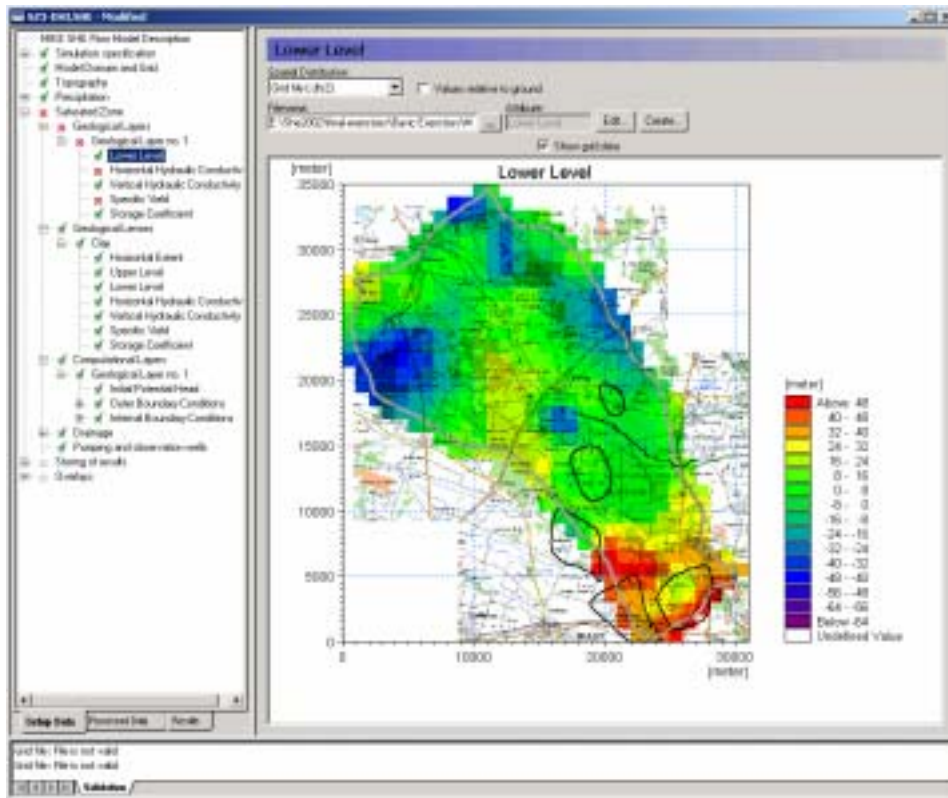
MIKE SHE - egenskaper och fördelar:

- unik – simulerar alla styrande processer i markdelen av den hydrologiska cykeln
- flexibel – tillämpbar på olika skalor, anpassas efter modelleringsprojektets behov
- effektiv – enkla och avancerade processbeskrivningar kan kombineras efter modelleringens behov och tillgänglig beräkningskapacitet
- datahantering – skapar kopplingar till originaldata (inklusive GIS-data) för att minimera datafel och maximera flexibiliteten
- accepterad – använd för hundratals konsult- och forskningstillämpningar världen över.

MIKE SHE inkluderar moduler för:

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

Ovanstående moduler är tillgängliga i olika komplexitetsgrader (DHI Water & Environment, Modeling the World of Water, Product Catalog 2004). Moduler för simulering av transport av lösliga ämnen, inkluderande reaktiva processer, finns tillgängliga för analyser av integrerade problem (ytvatten, omättad zon och grundvatten).



Figur 5 MIKE SHEs gränssnitt – ett exempel från självstudierna i MIKE SHE

2.3.6 MODFLOW SURFACT

MODFLOW SURFACT är baserad på MODFLOW. Eftersom MODFLOW har vissa begränsningar vid simulering av komplexa problem har tilläggsmoduler inkluderats för att förstärka simuleringsmöjligheterna. MODFLOW SURFACT är en integration av dessa flödes- och transportmoduler.

MODFLOW SURFACT – egenskaper och fördelar:

utökar möjligheterna med fysisk modellering med MODFLOW till att även inkludera beräkningar för omättad zon

- utökar MODFLOWs kapacitet och effektivitet gällande redan existerande möjligheter
- integrerar möjligheter för simulering av (masskonservativ och flera komponenter) föroreningstransport i existerande MODFLOW
- dynamisk tilldelning av arbetsminne vilket tillåter obegränsade dimensioner gällande problem
- modulstruktur tillåter vidare etablering av ytterligare simuleringsmöjligheter för att erbjuda ett omfattande och mer generellt simuleringsverktyg inom ramen för MODFLOW.

MODFLOW SURFACT – föroreningstransport – egenskaper:

noggranna, robusta och effektiva lösningssystem för masskonservativ transport

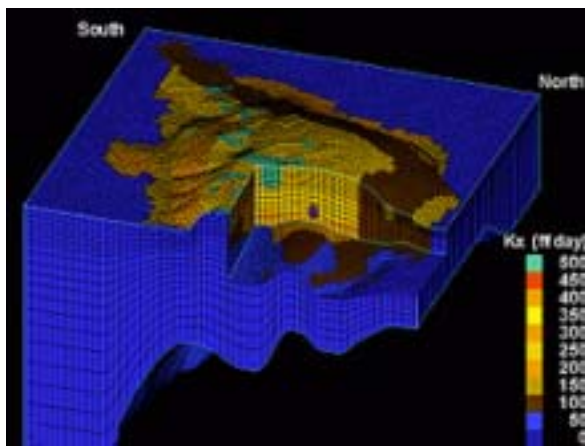
- numeriska system, indata/resultat, cellstruktur och beräkningsparametrar som är fullt kompatibla med MODFLOW och MODFLOW SURFACT
- axiellt symmetriska val för snabba analyser av avrivningsprov eller spårtest
- rymmer upp till fem olika typer av föroreningar i en simulering, inkluderande första ordningens kedjereaktioner som kan utlösas på grund av radioaktivt sönderfall (ämnesberoende) eller biokemiska transformationer (beroende på ämne och jordart)
- erbjuder val för linjär eller icke-linjär (Freundlich) jämviktsadsorption
- erbjuder två, tre och fyra komponentsval gällande dispersion för olika anisotropiska förhållanden. Under isotropiska förhållanden kollapsar val tre och fyra till Scheideggers ekvation för dispersion (två komponenter)
- fasta val för lösning av transport – uppströms, central eller blandad viktning för effektiv lösning eller TVD-system (Total Variation Diminishing) för extremt noggranna, fysiskt korrekta lösningar
- fullständigt hänsynstagande till ovanstående simuleringsval för beräkningshastighet och minnesallokering.

NUMERISKA SYSTEM FÖR TRANSPORT:

- finit differensdiskretisering (rumslig) som är kompatibel med MODFLOWs system
- masskonservativa lösningssystem baserade på primitiva former av transportekvationen
- TVD-system (Total Variation Diminishing) för fysiskt korrekta lösningar med anpassningsbar temporal viktning (mellan Crank-Nicholson och fullt implicit) för maximal noggrannhet

- val tillgängliga för uppströms, central eller blandad rumslig viktning
- val tillgängliga för fullt implicit eller explicit tidsmässig diskretisering
- variabel tidsstegning för att förbättra stabilitet och konvergens
- inga numeriska svängningar i tid eller rum eller numeriskt inducerade fel i massbalansen.

Bearbetning av indata för MODFLOW SURFACT är enkel och följer MODFLOWs struktur. Transportsimuleringar använder sig av all data i MODFLOW och duplicering av dessa data elimineras därmed. En extra uppsättning data inkluderande alla transportparametrar är nödvändig och randförhållanden skapas enkelt genom MODFLOWs randdata (<http://www.scientificsoftwaregroup.com/pages/>).



Figur 6 MODFLOW SURFACTs gränssnitt – varierande hydraulisk konduktivitet i en modell

2.3.7 FRACTRAN

FRACTRAN är en tvådimensionell finit elementmodell för simulering av stationärt grundvattenflöde och tidsvarierande föroreningstransport i sprucken (separerade sprickor), fullt mättad och porös media.

FRACTRAN inkluderar ett separat verktyg för bearbetning av indata (PRLFRAC) för definition av egenskaper hos sprickor och porös media inom zoner med olika fysiska egenskaper. Detta verktyg innehåller en slumpmässig generering av sprickor för definition av sprickegenskaper inom ett visst modellområde. Specificerade sprickegenskaper inkluderar sprickdensitet, minimum längd och medelöppning och varians.

Randförhållanden inkluderar specificerat tryck eller termer för konstant flöde medan källtermen inkluderar specificerad koncentration och specificerat flöde.. Dubbla porositeter kan också specificeras för att simulera effekterna av sprickflöde.

I motsats till andra sprickmodeller, så modellerar FRACTRAN flöde och transport genom både separata sprickor och porösa medium. FRACTRAN kan också modellera flöde och transport i icke spruckna porösa medium.

FRACTRAN använder sig av LTG (Laplace Transform Galerkin) finit elementmetod. Denna unika beräkningsalgoritm är signifikant snabbare än traditionellt transienta masstransportmodeller eftersom de inte behöver den beräknings-tidskrävande tidsstegningen. Detta reducerar signifikant den genomsnittliga tid som behövs för simulering av plymmigration över hundra och tusenstals år. LTGs beräkningssystem tillåter också grövre cellnät än konventionella finit elementmodeller för simulering av transport.

FRACTRAN inkluderar ett verktyg för bearbetning av resultat (POSTFRAC) och en rutin (FTPLOT) för skapandet av grafiska resultat inkluderande konturlinjer över hydrauliskt tryck och koncentration. Användaren kan också specificera en nivå/yta inom modellområdet där massflux kan beräknas. POSTFRAC och FTPLOT kan också användas för att kontrollera avstånd mellan och placering av sprickor före en modellsimulering (http://www.waterloohydrogeologic.com/software/software_pdfs/fractrans.pdf).

Tabell 3 Jämförelse av grundläggande egenskaper hos utvalda modellsystem.

Namn	Komplexitet	Variablers upplösning i tid och rum	Beräkningars upplösning i tid och rum	Randförhållanden	Praktisk användbarhet	Dokumentation	Möjligheter till användarstöd
WHI Unsat Suite	Simulerar enkelt endimensionellt flöde i omättad zon. Stödjer vissa transportmöjligheter.	Beror på den valda modellen. Från mer eller mindre uniforma flödesparametrar till fullt (endimensionellt) distribuerade parametrar. Randförhållandena (vattenbildning och koncentration) kan vara tidsvarierande.	Beror på den valda modellen, från simulering av stationära flöden till transienta flödes- och transportsimuleringar.	(in)flödesrand, förhållande med fasthållet tryck (som det lägre randförhållandet för modell för flöde i omättad zon) och olika koncentrationsförhållanden.	Modellerna är enkla och kan användas som ett översiktligt verktyg i olika aspekter. Som sådant är användbarheten stor.	Modellerna och gränssnittet är dokumenterade på en "on-line"-hjälp som ger nödvändig information.	WHI erbjuder bra och kostnadsfritt tekniskt stöd via telefon och e-post.
GMS FEMWATER	Denna finita elementkod simulerar problem, relaterade till omättat flöde och grundvattenflöde, i ett finit elementsystem. Densitetsberoende flöde och transport hanteras också. Modellsystemet kan därför karakteriseras som komplext.	Rumsliga variabler är oberoende av modellnätets representation och modellen är relativt flexibel gällande temporal distribution av dynamiska variabler. MODFLOW skapades huvudsakligen som en modell för simulering av stationära tillstånd, men den har möjligheter att simulera även transienta förhållanden.	Beräknar fullt tredimensionellt grundvatten. Är dock begränsad till rektangulära beräkningsceller i det horisontala planet. Tid är indelad i lika perioder (perioder med samma akvifertryck). Dessa perioder delas i sin tur in i tidssteg.	Är tillgängliga i grundvattenflödet och transporttyp I, II och III. Svaga länkar till vattendragsmoduler som i sin tur anses vara randförhållanden för grundvattenmodellen.	Modellsystemet har både avancerade och användbara val, men användbarheten anses generellt vara liten på grund av svårigheter (och programfel) i användargränssnittet.	Användarmanualer är tillgängliga liksom vissa forskarrapporter om användandet av FEMWATER-modellen. Mycket bra dokumentation för självstudier.	EMS-I erbjuder bra och kostnadsfritt tekniskt stöd via telefon och e-post. EMS-I erbjuder aktiva forum "on-line".

Namn	Komplexitet	Variablers upplösning i tid och rum	Beräkningars upplösning i tid och rum	Randförhållanden	Praktisk användbarhet	Dokumentation	Möjligheter till användarstöd
FEFLOW	Detta modellsystem skiljer sig från andra grundvattenmodeller eftersom den baseras på en finit elementkod. Den numeriska koden verkar ha hög standard och erbjuder både mättat och omättat flöde samt densitetsberoende flöde och transport. Sprickflöde och värmetransport hanteras också.	Generellt kan alla variabler vara tidsvarierande, även t.ex. hydraulisk konduktivitet. Modellen kan lätt förfinas inom vissa områden med ett utmärkt verktyg för cellhantering. Variabler är kopplade till noder och t.ex. brunn-data måste kopplas till en nod.	Modellen simulerar både stationära och transienta förhållanden. Tid anges alltid i dagar från ett visst datum. Man kan inte specificera datum.	Alla typer av randförhållanden hanteras. Troligtvis är importfunktioner tillgängliga, men i så fall väl dolda.	Det finns ingen översikt för indata. Gränssnittet gör det svårt att hantera systemet – speciell för nybörjare.	Modellsystemet är mycket väl dokumenterat med utmärkt teknisk dokumentation, användarmanualer och självstudier.	WASY mjukvara erbjuder bra tekniskt stöd via telefon och e-post.
Visual MODFLOW Pro	MODFLOW är en grundvattenmodell med svaga länkar till den omättade zonen och ytvattensystemet. Modellen hanterar komplexa transportsimuleringar av lösta ämnen.	MODFLOW skapades huvudsakligen som en modell för stationära tillstånd, men den har möjligheter att simulera även transienta förhållanden. All rumslig data är modellberoende och sådana modeller är inte särskilt enkla att förändra i fråga om utbredning, cellstorlek, lokalmodeller m.m.	Beräknar fullt tredimensionellt grundvatten. Är dock begränsad till rektangulära beräkningsceller i det horisontala planet. Tid är indelad i lika perioder (perioder med samma akvifertryck). Dessa perioder delas i sin tur in i tidssteg.	Är tillgängliga i grundvattenflödet och transporttyp I, II och III. Svaga länkar till vattendragsmoduler som i sin tur anses vara randförhållanden för grundvattenmodellen. Enkla funktioner för uppskattning av inflöde.	Anses vara hög på grund av lätt användarvänligt gränssnitt liksom zonerad sammanställning gällande vattenbalans och balans för lösta ämnen.	Användarmanualer är tillgängliga liksom ett antal forskarrapporter om användandet av MODFLOW och RT3D, RT3DMS m.m. Bra dokumentation för självstudier.	USGS erbjuder begränsat tekniskt stöd med hänsyn till användning av MODFLOW. WHI erbjuder bra och kostnadsfritt tekniskt stöd via telefon och e-post. Årliga serviceavtal finns tillgängliga.

HÅLLBAR SANERING
 Rapport 5534 Datormodeller för
 förorenings-spridning fas 1

Namn	Komplexitet	Variablers upplösning i tid och rum	Beräkningars upplösning i tid och rum	Randförhållanden	Praktisk användbarhet	Dokumentation	Möjligheter till användarstöd
FRACTRAN	FRACTRAN är konstruerad för simulering av sprickflöde och komplexiteten reflekterar detta trots att det är en tvådimensionell modell.	Flödesrelaterade variabler är stationära variabler medan indata för koncentration kan variera i tid (och rum).	Beräknar tvådimensionellt stationärt grundvattenflöde och transient transport. Finit elementmetod tillåter flexibelt modellnät.	Randförhållanden för flöde inkluderar typ I, II och III.	-	-	-
MIKE SHE	Grundvattenmodellen är integrerad med en endimensionell modell för den omättade zonen, en tvådimensionell modell för ytvatten och en endimensionell modell för vattendrag. MIKE SHE stödjer komplexa transportmöjligheter.	Rumsliga variabler är oberoende av modellnätets representation och modellen är fullt flexibel gällande temporal distribution av dynamiska variabler.	Beräknar fullt tredimensionellt grundvattenflöde. Är dock begränsad till kvadratiska beräkningsceller i det horisontella planet. Fullt dynamiska simuleringar med flexibla tidssteg.	I grundvattnet är randförhållanden av typ I, II och III tillgängliga. Uppskattningar av inflöde kan beräknas genom integrering av modeller för ytvattenprocesser. Har fullt dynamisk koppling till vattendragsmodell.	Anses vara hög beroende på den höga graden av komplexitet och modellens starka fysiska grund. För transienta problem anses modellen vara den bästa av de beprövade modellerna.	Användarmanualer är tillgängliga liksom många forskarrapporter om användandet av modellen. Bra dokumentation för självstudier.	DHI Water and Environment erbjuder tekniskt stöd över hela världen och har en 24-timmars "on-line" service. Årliga servicekontrakt finns tillgängliga.

Namn	Komplexitet	Variablers upplösning i tid och rum	Beräkningars upplösning i tid och rum	Randförhållanden	Praktisk användbarhet	Dokumentation	Möjligheter till användarstöd
GMS MODFLOW	MODFLOW är en grundvattenmodell med svaga kopplingar till den omåttade zonen och ytvattensystemet. MODFLOW stödjer komplexa transportmöjligheter.	Rumsliga variabler är oberoende av modellnätets representation och modellen är relativt flexibel gällande temporal distribution av dynamiska variabler. MODFLOW skapades huvudsakligen som en modell för simulering av stationära tillstånd, men den har möjligheter att simulera även transienta förhållanden.	Beräknar fullt tredimensionellt grundvatten. Är dock begränsad till rektangulära beräkningsceller i det horisontala planet. Tid är indelad i lika perioder (perioder med samma akvifertryck). Dessa perioder delas i sin tur in i tidssteg.	Är tillgängliga i grundvattenflödet och transporttyp I, II och III. Svaga länkar till vattendragsmoduler som i sin tur anses vara randförhållanden för grundvattenmodellen. Enkla funktioner för uppskattning av inflöde.	Modellsystemet har både avancerade och användbara val, men användbarheten anses generellt vara liten på grund av svårigheter (och programfel) i användargränssnittet.	Användarmanualer är tillgängliga liksom ett antal forskarrapporter om användandet av MODFLOW och RT3D, RT3DMS m.m. Bra dokumentation för självstudier.	USGS erbjuder begränsat tekniskt stöd med hänsyn till användning av MODFLOW. WHI erbjuder bra och kostnadsfritt tekniskt stöd via telefon och e-post. Årliga serviceavtal finns tillgängliga.

Namn	Komplexitet	Variablers upplösning i tid och rum	Beräkningars upplösning i tid och rum	Randförhållanden	Praktisk användbarhet	Dokumentation	Möjligheter till användarstöd
MODFLOW SURFACT (Visual MODFLOW Pro interface)	MODFLOW SURFACT möjliggör integrerade ekvationslösningar för flöde i omättad zon och grundvattenflöde samt transport. MODFLOW SURFACT anses vara en komplex modellkod för både flödes- och transportsimuleringar.	MODFLOW SURFACT skapades huvudsakligen som en modell för simulering av stationära tillstånd, men den har möjligheter att simulera även transienta förhållanden. Alla rumsliga data är modellberoende och sådana modeller är inte särskilt enkla att förändra i fråga om utbredning, cellstorlek, lokalmodeller m.m.	Beräknar fullt tredimensionellt grundvatten. Är dock begränsad till rektangulära beräkningsceller i det horisontala planet. Tid är indelad i lika perioder (perioder med samma akvifertryck). Dessa perioder delas i sin tur in i tidssteg.	I grundvattnet är randförhållanden av typ I, II och III tillgängliga. Hanterar också ytvattenöversvämning, orsakad av överskott på nederbörd och ytavrinning, genom att lösa de fullständiga flödesekvationerna för flöde på ytan, i den omättade zonen och i grundvattnet.	Anses vara hög på grund av lätt användarvänligt gränssnitt liksom zonerad sammanställning gällande vattenbalans och balans för lösta ämnen.	Användarmanualer är tillgängliga liksom ett antal forskarrapporter om användandet av MODFLOW och RT3D, RT3DMS m.m. Bra dokumentation för självstudier.	Utvecklarna av MODFLOW SURFACT – Hydrogeologic Inc. erbjuder begränsat tekniskt stöd för vissa versioner av programmet. WHI erbjuder bra tekniskt stöd via telefon och e-post. Årliga serviceavtal finns tillgängliga.
Groundwater Vistas MODFLOW	MODFLOW är en grundvattenmodell med svaga kopplingar till den omättade zonen och ytvattensystemet. MODFLOW stödjer komplexa transportmöjligheter.	MODFLOW skapades huvudsakligen som en modell för simulering av stationära tillstånd, men den har möjligheter att simulera även transienta förhållanden.	Beräknar fullt tredimensionellt grundvatten. Är dock begränsad till rektangulära beräkningsceller i det horisontala planet. Tid är indelad i lika perioder (perioder med samma akvifertryck). Dessa perioder delas i sin tur in i tidssteg.	Är tillgängliga i grundvattenflödet och transporttyp I, II och III. Svaga länkar till vattendragsmoduler som i sin tur anses vara randförhållanden för grundvattenmodellen. Enkla funktioner för uppskattning av inflöde.	Modellsystemet har både avancerade och användbara val, men användbarheten anses generellt vara liten på grund av den icke flexibla strukturen vid modelletablering.	Användarmanualer är tillgängliga liksom ett antal forskarrapporter om användandet av MODFLOW och RT3D, RT3DMS m.m. Bra dokumentation för självstudier.	USGS erbjuder begränsat tekniskt stöd med hänsyn till användning av MODFLOW. ESI erbjuder bra och kostnadsfritt tekniskt stöd via telefon och e-post.

Tabell 4 Jämförelse av beskrivning av hydrologiska processer i de utvalda modellsystemen.

Namn	Grundvattenflöde	Flöde i omättad zon	Grundvatten inflöde	Randförhållanden i ytvatten	Sprickflöde	Dränering
WHI Unsat Suite	Nej	Ja	Ja	Ja, men enkla.	Nej	Ja – inkluderad i den omättade zonen, som ett slags randförhållande.
GMS FEMWATER	Ja	Ja	Enkel metod.	Svaga kopplingar – randförhållanden.	Nej	Definierad som ett fasthållet tryck, resulterande i ett utflöde från modellen.
FEFLOW	Ja	Ja	Nej	Svaga kopplingar – randförhållanden. En integrering med DHIs fullt dynamiska vattendragsmodell är under utveckling.	Ja	Kan definieras som ett linjesegment med randförhållande av typ III.
Visual MODFLOW Pro	Ja	Nej	Enkel metod.	Svaga kopplingar – randförhållanden.	Nej	Ja
FRACTRAN	Ja	-	-	-	Ja, tvådimensionellt.	-
MIKE SHE	Ja	Ja	Fullt och dynamiskt kopplad till omättad zon och flödesberäkning.	Fullt och dynamiskt kopplad till vattendragsmodell.	Nej – endast i makroporer i omättad zon.	Ja, definierad både som dränering vid fasthållet tryck och dränering vid fasthållet tryck kopplad till ett linjärt magasinssystem.
GMS MODFLOW	Ja	Nej	Enkel metod.	Svaga kopplingar – randförhållanden.	Nej	Ja
MODFLOW SURFACT	Ja	Ja	Enkel metod.	Svaga kopplingar – randförhållanden.	Ja	Ja
Groundwater Vistas MODFLOW	Ja	Nej	Enkel metod.	Svaga kopplingar – randförhållanden.	Nej	Ja

Tabell 5 Jämförelse av möjligheter för transportmodellering av lösliga ämnen i de utvalda modellsystemen.

Namn	Transport av lösliga ämnen i grundvatten	Transport av lösliga ämnen i den omättade zonen	Spricktransport	Partikelspårning	Randförhållanden	Densitetsberoende flöde och transport	Transport av reaktiva ämnen – komponenters komplexitet	NAPLS och DNAPLS
WHI Unsat Suite	Nej	Ja	Nej	Nej	Inflödesbildare och fri dränering samt fasthållet tryck som den lägre randen.	Nej	Enkel till komplex – men får hantera NAPLS och DNAPLS.	Ja
GMS FEMWATER	Ja	Ja	Nej	Nej	Alla sorter tillgängliga men svaga kopplingar till ytvattenkomponenter.	Ja		Nej
FEFLOW	Ja	Ja	Ja	Ja	Alla sorter tillgängliga men svaga kopplingar till ytvattenkomponenter.	Ja	Komplex	Nej
Visual MODFLOW Pro	Ja	Nej	Nej	Ja, men huvudsakligen för flödeslinjer under stationära förhållanden.	Alla sorter tillgängliga men svaga kopplingar till ytvattenkomponenter.	Nej	Komplex	Nej
FRACTRAN	Ja	Nej	Ja	Nej	-	Nej	-	Nej

HÅLLBAR SANERING
 Rapport 5534 Datormodeller för
 föroreningsspridning fas 1

Namn	Transport av lösliga ämnen i grundvatten	Transport av lösliga ämnen i den omättade zonen	Spricktransport	Partikelspårning	Randförhållanden	Densitetsberoende flöde och transport	Transport av reaktiva ämnen – komponenters komplexitet	NAPLS och DNAPLS
MIKE SHE	Ja	Ja	Ja, en metod med dubbel porositet beräknar transport av lösliga ämnen i sprucken media.	Ja, transienta simuleringar för att bestämma tillströmningszoner (capture zones), men svag vid bestämning av flödeslinjer.	Alla sorter tillgängliga men svaga kopplingar till ytvattenkomponenter.	Nej	Mycket komplex.	Nej
GMS	Ja	Nej	Nej	Ja, men huvudsakligen för flödeslinjer under stationära förhållanden.	Alla sorter tillgängliga men svaga kopplingar till ytvattenkomponenter.	Ja	Komplex	Nej
MODFLOW SURFACT (Visual MODFLOWS gränssnitt)	Ja (men stöds inte av Visual MODFLOWS gränssnitt).	Ja (men stöds inte av Visual MODFLOWS gränssnitt).	Ja	Stöds troligtvis av GVs gränssnitt.	Alla sorter tillgängliga men svaga kopplingar till ytvattenkomponenter.	Ja	Komplex	Inkluderar upplösning av NAPL (stöds inte av Visual MODFLOWS gränssnitt).
Groundwater Vistas	Ja	Nej	Nej	Ja, men huvudsakligen för flödeslinjer under stationära förhållanden.	Alla sorter tillgängliga men svaga kopplingar till ytvattenkomponenter.	Ja	Komplex	Ja

Tabell 6 Jämförelse av användargränssnitt hos de utvalda modellsystemen

Namn	Generellt	Användarvänlighet	GIS-kopplingar	Möjligheter för bearbetning av in- och utdata	Kalibrering och verktyg för känslighetsutvärdering	Verktyg för beräkning av vattenbalans och lösliga ämnen	Tillgängliga ekvationslösare för simulering av grundvatten	Transport av lösliga ämnen och partikeltransport
WHI Unsat Suite	Generellt verkar användargränssnittet enkelt att använda och olika (EPA) modeller i systemet har samma utseende.	Ett trevligt litet verktyg för uppskattning av endimensionellt flöde i den omätade zonen och transportmönster för olika ämnen.	Inga	Användargränssnittet stödjer etablering av enkla endimensionella jordmodeller och presenterar resultat i form av enkla diagram. Det finns även en funktion för rapportgenerering.	Inga	Verktyg för beräkning av vattenbalans och lösliga ämnen finns inbyggda i systemet.	Olika ekvationslösare för flöde i omättad zon finns tillgängliga, t.ex. Richards ekvation.	Olika transportkoder som också hanterar NAPLS och DNAPLS finns tillgängliga.

Namn	Generellt	Användarvänlighet	GIS-kopplingar	Möjligheter för bearbetning av in- och utdata	Kalibrering och verktyg för känslighetsutvärdering	Verktyg för beräkning av vattenbalans och lösliga ämnen	Tillgängliga ekvationslösare för simulering av grundvatten	Transport av lösliga ämnen och partikeltransport
GMS FEMWATER	Olika gränssnitt erbjuds för FEMWATER men det mest omfattande och kompletta är GMS MODFLOW. Beskrivningarna för GMS FEMWATER och GMS MODFLOW är till viss grad identiska.	All indata är modelloberoende och cellstorleken och modellutbredningen är väldigt enkel att förändra när en konceptuell modell har skapats. Systemet stödjer transienta modeller.	Nära kopplingar till ArcView GIS och inbyggda GIS-verktyg.	Omfattande verktyg för databearbetning och uppbyggnad av geomodeller. Trevliga presentationsmöjligheter, av in- och utdata, t.ex. i form av tvärsektioner och stapeldiagram. Inkluderar även tvådimensionell grafisk presentation. Enkelt verktyg för tvådimensionell bearbetning.	GMS stödjer flera stokastiska ramverk. I form av verktyg för autokalibrering inkluderar PEST och UCODE. Verktøy för att skapa samstämmiga sannolikhetsmodeller och utföra stokastiska simuleringar. Verktøy för brunnsoptimering, både relaterade till grundvattenuttag och återinfiltration av dricksvatten finns tillgängliga.	Inga verktyg har identifierats i användargränssnittet.	Tre olika ekvationslösare finns tillgängliga: "a point iterative matrix solver" och två olika "preconditioned conjugate gradient".	Nära och användarvänliga kopplingar mellan flödes- och transportmodell. Transienta simuleringar är komplicerade att utföra och görs troligtvis sällan med detta program.

Namn	Generellt	Användarvänlighet	GIS-kopplingar	Möjligheter för bearbetning av in- och utdata	Kalibrering och verktyg för känslighetsutvärdering	Verktyg för beräkning av vattenbalans och lösliga ämnen	Tillgängliga ekvationslösare för simulering av grundvatten	Transport av lösliga ämnen och partikeltransport
FEFLOW	Generellt verkar användargränssnittet aningen svårt att använda, framför allt för nybörjare. Det är mycket svårt att få en överblick över komplexiteten och status gällande data för en modell.	Rumslig data är modeloberoende med aspekt till den konceptuella geologiska modellen, som enkelt kan ändras och därmed enkelt skapa förändring i grundvattenmodellen. Tidsvarierande data hänger nära ihop med modelluppställningen. Gränssnittet är uppbyggt i en UNIX-miljö och konverterad genom en Windowsemulering. Mjukvara och menyer har därför inte ett utseende som är familjärt för Windowsanvändare och kan därför ibland vara svårt att använda.	Genom databasmenyn har användaren möjlighet att importera shp-filer (ESRI), dBASE-filer och ASCII-databaser.	Hjälpverktygen i modellen inkluderar ett antal funktioner för inter- och extrapolering med syfte att skapa ytor från diskreta data. Interpolationsverktyg till FEFLOW-noderna finns även.	Inga sådana verktyg finns tillgängliga.	Enkla verktyg för beräkning av vattenbalans och lösliga ämnen finns inbyggda i systemet.	Standardlösaren är en slags PCG (preconditioned conjugate gradient) men för mindre problem finns en direkt ekvationslösare tillgänglig.	Ett antal lösare finns tillgängliga för transportekvationer inklusive BiCGSTABP, ORTHOMIN, GMRES, CGS och BiCSTAB.

Namn	Generellt	Användarvänlighet	GIS-kopplingar	Möjligheter för bearbetning av in- och utdata	Kalibrering och verktyg för känslighetsutvärdering	Verktyg för beräkning av vattenbalans och lösliga ämnen	Tillgängliga ekvationslösare för simulering av grundvatten	Transport av lösliga ämnen och partikeltransport
Visual MODFLOW Pro	Generellt är användargränssnittet enkelt att använda och okomplicerat i många aspekter. Det är dock svårt att få en överblick över komplexiteten och status gällande indata för en modell.	All data är modellberoende och sådana modeller inte är särskilt flexibla och enkla att förändra med hänsyn till modellutbredning, cellstorlek, lokalmodeller m.m. Är i huvudsak framtagen för simuleringar i stationärt tillstånd men transienta modeller stöds även. Trevligt verktyg för presentation i tre dimensioner och av tvärsektioner.	ESRI gridfiler (punkttema) och shp-filer samt MapInfo gridfiler kan användas som överlagringsfiler samt som indata. Det finns även en koppling till Excel.	Verktyg för redigering av celldata och interpolationstekniker finns tillgängliga. Enkla verktyg för specifikationer för vattendrag och sjöar.	Verktyget PEST för autokalibrering är inbyggt i modellen och kan användas för både flödes- och transportsimuleringar. Verktyg för brunnsoptimering, både relaterade till grundvattenuttag och återinfiltration av dricksvatten finns tillgängliga.	Vattenbalans beräknas med verktyget Zone Budget. Detta verktyg är dock inte enkelt att använda och nästan inte tillämpligt för transienta simuleringar. Vattenbalansen kan presenteras i enkla diagram.	Ett antal ekvationslösare finns tillgängliga (PCG, SIP, SOR, WHS och AMG).	Trevliga kopplingar mellan flödes- och transportmodell. Stationära flödeslinjer kan simuleras med MODPATH. Transienta simuleringar är komplicerade att utföra och görs troligtvis sällan med detta program.
FRACTRAN	-	-	-	-	-	-	-	-

Namn	Generellt	Användarvänlighet	GIS-kopplingar	Möjligheter för bearbetning av in- och utdata	Kalibrering och verktyg för känslighetsutvärdering	Verktyg för beräkning av vattenbalans och lösliga ämnen	Tillgängliga ekvationslösare för simulering av grundvatten	Transport av lösliga ämnen och partikeltransport
MIKE SHE	Generellt tillhör gränssnittet en ny generation som är fullt integrerad med Windows-verktyg. Modellen har ett linjärt framåtskridande under modelletablering, som kan vara svårt att överblicka för nya användare. Erbjuder utmärkta översikter och flexibla verktyg för dataredigering.	All data är modelloberoende och cellstorlek och modellutbredning samt tidssteg redigeras enkelt. Transienta simuleringar stöds utmärkt. Användargränssnitt för transport av lösliga ämnen och dess koppling till flödesmodellen är svag. Presentationsmöjligheterna är moderata men under utveckling.	ESRI gridfiler (punkttema) och shp-filer kan användas som överlagringsfiler samt som indata. Koppling till en GIS-baserad geologisk redigering samt en avancerad GIS-baserad flödesräknare. Inbyggd redigering för shp-filer.	Avancerade inbyggda grafiska redigeringsverktyg för redigering av en-, två- och tredimensionella data samt tvådimensionell transient data. Inkluderar även rutiner för interpolation.	Verktyget AUTOCAL för autokalibrering är inbyggt i systemet och kan användas för stationära och transienta flödessimuleringar.	Ett flexibelt verktyg för vattenbalansberäkning; i olika perioder, hela modellen, vissa modellager eller en lokal del av modellen. Ett balansverktyg för transportberäkningar existerar också men stöds inte av användargränssnittet och är därför svåränvänt.	En PCG2 och en SOR-lösare finns tillgängliga.	Användargränssnitt för transport-simulering är tillgänglig i en äldre version av MIKE SHE och har en svag koppling till flödesmodellen. En flexibel och transient partikel-spåringsmodul finns tillgänglig. Resultat exporteras direkt till shp-filer.

Namn	Generellt	Användarvänlighet	GIS-kopplingar	Möjligheter för bearbetning av in- och utdata	Kalibrering och verktyg för känslighetsutvärdering	Verktyg för beräkning av vattenbalans och lösliga ämnen	Tillgängliga ekvationslösare för simulering av grundvatten	Transport av lösliga ämnen och partikeltransport
GMS MODFLOW	Generellt har gränssnittet många funktioner, men är för nybörjaren svårt att tränga in i. Det finns ingen linjär arbetsgång under modelletableringen och gränssnittet verkar inte logiskt i alla aspekter. Ett antal programfel uppstod vid utvärderingen av mjukvaran.	All data är modelloberoende och cellstorlek och modellutbredning förändras enkelt vid etablering av en konceptuell modell. Transienta modeller stöds av systemet.	Nära kopplingar till ArcView GIS. Inbyggda GIS-verktyg för redigering.	Omfattande verktyg för databearbetning och etablering av geomodeller. Trevliga verktyg för presentation av tvärsektioner, stapeldiagram och in- och utdata i två dimensioner. Enkelt verktyg för redigering av data i två dimensioner.	GMS stödjer flera stokastiska ramverk. Autokalibrering utförs med verktygen PEST och UCODE. Verktøy finns för att skapa samstämmiga sannolikhetsmodeller och att köra stokastiska simuleringar. Verktøy för brunnsoptimering, både relaterade till grundvattenuttag och återinfiltration av dricksvatten finns tillgängliga.	Inga verktyg har identifierats i användargränssnittet.	Ett antal ekvationslösare finns tillgängliga, t.ex. PCG2, SIP, SOR och GMG.	Trevliga kopplingar mellan flödes- och transportmodell. Stationära flödeslinjer kan simuleras med MODPATH. Transienta simuleringar är komplicerade att utföra och görs troligtvis sällan med detta program.

Namn	Generellt	Användarvänlighet	GIS-kopplingar	Möjligheter för bearbetning av in- och utdata	Kalibrering och verktyg för känslighetsutvärdering	Verktyg för beräkning av vattenbalans och lösliga ämnen	Tillgängliga ekvationslösare för simulering av grundvatten	Transport av lösliga ämnen och partikeltransport
MODFLOW SURFACT (GV eller VM)	Olika gränssnitt erbjuds för MODFLOW SURFACT och både Visual MODFLOW Pro och Groundwater Vistas stödjer MODFLOW SURFACT. Vid denna utvärdering har gränssnittet från Visual MODFLOW Pro använts.	All data är modellberoende och sådana modeller inte är särskilt flexibla och enkla att förändra med hänsyn till modellutbredning, cellstorlek, lokalmodeller m.m. Är i huvudsak framtagen för simuleringar i stationärt tillstånd men transienta modeller stöds även. Trevligt verktyg för presentation i tre dimensioner och av tvärsektioner.	ESRI gridfiler (punkttema) och shp-filer samt MapInfo gridfiler kan användas som överlagringsfil samt som indata. Det finns även en koppling till Excel.	Verktyg för redigering av celldata och interpolationstekniker finns tillgängliga. Enkla verktyg för specifikationer för vattendrag och sjöar.	Verktyget PEST för autokalibrering är inbyggt i modellen och kan användas för både flödes- och transportsimuleringar.	Vattenbalans beräknas med verktyget Zone Budget. Detta verktyg är dock inte enkelt att använda och nästan inte tillämpligt för transienta simuleringar. Vattenbalansen kan presenteras i enkla diagram.	Ett antal ekvationslösare finns tillgängliga, t.ex. PCG4 och en variant av Newton-Raphson.	Trevliga kopplingar mellan flödes- och transportmodell. Transienta simuleringar är komplicerade att utföra och görs troligtvis sällan med detta program.

Namn	Generellt	Användarvänlighet	GIS-kopplingar	Möjligheter för bearbetning av in- och utdata	Kalibrering och verktyg för känslighetsutvärdering	Verktyg för beräkning av vattenbalans och lösliga ämnen	Tillgängliga ekvationslösare för simulering av grundvatten	Transport av lösliga ämnen och partikeltransport
Groundwater Vistas MODFLOW	Generellt är gränssnittet dialogbaserat och liknar Visual MODFLOW.	Mycket starka kopplingar mellan cellnät och rumslik data samt mellan perioder av lika tryck och transienta data. Inte flexibel med hänsyn till förändringar i cellstorlek, transienta simuleringar, lokalmodeller m.m. Är i huvudsak framtagen för simuleringar i stationärt tillstånd men transienta modeller stöds även. Inkluderar ett användbart verktyg för förfining och förskjutning av modellenät.	Kopplingar till ArcView GIS (shp-filer och konturlinjer). Används både för överlagring och dataimport.	Verktyg för redigering av celldata och interpolationstekniker finns tillgängliga. Enkla verktyg för specifikationer för vattendrag och sjöar.	Stark stokastisk del med multipla verktyg för modellkalibrering och känslighetsanalys. PEST och UCODE stöds liksom optimeringsverktyg för återföringsbrunnar och målnivåer (tryck).	Groundwater Vistas inkluderar ett zonbaserat balansverktyg, som dokumenterar in- och utflöde och utbyte mellan zoner. Nyligen utvecklade verktyg är inte inkluderade i testversionen av mjukvaran.	Ett antal ekvationslösare är tillgängliga, t.ex. PCG2, SIP, LMG, SOR och PCG4 (MODFLOW SURFACT).	Nära kopplingar mellan flödes- och transportmodell. Stationära flödeslinjer kan simuleras med MODPATH och PATH3D. Transienta simuleringar är komplicerade att utföra och görs troligtvis sällan med detta program.

3 Referenser

Appelo, C.A.J, Postma, D., 1996. *Geochemistry, groundwater and pollution*. A.A. Balkema, Rotterdam, Netherlands.

Camp Dresser and McKee, 2001. *Evaluation of Integrated Surface Water and Groundwater modeling tools*. CDM Inc. Water Resources Research and Development Program, February 2001. (<http://www.dhisoftware.com/mikeshe/Reviews>)

DHI Software, 2003. *MIKE SHE Users Guide*. DHI Water and Environment, DK-2970 Hørsholm, Denmark.

ESI, 2004. *Command reference for Groundwater Vistas*, version 4. Environmental Simulations, Inc., Reynolds, PA 17569, USA.

Hill MC, 1998. *Methods and guidelines for effective model calibration*. US Geological Survey, Water Resources Investigations Report 98-4005.

Kaiser-Hill, 2001. *Model Code and Scenario Selection Report*. Site-Wide Water Balance Rocky Flats Environmental Technology Site. Kaiser-Hill Company, February, 2001. (<http://www.dhisoftware.com/mikeshe/Reviews>)

Lindberg, J., Olofsson, B., 1997: *Risk för salt grundvatten – en studie med hjälp av GIS över delar av Norrtälje kommun*. Rapport. KTH, Institutionen för Anläggning och Miljö, Avdelningen för Mark och Vattenresurser.

Maidment, D.R. (editor), 1992: *Handbook of Hydrology*. McGraw-Hill Inc.

Madsen, H., 2003. *Parameter estimation in distributed hydrological catchment modelling using automatic calibration with multiple objectives*. Adv. in Water Resources 26.

Rubin, Y., 2003. *Applied Stochastic Hydrogeology*. Oxford University Press. (http://www.oup.com/pdf/019513804X_01.pdf)

Singh, V.P. (editor), 1995. *Computer Models of Watershed Hydrology*. Water Resources Publications, Colorado, USA.

Thunvik, R., Sokrut, N., 2002. *ECOFLOW – ett verktyg för integrerad modellering av yt- och grundvatten i avrinningsområden*. Grundvatten nr 1/02.

Waterloo Hydrogeologic, 2004. *Visual MODFLOW Pro reference manual*. Waterloo Hydrogeologic, Inc., Waterloo, Ontario, Canada.

US Army Corps of Engineers and South Florida Water Management District, 2002. Central and South Florida Project. *Comprehensive Everglades Restoration Plan*. B2 Hydraulics – Final Model Evaluation Report. EAA storage reservoirs – Phase 1. (<http://www.dhisoftware.com/mikeshe/Reviews>)

Bilaga 2 – Ekvationer för flöde och transport av lösliga ämnen

1 Introduktion

Denna tekniska bilaga är skriven som ett stöd till Bilaga 1 om existerande modellsystem.

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

2 Grundvattenflöde

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

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

där

- K_{xx} , K_{yy} , K_{zz} är hydraulisk konduktivitet längs x-, y- och z-axlarna som antas att vara parallella till de huvudsakliga axlarna för hydraulisk konduktivitet
- h är piezometrisk stighöjd
- Q är flöde per volymenhet för att representera tillskott av vatten och utflöden
- S_s är specifik magasinskoefficient definierad som volymen vatten som frigörs från magasinet vid en tryckförändring på 1 m i en kubikmeter av det porösa materialet.

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

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

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

där

- q_p är potentiellt flöde in i cellen i,j,k
- q_{out} är flöde ut från cellen
- Δw är magasin kapacitet.

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

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

där

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

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

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

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

där
 K är hydraulisk konduktivitet
 Δz är mättad lagertjocklek.

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

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

där
 Δz är lagertjockleken.

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

Magasinskapaciteten beräknas av:

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

där
 n är tidssteg
 $S1$ är magasinskapaciteten vid starten av iterationen vid tidssteg n
 $S2$ är magasinskapaciteten vid iteration M.

För slutna celler anges magasinskapaciteten som

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

och för öppna celler anges magasinskapaciteten som

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

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

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

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

3 Flöde i den omättade zonen

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

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

där

ψ är trycket

K är hydraulisk konduktivitet (beroende på vatteninnehåll)

S är källa/utloppsterm (rotens upptag av vatten)

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

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

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

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

Förhållandet mellan vatteninnehåll θ och tryckhöjd ψ beskrivs i en pF-kurva. Jordens sammansättning, gällande textur och struktur, definierar generellt denna kurva. Även det organiska innehållet kan ha en påverkan på detta förhållande. En karaktäristisk egenskap hos pF-kurvan är att tryckhöjden ψ minskar ganska snabbt med vatteninnehåll. Hystereseeffekter kan uppstå och istället för att vara ett envärdesbaserat förhållande så består $\psi(\theta)$ -relationen av en rad kurvor. Jordens historik gällande uttorkning och blötperioder bestämmer den aktuella kurvan.

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

4 Transport i grundvatten

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

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

där

c	är koncentration av det lösliga ämnet
R_c	representerar källor eller utlopp
D_{ij}	är dispersionskoefficient (tensor)
v_i	är hastighet (tensor)

Den advektiva transporten bestäms av vattenflöden (Darcy-hastigheter) som beräknas av en modell för grundvattenflöde. För att kunna bestämma grundvattenhastigheten, divideras Darcy-hastigheten med den effektiva porositeten:

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

där

q_i	är Darcy's hastighetsvektor
θ	är den effektiva porositeten hos medium.

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

$$\begin{aligned} D_{xx} &= [\alpha_T (V_y^2 + V_z^2) + \alpha_L V_x^2] / U \\ D_{yy} &= [\alpha_T (V_x^2 + V_z^2) + \alpha_L V_y^2] / U \\ D_{zz} &= [\alpha_T (V_x^2 + V_y^2) + \alpha_L V_z^2] / U \\ D_{xy} &= (\alpha_L - \alpha_T) V_x V_y / U = D_{yx} \\ D_{xz} &= (\alpha_L - \alpha_T) V_x V_z / U = D_{zx} \\ D_{yz} &= (\alpha_L - \alpha_T) V_y V_z / U = D_{zy} \end{aligned} \quad \text{Ekv. 12}$$

där

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

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

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

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

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

5 Transport i den omättade zonen

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

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

där

c är koncentration av det lösliga ämnet
 R_c är käll- eller sänktterm
 D är dispersionskoefficienten
 v_z är hastighet.

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

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

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

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

6 Källor och utlopp

Både i den omättade zonen och i grundvattnet inkluderar ekvationen för advektion-dispersion en källa/utloppsterm. Denna term kan representera både en fysisk källa eller ett utlopp i form av t.ex. återföring eller uppumpning av vatten av en viss koncentration men kan också stå för kemiska och/eller geokemiska/biogeokemiska reaktioner. Sådana reaktioner påverkar transportprocessen och kontrollerar ofta helt transporten och destinationen av en förorening.

6.1 Transport i spruckna media

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

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

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

där

β_s	är en empirisk massöverföringskoefficient
c_m	är den lösta koncentrationen i den mobila domänen
c_{im}	är den lösta koncentrationen i den immobila domänen.

6.2 Sorptionsprocesser

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

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

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

Den linjära sorptionsisotermen är matematiskt sett den enklaste isotermen och kan beskrivas som ett linjärt förhållande mellan mängden av jordmaterialet sorberade lösliga ämnen och vattenkoncentrationen av lösningen:

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

där

c^* är koncentrationen av det adsorberade ämnet
 K_d är känd som distributionskoefficienten.

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

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

där

f_{oc} är det organiska kolinnehållet.

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

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

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

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

där

K_f, N är konstanter.

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

”The Langmuir sorption isotherm” tar hänsyn till att det finns ett begränsat antal adsorptionsplatser i jordmaterialet. När dessa utrymmen är fyllda, upphör adsorptionen. Isotermen anges ofta enligt följande:

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

eller

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

där

α är en adsorptionskonstant som är relaterad till bindningsenergi
 β är maximala mängden av lösliga ämnen som kan adsorberas av jordmaterialet.

6.3 Nedbrytning

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

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

där

μ_{ref} är referenskoefficienten för nedbrytningshastighet.

$$\mu_{\text{ref}} = \frac{-\ln 2}{\lambda} \quad \text{Ekv. 23}$$

där

λ är halveringstiden för ämnet.

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

6.4 Växtupptag

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

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

där

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

6.5 Monod-liknande reaktioner

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

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

där

k_0	är en konstant
K_h	är en "half-saturation" konstant.

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

6.5 Geokemiska och övriga reaktioner

Många andra kemiska, geokemiska eller biokemiska reaktioner kan förekomma under transport av lösliga ämnen i marken. Kopplingar till en reaktiv modell såsom PHREEQE_C syns ibland på "en projekt till projekt" basis. PHREEQE är ett datorprogram framtaget av USGS (United States Geological Survey) för att modellera geokemiska reaktioner. PHREEQE är baserad på en modell för parning av joner i en lösning vatten och kan beräkna pH, redoxpotential och masstransfer som en funktion av reaktionsprocessen. Sammansättningen hos lösningar i jämvikt med multipla faser kan också beräknas i PHREEQE. Modellen kopplas samman med transportmodellen som en icke-integrerad del och användaren kan själv bestämma komplexiteten i de ingående reaktionerna.

7 Referenser

- Abbott, M.B., Bathurst, J.C., Cunge, J.A., O'Connell, P.E., and Rasmussen, J., 1986: *An introduction to the European Hydrological System - Système Hydrologique Européen*, SHE, 2: Structure of a physically-based, distributed modeling system. *J. Hydrol.*, 87, 61-77.
- Bear, J. and A. Verruijt, 1987: *Modeling Groundwater Flow and Transport*. D. Reidel Pub. Com., Dordrecht, Holland.
- Boesten, J.J.T.I. & van der Linden, A.M.A., 1991. *Modelling the influence of sorption and transformation on pesticide leaching and persistence*. *J. Environ. Qual.*, 20, 425-435.
- Burnett, R.D. and E.O. Frind, 1987: *Simulation of contaminant transport in three dimensions*. 2. Dimensionality Effects. *Water Resour. Res.*, 23(4), 695-705.
- Freeze, R.A., Cherry, J.A., 1979: *Groundwater*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J.
- Konikow, L.F. and D.B. Grove, 1977: *Derivation of Equations describing Solute Transport in Groundwater*, US.G.S. Water Resour. Invest. 77-19.
- Maidment, D.R. (editor), 1992: *Handbook of Hydrology*. McGraw-Hill Inc.
- Scheidegger, A.E., 1961: *General theory of dispersion in porous media*. *Jour. of Geophys. Research*, Vol. 66, no. 10.

Bilaga 3 – Exempel på användning av modeller vid riskbedömning av förorenings-spridning i grundvatten

1 Inledning

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

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

Få exempel finns därför på praktiska projekt. Två utvalda projekt där modellering har tillämpats vid en riskbedömning presenteras i följande kapitel. Ett exempel är taget ifrån Danmark gällande riskbedömning av en avfallsdeponi och ett ifrån Sverige gällande risker kopplade till djupförvaring av använt kärnbränsle. Dessa exempel har valts utifrån önskan att inkludera ett område med sedimentära avlagringar och ett område med kristallin berggrund, då båda dessa typer av geologi återfinns i Sverige.

2 Vigs avfallsdeponi

2.1 Bakgrund

Vigs avfallsdeponi är anlagd i ett tidigare grustag på den västliga delen av Själland vid Stora Bält. Deponin är utformad för att kunna ta emot ca 1 miljon m³ förorenad jord och det har utförts en riskbedömning gällande förorening av grundvatten och recipient i detta område (Bioteknisk Jordrens, 2000 och Soilrem, 2003). Riskbedömningen har fokuserat på utloppet i den primära recipienten, som är Stora Bält (ligger ca 1500 m nedströms deponin) och grundvattenmagasinet direkt under deponin. En lång rad ämnen har inkluderats i riskbedömningen, som i sin tur inkluderar ett antal scenarier för sluttäckning av deponin med varierande täthet.

2.2 Hydrogeologiska och andra fysiska förhållanden

Avfallsdeponin har direkt hydraulisk kontakt med ett övre grundvattenmagasin med relativt stor utsträckning, men med inhomogena hydrogeologiska förhållanden. Grundvattenmagasinet består av sedimentära avlagringar av smältvattensand varvat med andra smältvattenavlagringar och moränlera. Det finns ett nedre grundvattenmagasin som inte förväntas påverkas av deponin. Detta baseras på närvaron av mäktiga och täckande lågpermeabla lerlager mellan de två magasinerna.

Strömningen i det sekundära grundvattenmagasinet är riktad mot Stora Bält. Det har utförts en del fältundersökningar i området i form av undersökningsbrunnar och hydrauliska test. Dessa undersökningar ligger till grund för en enkel konceptuell geologisk modell och uppskattningar gällande hydrauliska förhållanden i grundvattenmagasinen. Det förutsätts att det övre grundvattenmagasinet sträcker sig homogent från deponin till recipienten Stora Bält. De viktigaste parametrarna för magasinet och andra fysiska förhållanden i området anges i Tabell 1.

Tabell 1 Parametervärden för grundvattenmagasin och deponi.

Parameter	Värde
Hydraulisk konduktivitet	$K = 5e-4 \text{ m/s} - 5e-5 \text{ m/s}$
Hydraulisk gradient	$I = 0.005 - 0.01$
Effektiv porositet	$\theta = 0.15$
Mäktighet (grundvattenmagasin)	$D = 10 \text{ m}$
Dispersivitet	$\alpha_L = 5 \text{ m}$
Jordens fyllnad	$\rho_s = 1.6 \text{ t/m}^3$
pH	$\text{pH} = 7$
Organiskt innehåll i grundvattenmagasinet	$F_{oc} = 0.5\%$
Organiskt innehåll i deponerad jord	$F_{oc} = 4.0\%$
Deponins area	$A = 69.000 \text{ m}^2$
Deponins bredd (vinkelrätt mot strömningsriktningen)	$B = 300 \text{ m}$
Nettoinfiltration utan täckning	$N = 250 \text{ mm/år}$

2.3 JAGG-modellen

Modellberäkningarna har utgångspunkt i JAGG-modellen. Den har dock modifierats på flera punkter och använts på ett annat sätt än som ursprungligen var tänkt.

JAGG-modellen är ett beräkningsprogram som har utarbetats i förbindelse med den danska Miljöstyrelsens vägledning kring riskbedömning (Miljøstyrelsen, 1998). JAGG-modellen är utvecklad för att utföra enkla riskbedömningar och för att underlätta genomförandet av de beräkningsrutiner som ingår i en riskbedömning och möjliggöra en grafisk presentation av bedömningsresultaten.

Beräkningsprogrammet kan användas till att riskbedöma förorenade platser utifrån den metodik som beskrivs i vägledningen vid återställning av förorenade platser. Programmet är användarvänligt utformat så att användningen kräver minimal datorkunskap och möjliggör att man själv kan komplettera med data. Programmet är uppdelat i menyer, för vägledning in på konkreta ämnen.

I programmet finns det angivet fysiska och kemiska data för olika förorenande ämnen och gränsvärden för jord, grundvatten och avdunstning. Vidare finns det en hjälpfunktion till varje meny och möjlighet att detaljstudera diverse mellanberäkningar.

Programmet innehåller följande menyer:

- fugacitetsberäkningar, d.v.s. beräkningar av jämviktskoncentrationer mellan gas-, jord- och vattenfas
- avdunstning till utomhus- eller inomhusluft
- produktion och konvektiv spridning av gas från soptipp
- riskbedömning av diffusa jordföroreningar i förhållande till arealanvändning
- riskbedömning av en jordförorening i förhållande till grundvattenresursen
- föroreningsspridning i den omättade zonen
- beräkning av sannolikheten för att lokalisera en jordförorening.

I förbindelse med nuvarande projekt är grundvattenmiljön och den omättade zonen mest relevanta. Programmet innehåller en riskbedömning för grundvattnet som är indelad i tre steg som gradvis nyanseras mer och mer.

Steg 1 inkluderar användandet av en källnära utspädningsmodell, där det räknas med uppblandning i de översta 0.25 m av grundvattenmagasinet omedelbart under föroreningskällan.

Steg 2 inkluderar användandet av en ”från källan avlägsen” utspädningsmodell, där tjockleken på uppblandningen i grundvattenmagasinet bestäms av ett avstånd svarande till att grundvattnet har strömmat ett år, dock maximalt 100 m från föroreningskällan. Principen är att desto längre grundvattnet strömmar, desto större blir uppblandningstjockleken och detta leder till en mindre föroreningskoncentration.

Steg 3 inkluderar effekten av adsorption och nedbrytning i grundvattenmagasinet i bedömningen. Då det är svårt att förutsäga nedbrytningshastigheten, bör det alltid pågå en övervakning av platsen, så att den specifika nedbrytningshastigheten kan bestämmas. Baserat på övervakningsdata kan programmet beräkna nedbrytningshastigheten.

För den omättade zonen kan det i programmet också utföras beräkning av ämnes-spridning via transport av porvatten. Här kan koncentrationen på porvattnet beräknas som en funktion av tid och djup. Då föroreningsspridningen i den omättade zonen endast kan beskrivas ofullständigt, skall resultaten tas med stora förbehåll och koncentrationer och speciellt genombrotts-tider skall endast tolkas som tendenser. Programmet särskiljer mellan ämne-transport vid en pulsmässig tillförsel och ämne-transport med nuvarande ämne-tillförsel.

2.4 Modellberäkningar

Det har utförts modellberäkningar för ett antal tungmetaller (8 st.) och ett antal organiska föreningar (ca 40 st.). En beräkning har utförts omedelbart vid källan och en beräkning vid utloppet vid slutrecipienten.

2.4.1 MODELLERING MED JAGG VID KÄLLAN

Den källnära utspädningsmodellen tar inte hänsyn till adsorption, dispersion, nedbrytning eller utspädande effekter. Det antas att det infiltrerande och perkolerande vattnet blandas i de översta 0.25 m av grundvattenmagasinet och den resulterande koncentrationen bestäms enligt följande ekvation:

$$C_1 = \frac{A \times x \times N \times C_0 + B \times 0.25 \times k \times i \times C_g}{A \times N + B \times 0.25 \times k \times i} \quad \text{Ekv. 1}$$

där

C_0 är källkoncentrationen
 C_g är bakgrundskoncentrationen

övriga parametrar framgår av Tabell 1 ovan.

Formeln används i verkligheten för att bestämma den maximala koncentrationen på infiltrationen, C_0 , ut från gränsvärden för maximalt innehåll av det aktuella ämnet i grundvattnet (C_1). Denna koncentration omräknas efterföljande till ett maximalt innehåll av fast ämne i den deponerade jorden utifrån genomförda urlakande tester. Detta kan således direkt användas som deponeringskriterium för jord.

Vandringshastigheten och – tiden till recipienten bedöms likaså och det utförs betraktningar omkring deponins ”uttömlighet”.

2.4.2 MODELLERING MED JAGG VID RECIPIENT

Länge bort från källan beräknas den resulterande koncentrationen av föroreningskomponenter till en följd av utspädning i grundvattenmagasinet i ett bestämt avstånd från källan. Volymen grundvatten, där det nedsipprande perkolerande vattnet späds ut, beräknas genom att bestämma ett teoretiskt uppblandningsdjup på grund av dispersionseffekter. Ekvationen är härledd för en grundvattentransport på 1 år eller maximalt 100 m, men används här för ett avstånd på 1500 m. Den resulterande koncentrationen beräknas enligt följande:

$$C_2 = \frac{A \times x \times N \times C_0 + B \times d_m \times k \times i \times C_g}{A \times N + B \times d_m \times k \times i} \quad \text{Ekv. 2}$$

där

d_m är uppblandningsdjupet och definieras enligt följande:

$$d_m = \sqrt{0.08 \times \alpha_L \times V_p \times t} = \sqrt{0.08 \times \alpha_L \times L}$$

där

V_p är porvattenhastigheten

L är avståndet till beräkningspunkten.

Om det tas hänsyn till utspädning kommer den resulterande koncentrationen att spädas ut med det infiltrerande vattnet i området nedströms deponin på följande sätt:

$$C_{2,F} = \frac{A_1 \times x \times N \times C_0 + ((B \times d_m \times k \times i + A_2 \times N) \times C_g)}{(A_1 + A_2) \times N + B \times d_m \times k \times i} \quad \text{Ekv. 3}$$

där

A_1 är deponins areal

A_2 är arealen mellan deponin och beräkningspunkten.

Effekten av adsorption och nedbrytning på den resulterande koncentration, har likaså dragits in. Detta har skett genom att dels bedöma transporthastigheten under hänsynstagande till adsorption och därefter har det utförts en beräkning av nedbrytningen under antagandet av en första gradens nedbrytningsprocess, där halveringstiden är bestämd. Hastigheten, V_s , för ett ämne som adsorberas till jordmatri-sen kan beräknas som:

$$V_s = \frac{V_p}{1 + \frac{\rho \times K_d}{\theta}} \quad \text{Ekv. 4}$$

Denna ekvation används till att bestämma transporttiden, t_b , till den aktuella bedämningsplatsen, varefter nedbrytningseffekter bestäms utifrån följande ekvation:

$$C = C_0 \exp(-k \times t_b) \quad \text{Ekv. 5}$$

där

k är nedbrytningskonstanten.

2.4.3 NUMERISK STRÖMNINGS- OCH TRANSPORTMODELL

Som det kommer att framgå av efterföljande text, så är det ett antal organiska föreningar, som ger kritiska värden för maximal koncentration för fast ämne i förhållande till standarden för gällande jordart. I en efterföljande fas har det därför utförts en beräkning med användning av en tvådimensionell numerisk strömnings- och transportmodell (MIKE SHE) för utvalda kritiska ämnen. Modellen antar inte homogena förhållanden för K_d -värden och använder uppmätta koncentrationer för de utvalda kritiska ämnena.

2.5 Resultat

Resultaten är presenterade som tillåtna koncentrationer av källstyrkan och tillåtna koncentrationer av metallerna (inte utspädda). Beräkningarna har genomförts för olika antaganden omkring pH och omkring olika typer av övertäckning av deponin.

För metallerna i undersökningen fås ett resultat som visas i Tabell 2. Som det framgår här är det mycket stor spridning mellan min- och maxvärden och ytterligare undersökningar av de fysiska förhållandena i området skulle klart kunna minska denna spridning.

Tabell 2 Tillåtna koncentrationer av undersökta metaller vid användning av källnära och från källan avlägsen modell med utspädning

Ämne	Källnära modellering [mg/kg]	Modellering vid recipient [mg/kg]
As, Arsenik	3,2-28	8,5-76
Cd, Kadmium	13-41	35-110
Cr, Krom	11	28
Cu, Koppar	7,7-57	19-140
Pb, Bly	82-135	220-340
Zn, Zink	13-420	34-1100

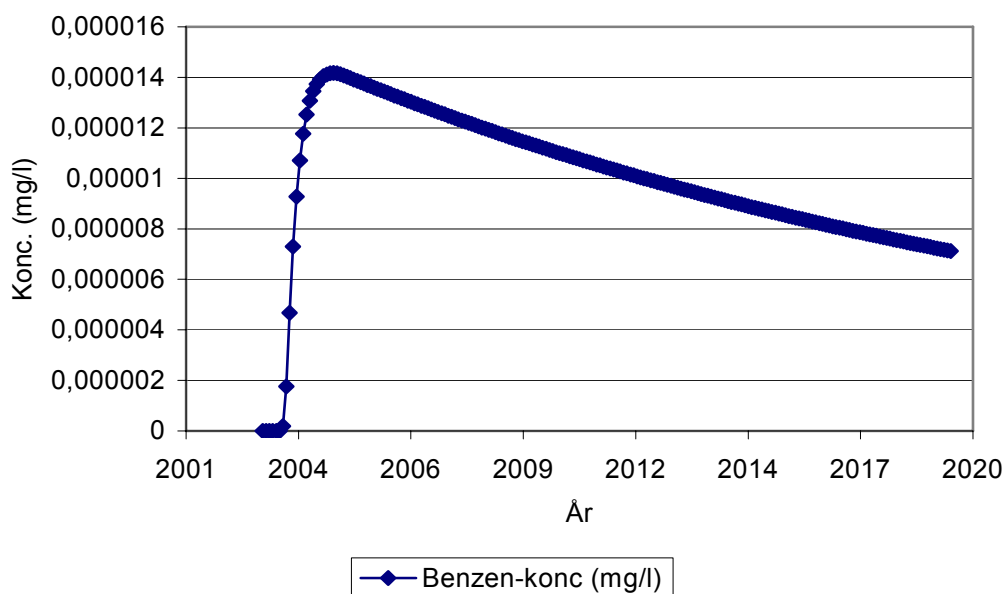
För de organiska ämnena som är inkluderade i undersökningen har det utförts en beräkning av den resulterande koncentrationen vid recipienten utifrån antaganden omkring kring innehållet av olika ämnen i den deponerade jorden (niveau 1 jord, Miljøstyrelsen, 1998). För de ämnen som överskrider gränsvärdena i grundvattnet har det beräknats en maximal tillåten koncentration av infiltrerande vatten som

återigen är omräknad till en koncentration (inte utspädd) hos den deponerade jorden. För de kritiska ämnena presenteras resultaten i Tabell 9-3.

Tabell 3 Tillåtna koncentrationer av utvalda organiska föreningar med användning av källnära och från källan avlägsen modell med utspädning

Ämne	Källnära modellering [mg/kg]	Modellering vid recipient [mg/kg]
Triklöretylen	0,04	0,1
Tetrakloretylen	0,04	0,1
Tetraklormetan	0,04	0,1
Kloroform	0,04	0,1
Klorbensen	0,004	0,01

Resultaten från de numeriska modellberäkningarna presenteras som genombrottskurvor för de utvalda ämnena i ett avstånd på 100 m nedströms deponin.



Figur 1 Genombrottskurva för bensen 100 meter nedströms deponin. Kriteriet för grundvattenkvalitet för bensen är 0,001 mg/l, och överskrids därmed inte.

2.6 Slutsatser

Det har utförts en riskbedömning i anslutning till anläggningen av en soptipp för att ta emot förorenad jord. Bedömningen har omfattat nästan 50 ämnen, både tungmetaller och organiska föreningar, och har inkluderat ett källnära område (grundvattnen) och en recipient (havet).

Baserat på ett relativt magert dataunderlag har det – med användning av relativt enkla beräkningsrutiner – utförts en beräkning av tillåtna koncentrationer i den jord, som skall deponeras. Det har för de utvalda ämnena även utförts en beräkning

av strömnings- och transportförhållanden för att bestämma genombrottskoncentrationer för kritiska ämnen i en referenspunkt 100 m nedströms deponin.

Metoden är snabb och enkel och ger omedelbart de svar som kan läggas till grund för ett godkännande av jord som skall deponeras. Den kan dock relativt enkelt förbättras genom tillämpning av rekommendationerna i efterföljande kapitel.

2.7 Rekommendationer om ytterligare användning av beräkningsmodeller

Som det framgår av slutsatserna är det relativt enkla modellberäkningar som ligger till grund för riskbedömningen. Flera förhållanden kunde med stor fördel ha undersökts närmare med mer avancerade metoder. Det magra dataunderlaget begränsar dock självklart på många sätt en mer avancerad metodik. Förutsättningarna gällande stationära förhållanden och homogenitet är ytterst tvivelaktiga. För det första är heterogeniteten i grundvattenmagasinet av ganska stor betydelse, både vad gäller mäktighet, hydrauliska egenskaper, dispersivitet och hydraulisk gradient. För det andra så är infiltrationen, gradienten och andra randförhållanden naturligtvis inte stationära. Bristen på information kring dessa förhållanden beroende på ett mycket sparsamt mätprogram gör det svårt att ändra antagandena. Följande förhållande kan dock mer detaljerat undersökas:

- användning av en dynamisk två- eller tredimensionell grundvattenmodell för beräkning av flödes- och transportförhållanden skulle naturligtvis ge en mycket mer nyanserad bild av spridningsmönstret för de olika ämnena som undersökts
- i kombination med ovanstående skulle en beräkning av infiltrationens variation över ett eller flera år över området, med användning av parametrar för den deponerade jorden och i utvalda punkter, ge en mycket bättre och mer detaljerad bild av infiltrationsförhållandet och därmed även förhållandet för utspädning i det övre grundvattenmagasinet. Dessa beräkningar kräver som minimum information om daglig nederbörd, potentiell avdunstning, områdets jordarter och markanvändning.
- övriga randförhållanden i grundvattenmodellen kan likaså förbättras
- det skulle kunna utarbetas flera geologiska modeller eller genomföras en Monte Carlo-analys av flödes- och transportförhållanden, där variabiliteten i θ , pH, f_{oc} , K_d och andra parametrar, som kontrollerar transporten av de olika ämnena för att bedöma spridningen i resultatet som en funktion av osäkerheten i dataunderlaget
- användning av en transportmodell med möjlighet för transport av flera ämnen samtidigt, skulle överkomma förenklingen gällande en icke konkurrensmässig adsorption som är inbyggd i den använda modellen, då den beräknas separat för varje enskilt ämne.

Det sparsamma dataunderlaget skulle med fördel kunna utökas med användning av geofysik kombinerat med ett antal brunnar för att undersöka tjockleken och utsträckningen på det övre grundvattenmagasinet.

2.8 Referenser

Bioteknisk Jordrens, 2000. Vig Specialdepot. *Risikovurdering af de miljømæssige konsekvenser for vandmiljøet*. Rapport udarbejdet af DHI – Institut for Vand og Miljø.

Soilrem, 2003. Risikovurdering for Vig Specialdepot. *Beregning af tilladelige udslip og modelberegninger for depot*. Rapport udarbejdet af DHI – Institut for Vand og Miljø.

Miljøstyrelsen, 1998. *Oprydning på forurenede lokaliteter – Hovedbind*. Vejledning fra Miljøstyrelsen (Danmark), no. 6, 1998.

Miljøstyrelsen, 1998. *Oprydning på forurenede lokaliteter – Appendikser*. Vejledning fra Miljøstyrelsen (Danmark), no. 7, 1998.

3 Slutförvar av kärnbränsle

3.1 Bakgrund

Kärnavfall i Sverige hanteras av Svensk Kärnbränslehantering AB, SKB. Inom SKB's program för förvaltning av använt kärnbränsle, finns en mellanlagringsenhet och ett transportsystem redan i bruk. SKB's koncept gällande det slutliga skedet/förvaringen i kärnbränslecykeln är att placera använt kärnbränsle i en gjutjärnsinsats inuti kopparkapslar. Dessa deponeras sedan i ett slutförvar i mättat granitiskt berg och på ett ungefärligt djup av 500 m. Kapslarna omsluts slutligen av bentonitlera. Denna metodik benämns som KBS-3-metoden (SKB, september 2004).

Principiellt återstår två uppgifter i SKB's program. Dessa är lokalisera, bygga och att driva i) det djupa slutförvaret (kan även benämnas djupförvar) och ii) en inkapslingsanläggning, där det använda kärnbränslet placeras i kapslar för deponering i djupförvaret (SKB, september 2004).

SKB ägnar sig för närvarande åt mark/platsundersökningar för ett djupförvar i kommunerna Östhammar (Forsmark) och Oskarshamn. Undersökningarna utförs i två skeden; en inledande fas följd av (om den förväntade platsens lämplighet bekräftas) en komplett undersökningsfas. Målet är att skapa ett djupförvar vid en av dessa kandidaterande platser, förutsatt att berggrunden och andra relevanta förhållanden anses vara lämpliga. En ansökan om att bygga ett djupförvar kommer, enligt nuvarande tidsplan, att göras i slutet av år 2008 (SKB, september 2004).

3.2 Metodik

Dessa två planerade ansökningar/aktiviteter kommer båda att kräva en analys och rapportering med uppgift att utreda den långsiktiga säkerheten för djupförvaret (SKB, september 2004). Den metodik som tillämpas i denna säkerhetsanalys kan i korthet sägas bestå av att försöka besvara ett antal frågor gällande vilka förändringar förvaret kan tänkas genomgå med tiden, till följd av inre processer eller yttre påverkan. Vilka konsekvenser får dessa förändringar för säkerheten? Hur har bristerna i analysens dataunderlag hanterats och vilka konsekvenser får detta för säkerheten? Utgångspunkten i säkerhetsanalysen blir att noggrant beskriva hur djupförvaret för använt kärnbränsle ser ut när det har byggts och förslutits. Därefter kommer förhållandena i förvaret att förändras. Många förlopp är oundvikliga och orsakas av inre processer. En del av dessa är kemiska, till exempel korrosionsangrepp på kapseln. Andra är termiska och beror på att radioaktiviteten i bränslet alstrar värme. Ytterligare några är hydrauliska och har samband med hur grundvatten och gas strömmar. Förändringar i klimatet kan här ha stor betydelse. Påverkan kan också vara mekanisk och orsakas av att berget rör sig. Utöver detta har vi den mänskliga faktorn. Vad skulle hända om säkerheten skulle brista redan vid inkapsling eller deponering av en kapsel? Och vad händer om våra efterkommande får för sig att de skall gräva upp bränslet? Eller råkar stöta på det av misstag? Alla dessa frågeställningar är möjliga scenarier. Att välja rätt scenarier är viktigt och svårt. Tillsammans ska de olika scenarierna ge en rimlig bild av vad som kan tänkas inträffa i framtiden och vilka konsekvenserna blir för förvaret. Komplexiteten ökas

dessutom av att många processer och händelseförlopp är sammankopplade, vilket leder till att matematiska modeller blir ett ovärderligt verktyg i beskrivningen av förvaret idag och tänkbara scenarier i framtiden (www.skb.se).

Frågan är då hur man kan tillämpa matematiska modeller och göra beräkningar utifrån uppenbart osäkra sifferuppgifter, eller rena antaganden, om förhållanden långt in i framtiden? En viktig del i en säkerhetsanalys är att tydliggöra vad vi inte vet, att visa hur brister i dataunderlaget har hanterats och vad de betyder för säkerheten. En del brister är kvalitativa. Har vi tänkt på allt som kan tänkas inträffa? Förstår vi hur och varför de olika förändringarna i förvaret sker? Andra brister är kvantitativa. Hur bra kan vi t.ex. uppskatta hur grundvattnet rör sig i berget?

Både kvalitativa och kvantitativa brister kan ofta hanteras med pessimistiska antaganden. Värsta möjliga fall får sätta gränsen. Detta bidrar i sin tur till att man skapar bättre riktlinjer gällande utformningen av kapsel och säkerhetsbuffert samt till att välja den lämpligaste berggrunden (www.skb.se).

När SKB söker tillstånd för att få bygga inkapslingsanläggningen och djupförvaret blir säkerhetsanalyserna viktiga underlag till ansökningarna. SKB:s senaste säkerhetsanalys kallas SR-97 och publicerades 1999. Nästa säkerhetsanalys SR-Can kommer att vara en del av underlaget till ansökan om att få bygga inkapslingsanläggningen. Målet med SR-Can är att visa att de kopparkapslar som ska förslutas i inkapslingsanläggningen kan ge ett djupförvar som uppfyller myndigheternas krav på säkerhet. SR-Can är alltså en analys av djupförvarets säkerhet – inte av säkerheten i inkapslingsanläggningen. Jämfört med SR-97 så ska beräkningarna i SR-Can grunda sig på data från de inledande platsundersökningarna i Östhammars och Oskarshamns kommuner. Förvaret ska utformas så att det passar de lokala förhållandena på varje plats. SR-Site kommer att vara en del av ansökan att få bygga djupförvaret och kommer att grunda sig på data från den kompletta undersökningen (www.skb.se).

Det första skedet i SR-Can-projektet är att demonstrera den metodik som kommer att tillämpas i förberedelse för den planerade ansökan för inkapslingsanläggningen.

En föreslagen metodik för SR-Can-projektet har publicerats i SKB Technical Report TR-03-08, 'Planning Report for the Safety Assessment SR-Can'. Metodiken föreställer sig användandet av både CPM-modeller (continuum porous medium) och DFN-modeller (discrete fracture network) i olika skalor för att undersöka grundvattenflödet och transporten av radioaktiva isotoper från ett djupförvar till biosfären. Modelleringen måste adressera effekterna av en variabel grundvattendensitet och dynamiska förlopp (transienter) under drift och närliggande faser efter förslutning av djupförvaret. Transienter förekommer naturligt som en konsekvens av förändringar i klimatförhållande (temperatur, periglacial och glacial). Nyckelresultat från modelleringen kommer att vara grundvattenflöde, flödesvägar och värden för parametrar som beskriver transporten av de radioaktiva isotoperna längs flödesvägarna. Slutligen kommer resultaten från grundvattenmodelleringen att ingå i beräkningar av de radiologiska riskerna för mänskligheten.

SKB's metodik refererar till modellering på tre skalor:

- regional (~10 km)
- lokal (~1 km)
- djupförvar/block (10-100 m)

Vid tillämpning av modeller på dessa skalor är det nödvändigt att simulera transient, densitetsvariabelt grundvattenflöde på tillräcklig detaljnivå för att kunna bestämma grundvattenflöde och transportvägarna för radioaktiva isotoper. T.ex. flöde från deponeringsschakt till närliggande småskaliga sprickor representerar en transportväg för radioaktiva isotoper till geosfären. Vidare transport genom sprickor av större skala är troligtvis transportvägen för de radioaktiva isotoperna ut i biosfären (SKB, september 2004).

Projektets fokus har varit att illustrera och testa metodiken för geosfären för perioden efter förslutning (d.v.s. mellan nutid och 10 000 år efter nutid) i syfte att göra en riskbedömning (SKB, september 2004).

För att demonstrera den av SKB föreslagna metodiken för grundvattenflöde och transport, har en serie nästlade modeller etablerats med Serco Assurance's CONNECTFLOW (SKB, september 2004). CONNECTFLOW är ett verktyg för modellering av grundvattenflöde och transport genom porösa och spruckna media (www.sercoassurance.com/ea/groundwater/conflow.htm).

Dessa modeller är:

- en regional CPM-modell med deterministiska storskaliga sprickzoner och hydrogeologiska egenskaper enligt den pågående Forsmark version 1.1. Syftet med denna modell är att studera transienter och förse modeller på mindre skala med randförhållanden
- en lokal DFN-modell nästlad inom den regionala CPM-modellen ovan för att beräkna långväga transportvägar, men även för att fånga de detaljerade transportvägarna omedelbart runt djupförvaret
- en CPM-modell för deponeringsschakt, EDZ (engineered damage zone) och deponeringstunnlar nästlad inom en DFN-modell i kapselskala. Denna modell används för att utföra detaljerade beräkningar av grundvattenflöde närliggande till kapslar och EDZ.

Utdata/resultat från dessa modeller har använts för att beräkna t.ex. kapselflöde, transporttid och platser för utströmning, som i sin tur behövs som indata till beräkning och värdering av säkerhet (SKB, september 2004).

3.3 Indata

3.3.1 FORSMARK VERSION 1.1 - KONCEPTUELL SPRICKMODELL

Indata som har använts i denna exemplifiering kommer från Forsmark i Östhammars kommun och benämns som Forsmark version 1.1. Dessa data är preliminära och platsen undersöks för närvarande av SKB som en av kandidatplatserna för ett KBS-3-förvar. Ännu är dock inte dataunderlaget tillräckligt för att tillåta en säkerhetsbedömning av Forsmark (SKB, september 2004).

Utifrån dessa sprickdata har det i Forsmark version 1.1 etablerats en konceptuell modell med beskrivning av sprickegenskaper. Datatolkningen som ligger bakom denna modell är primärt baserad på data från ett borrhål, KFM01A, vilket förklarar tonvikten på metodik och inte på ett platsspecifikt koncept. Tanken är alltså att använda data från Forsmark version 1.1 som en illustration av den föreslagna metodiken och att genomföra en fullständig studie ledande till beräkningar för säkerhetsbedömning (SKB, september 2004).

Den konceptuella modellen beskriver en hierarki av sprickor på olika skalor. Hänsyn har tagits till tillämpbarhet för både modellering av grundvattenflöde och transport vid de olika skalorna: kapsel (0.5 m till 10 m), lokal (10 m till 100 m) och regional (100 m till 1000 m). Denna hänsyn syftar till att visa vilka ungefärliga modellskalor som kommer att ge en tillräcklig representation av nyckelresultat och praktiska aspekter såsom storleken på de numeriska modellerna (antal sprickor och/eller element) (SKB, september 2004).

Vissa av nyckelparametrarna rörande spricktolkningen reviderades i Forsmark version 1.1-projektet samtidigt som detta modelleringsprojekt utfördes. Det finns därför två uppsättningar data gällande sprickparametrar. På grund av karaktären på dessa data har därför tonvikt även lagts på att uppskatta betydelsen av skala vid etablering av en konceptuell sprickmodell från sprickdata samt innebörden av DFN-parametrisering för beräkning av grundvattenflöde och transport. Vilka kan effekterna vara av förändringar i den konceptuella DFN-modellen (SKB, september 2004)?

Förutom DFN-parametrar har en beskrivning av djupförvaret inkluderats. Denna beskrivning specificerar dimensionen på och mellanrummet mellan deponeringsschakten, djupförvarets layout, kapslars placering och parametrar för fyllnads-material (SKB, september 2004).

3.3.2 DFN-PARAMETRAR

Två uppsättningar DFN-parametrar har etablerats, på grund av de två befintliga uppsättningarna av sprickdata, en som motsvarar den ursprungliga respektive uppdaterade versionen av Forsmark version 1.1 (SKB, september 2004).

En nyckelparameter är intensiteten hos öppna sprickor som är potentiella hydrauliska ledare. P32 specificerar sprickarean per volymenhet och är oberoende av spricklängd och orientering. Sprickorna som är representerade i version 1.1 härrör ifrån analys av borrhärnor och det antas att alla naturliga brytningar överensstämmer med öppna konduktiva sprickor. Fördelningen av öppna sprickor med djupet har tolkats vara bitvis konstant med ett distinkt hopp vid 400 m djup. Ett värde för

P32 har alltså angivits ner till 400 m djup och värde för store djup än så. För denna studies syfte måste sprickor betrakta på olika skalor och det är därför nödvändigt att beräkna sprickintensiteten för olika spricklängder (SKB, september 2004).

Det föreslagna djupet för djupförvaret är 400 m. Detta överensstämmer med det valda djup där det sker en distinkt förändring i sprickdensitet. Detta leder till att färre småskaliga sprickor kommer att skära deponeringsschakten under 400 m än deponeringstunnlarna som ligger strax ovanför 400 m djup. För att undvika en stark diskontinuitet i P32-värde i anslutning till djupförvaret har ett extra lager intolkats kring djupförvaret. Mellan 300 och 500 m djup har ett P32-värde tillämpats och beräknats som ett medelvärde av ovanstående och underliggande lager (SKB, september 2004).

För Forsmark version 1.1 är hypotesen att spricktransmissiviteten är direkt korrelerad till spricklängden. Kopplingen mellan spricktransmissiviteten och sprickstorleken leder till ett flödessystem som på varje skala styrs av den största sprickenheten på den skalan. De stora sprickorna är huvudbidragaren till spricknätverkets konduktivitet. Stora sprickenheter är generellt både bredare och tjockare än småskaliga sprickor. Förväntade egenskaper hos en DFN-modell med denna koppling mellan transmissivitet och längd är att stora sprickor kommer att dominera flödet lokalt, medan de tätare sprickorna förser systemet med en hydraulisk konduktivitet i bakgrunden. Resultatet blir alltså att flöde och transport tenderar att kanaliseras mot större sprickor. Partiklar som frisläpps i ett sådant nätverk kommer att kanaliseras mot större sprickor med högre flödeshastigheter, transporten kommer alltså att följa ett dendritiskt mönster (SKB, september 2004).

Den slutliga nyckelparametern för är transportaperturen, som när den kombineras med sprickarean ger sprickvolymen uppskattad av transport (SKB, september 2004).

3.4 Modeller

Det övergripande syftet är att etablera en regional CPM-modell med en nästlad DFN-modell kring djupförvaret för att bedöma transportvägar vid ett flertal tidpunkter i ett transient strömningsfält. Perioden efter förvarets förslutning är av intresse, vilket motsvarar år 2000-12000. Modellberäkningar utförs för denna period (SKB, september 2004).

3.3.4 REGIONAL CPM-MODELL

3.3.4.1 Modellbeskrivning

Angreppssättet har varit att med CONNECTFLOW etablera en regional CPM-modell. För att parametersätta CPM-modellen med den tillgängliga sprickdatan i Forsmark version 1.1, etablerades även en regional DFN-modell med stokastiskt genererade sprickor och identifierad deterministisk karakteristik. Den regionala DFN-modellen har endast till syfte att uppskalera permeabiliteten för användning i den regionala CPM-modellen (SKB, september 2004).

Modellområdets laterala gränser sammanfaller med olika hydrologiska strukturer såsom vattendelare, större sprickzoner eller djupa gravar till havs. Det antas att de strukturer som används som laterala gränser även kan tillämpas som gräns för grundvattenflöde. De laterala randförhållandena är därför impermeabla och tillåter inte att något grundvatten kan passera in eller ut över gränsen. Modellens botten definieras av ett visst djup från markytan. Modellen sträcker sig ner till ett djup på 2300 m. Sprickzonerna når ner till ett djup på 2100 m. Längs modellens botten råder impermeabla förhållanden med en specificerad salinitet på 10 % (salt mass fraction). Inget grundvatten kan strömma genom denna rand, men salinitet kan passera genom diffusion. Den högsta salinitetsnivån i modellen finns längs denna rand. Två olika randförhållanden har använts för modellens övre kant, en för regioner under havsnivå och en för landområden. Observera dock att randförhållandet här varierar med kustlinjens migration. Vid år 2000 är omkring en tredjedel av modellen ovan havsnivå och vid år 12000 är hela ytan ovan havsnivå (SKB, september 2004).

Modellens lagerföljd följer topografin ner till ett djup på 400 m. Därefter är lagerföljden horisontell. Beräkningselementen är i huvudsak 100x100x100 m. Det översta lagret (täckande hela modellområdet) som representerar kvartära avlagringar har dock en mäktighet på 3 m och ett underliggande lager har en mäktighet på 10 m. Båda dessa lager har högre konduktiviteter än det underliggande spruckna berget (SKB, september 2004).

3.3.4.2 Modellberäkningar av grundvattenflöde och transport

Efter att ha definierat de drivande krafterna bakom grundvattenflödet och utfört modellberäkningar för grundvattenflöde vid ett antal representativa tidpunkter, är det möjligt att utföra transportberäkningar d.v.s. partikelspårningar i CPM-modellen. För att demonstrera metodiken har 604 platser för kapselförvaring använts som startpunkter vid utsläpp av partiklar. Partikelspårningen utfördes med ett strömningsfält beräknat för år 2500 (SKB, september 2004).

Resultaten från denna partikelspårning visar en viss klumpning av partiklar längs en av de högpermeabla sprickzonerna, men i huvudsak är partikelspridningen bred. Den högpermeabla sprickzonen fungerar som en rutt ledande ut ur modellen för denna ansamling av partiklar. Partiklarnas transporttider varierar också signifikant, från omkring 1000 till 100000 år (SKB, september 2004).

En liknande beräkning har utförts för år 12000. Samma antal punkter användes för att släppa partiklar. Jämfört med resultaten från beräkningen ovan med ett strömningsfält för år 2500 så är sannolikheten större att fler partiklar strömmar ur modellen direkt ovanför djupförvaret. Påverkan av den högpermeabla sprickzonen är fortfarande tydlig fast med en mindre ansamling partiklar. Fler partiklar sprids nordöst om djupförvaret än under tidigare beräkning (SKB, september 2004).

Resultat ovan har erhållits genom en ren användning av den regionala CPM-modellen. På grund av de stokastiska inslagen i den regionala DFN-modellen som CPM-parametrarna härrör ifrån, är det möjligt att uppskalningen från ett annat utförande av DFN-modellen skulle skapa en CPM-modell med andra flödes- och transportegenskaper. För att testa denna osäkerhet genererades en alternativ CPM-

modell utifrån samma grunddata. Trots att den deterministiska sprickdatan är identisk för båda uppsättningarna av CPM-modellerna så varierar de uppskalade permeabiliteterna från den regionala DFN-modellen från modell till modell. Därför kommer överlagringen av de deterministiska egenskaperna hos de uppskalade parametrarna att leda till att specifika celler kommer att ha olika egenskaper i de olika uppsättningarna. Detta reflekteras i tryckfördelningen och påverkar därför partikelspårningen (SKB, september 2004).

3.3.5 NÄSTLAD CPM/DFN-MODELL

3.3.5.1 Modellbeskrivning

För att förbättra representationen av flöde och transport i den omedelbara regionen som omger djupförvaret, har en del av den regionala CPM-modellen ersatts med en lokal DFN-modell. DFN-modellen täcker ett område på 3800x5200x1000 m som inkluderar hela djupförvaret och regionala sprickor med en längd på 1000 m ner till 50 m. Lokala sprickor med en längd mellan 50 m och 12.5 m har inkluderats i ett 60 m tjockt lager runt djupförvaret. Djupförvarets tunnelsystem har i DFN-modellen beskrivits som vertikala sprickor men en likvärdig transmissivitet för att representera återfylld tunnel med en specifik hydraulisk konduktivitet och area (tvärsektion). Dessa tunnelsprickor kommer att utbyta flöde med det omkringliggande spricksystemet. Genom att tillämpa denna representation är det möjligt att spåra partiklar som släpps inom djupförvaret. Permeabla drag som sträcker sig över CPM-modellen från sydöst till nordväst sammanfaller med deterministiska sprickor. Den lokala DFN-modellen ligger mellan dessa sprickzoner, men skärs av ett antal andra deterministiska sprickzoner som är inkluderade i DFN-modellen. Huvuddelen av sprickorna i DFN-modellen är små med relativt låg transmissivitet.

De deterministiska sprickzonerna skär djupförvaret. Ännu fler skärningar finns mellan de mindre sprickzonerna och tunnlarna. För att ge en förbättrad representation av den lokala partikeltransporten har därför en förfinad sprickspecifikation i en zon inom DFN-modellen nära tunnlarna. Denna förfinade zon täcker ett begränsat område, både vertikalt och horisontellt. Genom denna förbättring kan partiklar spåras genom småskaliga sprickor till intermediära spricksystem och storskaliga sprickor, in i de deterministiska sprickorna och slutligen in och genom CPM-modellen (SKB, september 2004).

3.3.5.2 Modellberäkningar av grundvattenflöde och transport

Kvasistationärt flödestillstånd beräknas i den nästlade CPM/DFN-modellen med användandet av en salinitetsfördelning interpolerad från en fullt transient CPM-modell (tidigare etablerad i projekt utanför SR-Can) vid ett antal olika tidpunkter, år 2500 och år 12000. Observera att vattnets densitet antas i DFN-modellen att vara konstant. Detta är en begränsning i den nuvarande implementeringen. I CPM-delen hålls saliniteten till ett värde som beräknats enligt tidigare beskrivning ovan. Salinitet och vattendensitet har därför fasta fördelningar i CPM-delen, däremot beräknades tryck och flöde i den nästlade modellen och kontinuerligt över modellgränserna. För att dock försäkra att den korrekta drivkraften för flöde eller potential till-

lämpades i DFN-delen, så anpassades kontinuitetsekvationen för samverkan mellan CPM/DFN att ta hänsyn för variabel densitet (SKB, september 2004).

Efter modellberäkningar av grundvattenflöde och tryckfördelning som beskrivs ovan utfördes partikelspårningar för 5026 platser för kapselförvaring. Liksom tidigare partikelspårningar så visar även dessa resultat att påverkan av de deterministiska sprickzonerna är tydlig för fördelningen av partiklarnas utströmning (SKB, september 2004).

3.3.6 NÄSTLAD DFN/CPM-MODELL PÅ KAPSELSKALA

3.3.6.1 Modellbeskrivning

Syftet här är att konstruera en DFN-modell på kapselskala med en nästlad CPM-representation av tunnlar, deponeringshål och EDZ. För att demonstrera metodiken har DFN-modellen begränsats till en del av djupförvaret som innefattar 604 kapslar och 14 tunnlar. Bentonitleran och kapslarna är inte tydligt representerade. Istället tillämpas en låg konduktivitet 10-10 m/s vid dessa element. Modellen har en måktighet på 100 m och täcker ett område motsvarande 590x410 m (SKB, september 2004).

CONNECTFLOW-modellen består av en CPM-modell som beskriver djupförvarets struktur inom en DFN-modell med sprickor ner till en längd på 3.5 m som skär kapslarna. Alla sprickor med en längd längre än 12.5 m har importerats från tidigare DFN-modeller. Extra sprickor med en längd mellan 3.5 m och 12.5 m har inkluderats i ett 60 m tjockt lager mellan $z=-370$ och $z=-430$, vilket skapar överensstämmelse med modellerna på större skala. Väldigt få kapslar är helt isolerade ifrån spricksystemet (SKB, september 2004).

Det översiktliga syftet för nästa fas av SR-Can är att ta fram en metod som möjliggör hänsynstagande åt alla 5026 kapslar i djupförvaret (SKB, september 2004).

3.3.6.2 Modellberäkningar av grundvattenflöde och transport

Modellen har använts för att beräkna grundvattenflöde vid olika tidpunkter. Modelleringen är baserad på stationära beräkningar, men randförhållanden överförda från den regionala CPM-modellen (transient) vid lämpliga tidpunkter (SKB, september 2004).

Efter beräkningarna av grundvattenflöde har partikelspårningar genom kapselmodellen utförts. Totalt har 604 partiklar frisläppts, en för vardera kapsel. Partiklarna har spårats genom modellen till randen utifrån ett flödesfält beräknat för år 2500. Partikelspårningen har sedan i den regionala modellen omstartats. Partiklarna har då haft den position de hade då de lämnade kapselmodellen. Härifrån har de sedan spårats genom den regionala modellen. Återigen visar resultaten att de stora deterministiska sprickorna har stor påverkan (SKB, september 2004).

Motsvarande beräkning utfördes sedan med ett flödesfält beräknat för år 12000. Flödesfältet har förändrats markant mellan år 2500 och år 12000 vilket reflekteras i partikelspårningen (SKB, september 2004).

3.5 Slutsatser

Den föreslagna metodiken i SKB Technical Report TR-03-08, 'Planning Report for the Safety Assessment SR-Can' föreställer sig användandet av modeller i olika skalor för att undersöka grundvattenflödet och transporten av radioaktiva isotoper från ett djupförvar till biosfären. Modelleringen måste adressera effekterna av en variabel grundvattensdensitet och av förändringar i klimatförhållande under perioden år 2000-12000 efter förslutning av djupförvaret. Resultaten från grundvattenmodelleringen syftar sedan att ingå i beräkningar av de radiologiska riskerna för mänskligheten (SKB, september 2004).

Denna metodik har illustrerats med alternativa tolkningar av sprickdata från Forsmark version 1.1. Illustrationen har inkluderat den kompletta modellkedjan från sprickdata, analys och etablering av konceptuell sprickmodell, etablering av modell för regional hydrologi till användandet av detaljerade nästlade modeller för att beräkna riskerna på olika skalor, vilket i sin tur krävs av en säkerhetsbedömning. Metodiken har visat sig vara medgörlig och producera mer realistiska och detaljerade fördelningar av risker än som har varit möjligt tidigare. Ett antal scenarier har beaktats inklusive partikelspårningar från kapslar vid olika tidpunkter, olika fyllnadsmaterial och olika tolkningar av underliggande sprickdata. Detta demonstrerar styrka och flexibilitet i metodiken (SKB, september 2004).

Projektets fokus har varit att illustrera och testa metodiken som beskrivs ovan och man har under arbetets gång tvingats till vissa approximeringar. Ett centralt tema i all metodik gällande riskbedömningar är hantering av olika typer av osäkerheter. Viktigt är att tydliggöra vad vi inte vet, att visa hur brister eller approximeringar i dataunderlaget har hanterats och vad de betyder för säkerheten. Den testade metodiken visar ett hanterbart sätt att fördjupa sig i dessa osäkerheter och deras innebörd samt att utforma en anpassad buffert vid riskbedömningen.

3.6 Referenser

SKB, september 2004. *Groundwater flow and radionuclide transport modelling using CONNECTFLOW in support of the SR-Can assessment*. SKB R-04-61

SKB, augusti 2004. *Interim main report of the safety assessment SR-Can*. SKB Technical Report TR-04-11

SKB, juni 2003. *Planning report for the safety assessment SR-Can*. Technical Report TR-03-08

<http://www.skb.se>

Bilaga 4 - Begrepp, termer och förkortningar

Begrepp och termer

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

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

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

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

	t.ex. uppumpning eller återföring av grundvatten inuti en modell.
Salinitet	Salthalt
Sluten akvifer	En avgränsad akvifer med en grundvattenyta särskild (ofta under övertryck) från den omkringliggande fria grundvattenytan
Stationär beräkning/simulering	Beräkning som tar hänsyn till fluktuationer beroende på t.ex. säsong
Stationärt (grundvatten)flöde	Konstant flöde, motsats till transient, se Transient flöde
Stokastisk	Slumpmässig (statistiskt sett)
Stokastisk modell	se Stokastisk, identiska indata kan resultera i olika resultat
Strömningsfält	se Flödesfält
Transient	Dynamiskt förlopp, fluktuerande, varierande beroende på t.ex. naturliga säsong- eller klimatvariationer eller mänskligt inducerad påverkan t.ex. konstgjord infiltration
Transient (grundvatten)flöde	Fluktuerande, varierande d.v.s. icke stationärt flöde, se Transient
Transmissivitet	Summan av permeabiliteterna i hoas alla i lagerföljden ingående lager
Transpiration	Avdunstning via växternas klyvöppningar i bladen
Transportmodellering	se Partikelspårning
Vattenbalans	Ett avrinningsområdes (eller del av område) vattenbudget
Vattendelare	Höjdlinje över vilken inget flöde sker (topografisk eller grundvattendelare)
Vattenföring	Vattenflöde
Ytvatten	Vatten i sjöar, pölar och vattendrag
Ytvattenmodell	En modell som beräknar/simulerar processer i sjöar, pölar och vattendrag etc.
Öppen akvifer	Akvifer med fri grundvattenyta

Förkortningar

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

Datormodeller för förorenings-spridning fas 1

RAPPORT 5534

NATURVÅRDSVERKET
ISBN 91-620-5534-8
ISSN 0282-7298

Användning av datormodeller som stöd för riskbedömning av förorenings-spridning i mark- och grundvatten har på senare tid ökat. Modellerna blir mer och mer avancerade och komplexa och utmärker sig genom att kunna sammanställa data på ett konsistent och sammanhängande sätt.

Rapporten berör olika datormodellers begränsningar och lämplighet vid riskbedömning av förorenings-spridning och ger på så vis en överblick över tillgängliga modeller. Därutöver är det inkluderat en beskrivning av matematiska fundament för strömning, ämne-transport och reaktiv omsättning samt en beskrivning av två modelleringsprojekt, där modeller har använts i samband med en riskbedömning.

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

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

