

# Utvärdering av beräkningsmodellen i Spridning Mark 1.1

RIB

Elin Alsterhag, Räddningsverket

April 2006



Räddningsverkets kontaktperson:  
Anders Lundberg, RIB-enheten, 054 – 13 52 59



# Innehållsförteckning

<b>1. Bakgrund</b>	<b>9</b>
<b>2. Metod</b>	<b>10</b>
Scenarier	10
Indata till TOUGH/T2VOC	11
Rutsystem	11
Kemikalie	12
Jord	12
Simulering i TOUGH/T2VOC	12
Resultat från TOUGH/T2VOC	13
Tid tills kemikaliefas når grundvattnet	13
Horisontell transport av vattenlöst kemikalie i grundvattnet	14
Retention av kemikaliefas	14
Indata till Spridning Mark	14
<b>3. Resultat</b>	<b>17</b>
Tid tills kemikaliefas når grundvattnet	17
Sand	17
Grov silt	17
Horisontell transport av vattenlöst kemikalie i grundvattnet	18
Sand	18
Grov silt	21
Retention av kemikaliefas	23
Sand	23
Grov silt	25
<b>4. Diskussion</b>	<b>28</b>
<b>5. Referenser</b>	<b>29</b>
<b>Bilagor</b>	<b>30</b>
Bilaga 1. Cylindriska rutssystem	31
Bilaga 2. 3D-rutssystem sand	32
Bilaga 3. 3D-rutssystem grov silt	33
Bilaga 4. Kemikaliedata i TOUGH/T2VOC	34
Bilaga 5. Jordartsdata i TOUGH/T2VOC	35
Bilaga 6. Atmosfärsvillkor i TOUGH/T2VOC	36
Bilaga 7. Injektionslager i TOUGH/T2VOC	37



# Evaluation of calculations in the RIB tool Transport in Soil 1.1

## Abstract

In 2005 the Swedish Rescue Services Agency performed an evaluation of the transport model used in the RIB tool *Transport in Soil 1.1*. The evaluation was made in cooperation with the Department of Earth Sciences at Uppsala University and is described in this report.

Calculations in *Transport in Soil 1.1* of NAPL's vertical transport, time to NAPL contamination of ground water, horizontal transport of the aqueous phase and retention of NAPL were evaluated through comparison with the numerical three phase model TOUGH/T2VOC.

A number of scenarios with releases of gasoline in sand and silty loam were simulated with both models, and the results were compared. If the result from TOUGH/T2VOC was in the range of  $\pm 50\%$  of the *Transport in Soil* result, the performance of *Transport in Soil* was considered satisfactory.

The evaluation shows that the performance of *Transport in Soil 1.1* is satisfactory, given correct input data.

**Key words:** Transport in Soil, RIB, Swedish Rescue Services Agency, Transport model, Evaluation



# Sammanfattning

2005 utförde Räddningsverket en utvärdering av beräkningsmodellen som används i *Spridning Mark 1.1*. Utvärderingen utfördes i samarbete med institutionen för geovetenskaper vid Uppsala universitet och redovisas i denna rapport.

Beräkning i *Spridning Mark* av tid tills kemikaliefasen når grundvattnet, kemikaliefasens vertikala transport, horisontell transport av vattenlöst kemikalie samt retention av kemikaliefas utvärderades genom jämförelse med den numeriska trefasmodellen TOUGH/T2VOC.

Ett antal scenarier med utsläpp av bensin i sand och grov silt simulerades i de båda modellerna och resultaten jämfördes. Om resultatet från TOUGH/T2VOC låg inom ett 50-procent intervall kring beräknat värde från *Spridning Mark*, ansågs *Spridning Mark* ge ett tillräckligt noggrant resultat.

Utvärderingen visar att *Spridning Mark* ger tillfredställande noggrannhet, förutsatt korrekt indata.

**Nyckelord:** Spridning Mark, RIB, Räddningsverket, Beräkningsmodell, Utvärdering





# 1. Bakgrund

Beräkningprogrammet *Spridning Mark 1.1* i RIB baseras på den beräkningmodell som presenteras i programmets hjälpfil. Denna rapport beskriver den utvärdering av beräkningsmodellen som utfördes 2005 av Elin Alsterhag på Räddningsverket i samarbete med Fritjof Fagerlund och Auli Niemi vid institutionen för geovetenskaper, Uppsala universitet.

Syftet med utvärderingen var att avgöra om beräkningmodellen ger ett för ändamålet tillräckligt noggrant resultat, förutsatt korrekt indata. Med ändamål avses användning i programvaran *Spridning Mark* vilken ska ge en grov uppskattning av petroleumprodukters transport i homogen jord efter ett utsläpp. Programmet ska kunna användas av räddningstjänst och miljökontor vid räddningsinsatser till följd av petroleumutsläpp samt av miljökontor vid tillsyn av mindre objekt som hanterar eller lagrar petroleumprodukter.

## 2. Metod

Brist på mätdata från fält och lämplig laboratorieutrustning ligger till grund för valet av metod vid utvärderingen; jämförelse med den mer avancerade modellen TOUGH/T2VOC. TOUGH/T2VOC är en numerisk spridningsmodell för trefasflöden som utvecklats vid Lawrence Berkeley Laboratory (Falta m.fl., 1995) och används bland annat vid institutionen för geovetenskaper, Uppsala universitet. Vid simuleringarna används det grafiska användargränssnittet PetraSim.

Ett antal scenarier med samma indata simulerades i *Spridning Mark* samt TOUGH/T2VOC och resultaten jämförs. De parametrar som utvärderas är:

- Tid tills kemikaliefas når grundvattnet
- Horisontell transport av vattenlöst kemikalie i grundvattnet
- Retention av kemikaliefas

Enligt intervjuer med representanter från de båda målgrupperna, räddningstjänstpersonal och miljöinspektörer, är ett resultat angivet som  $x \pm 0,5x$  i *Spridning Mark* tillräckligt noggrant. I utvärderingen bildas därför ett 50-procentigt intervall kring utdata från *Spridning Mark* och om resultatet från TOUGH/T2VOC ligger inom detta anses resultatet från *Spridning Mark* vara tillräckligt noggrant.

*Spridning Mark* innehåller ytterligare två utparametrar; vertikal transport av kemikaliefas samt evaporation av kemikalie från markytan. Vertikal transport av kemikaliefas utvärderas indirekt genom fasens tid till grundvattnet. Om tid tills kemikaliefasen når grundvattnet i *Spridning Mark* bedöms som tillräckligt noggrann anses även kemikaliefasens vertikala transport vara tillräckligt noggrann. Evaporation från markytan ingår inte i TOUGH/T2VOC och av den anledningen utvärderas inte evaporation i den här studien. Evaporationen anses vara av sekundär betydelse för programmets målgrupp och därför är inte en separat utvärdering motiverad.

### Scenarier

Scenarier med utsläpp av bensen i sand och grov silt ligger till grund för utvärderingen och simulering utförs för de första två dyggen efter utsläppet.

För utvärdering av tid tills kemikaliefasen når grundvattnet sattes tvådimensionella cylindriska modeller upp i TOUGH/T2VOC. Djup till grundvattnet, jordart samt utsläppt volym varierades enligt tabell 1.

**Tabell 1.** Studerade scenarier för utvärdering av tid tills kemikaliefas når grundvattnet

	<b>Sand</b>	<b>Grov silt</b>
<b>Ca 2 m till grundvattnet</b>	1 m <sup>3</sup> , 10 m <sup>3</sup>	1 m <sup>3</sup>
<b>Ca 4 m till grundvattnet</b>	1 m <sup>3</sup> , 10 m <sup>3</sup>	10 m <sup>3</sup>

För utvärdering av horisontell transport av vattenlöst kemikalie i grundvattnet samt retention av kemikaliefas sattes tredimensionella modeller upp i TOUGH/T2VOC. Jordart, grundvattenytans lutning samt utsläppt volym varierades enligt tabell 2.

**Tabell 2.** Studerade scenarier för utvärdering av horisontell transport av vattenlöst kemikalie samt retention av kemikaliefas

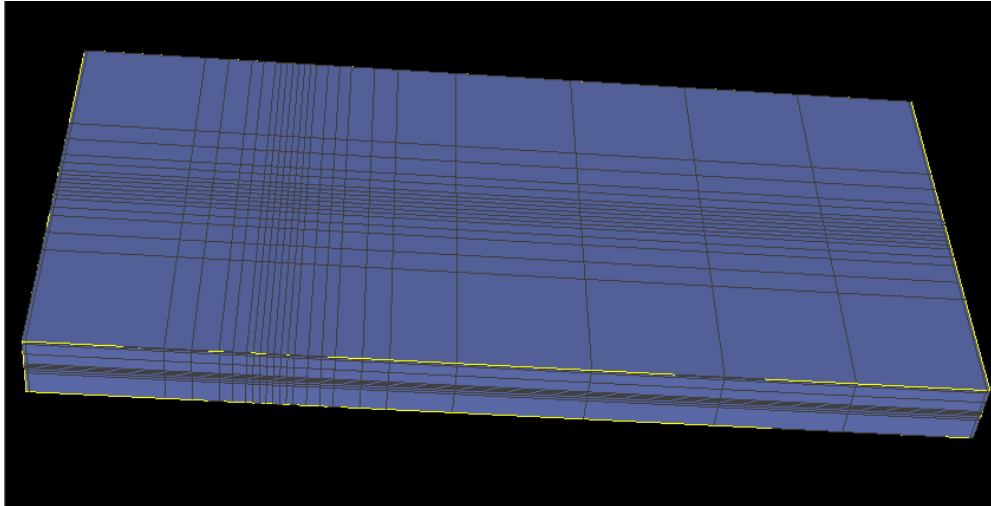
	<b>Sand</b>	<b>Grov silt</b>
<b>1 % grundvattenlutning</b>	1 m <sup>3</sup> , 5 m <sup>3</sup> , 10 m <sup>3</sup>	1 m <sup>3</sup> , 5 m <sup>3</sup> , 10 m <sup>3</sup>
<b>5 % grundvattenlutning</b>	1 m <sup>3</sup>	-

## Indata till TOUGH/T2VOC

### Rutssystem

I bilaga 1 presenteras diskretiseringen av de rutssystem som bygger upp de cylindriska modeller vilka används vid utvärdering av tid tills kemikaliefasen når grundvattnet. Rutssystemen består av ett antal cylindriska block som beskrivs av ett tvådimensionellt cylindriskt koordinatsystem, där  $r$  betecknar horisontellt avstånd från centrum av utsläppet till en punkt, och  $z$  betecknar vertikalt avstånd från centrum av utsläppet till en punkt.

De rutssystem som bygger upp de tredimensionella modellerna, vilka används vid utvärdering av kemikaliefasens retention och transport av vattenlöst kemikalie, beskrivs av ett kartesiskt koordinatsystem.  $x$ -axeln är parallell med grundvattenytan och riktad längs grundvattenströmningen. Även  $y$ -axeln är parallell med grundvattenytan men riktad vinkelrätt mot grundvattenströmningen, medan  $z$ -axeln är vinkelrät mot grundvattenplanet. För att öka noggrannheten och samtidigt få rimlig simulerings tid är diskretiseringen finast kring utsläppspunkten och längs grundvattenytan, medan den är grövre längre ut i rutssystemen, se figur 1. I bilaga 2 och 3 presenteras de tredimensionella rutssystemen för sand respektive grov silt.



**Figur 1.** Tredimensionellt rutsystem för grov silt med finare diskretisering kring utsläppspunkt och längs grundvattenytan.

## Kemikalie

Indata för föreningen bensin används så långt som möjligt. Då data saknas för föreningen som helhet antas heptan representera bensin, eftersom *equivalent carbon number* för både bensin och heptan är sju och att de därmed anses ha liknande egenskaper. För några få inparametrar används värden för en generell organisk förening. Samtliga indata för utsläppet redovisas i bilaga 4.

## Jord

De parametrar som krävs för att beskriva jordarter i TOUGH/T2VOC samt de värden som används för sand och grov silt presenteras i bilaga 5. Det översta lagret i modellerna motsvarar ett atmosfärsvillkor och de värden som använts presenteras i bilaga 6. För att efterlikna den laterala spridningen som i verkligheten sker på markytan skapades injektionslager vars egenskaper redovisas i bilaga 7. I de tredimensionella modellerna utgör ett lager under atmosfärsvillkoret injektionslager och i de cylindriska modellerna utgör två lager under atmosfärsvillkoret injektionslager.

## Simulering i TOUGH/T2VOC

Simuleringen som används vid utvärdering av tid tills kemikaliefasen når grundvattnet sker i tre steg.

1. I det översta rz-lagret, atmosfärsvillkoret, sätts trycket till atmosfärstryck och lagrets egenskaper hålls konstanta. Övriga lager i rutsystemet fylls med vatten och trycket sätts initialt till det tryck det understa rz-lagret ska ha vid önskad grundvattennivå. Det understa rz-lagrets egenskaper hålls konstanta vilket ger fri dränering och resulterar i att grundvattenytan ställer in sig på rätt nivå och att en omättad zon skapas.
2. Bensin injiceras i det nedre injektionslagrets innersta block.

3. Injektion upphör och utsläppet sprids i modellen.

Simuleringen som ligger till grund för utvärdering av kemikaliefasens retention samt transport av vattenlöst kemikalie sker i fyra steg.

1. I det översta xy-lagret, atmosfärvillkoret, sätts trycket till atmosfärstryck och lagrets egenskaper hålls konstanta. Övriga lager i rutsystemet fylls med vatten och trycket sätts initialt till det tryck det understa xy-lagret skulle ha vid önskad grundvattennivå. Det understa xy-lagrets egenskaper hålls konstanta vilket ger fri dränering och resulterar i att grundvattenytan ställer in sig på rätt nivå och att en omättad zon skapas.
2. Atmosfärvillkoret och det understa xy-lagret hålls inte längre konstanta. Konstanta randvillkor skapas istället i de två yttersta yz-lagren för att simulera en lutande grundvattenyta. Uppströmslagret sätts konstant till den tryck- och vattenmättnadsfördelning som erhålls från steg 1. Ett tryck motsvarande den extra luftpelare som önskad grundvattenlutning skulle medföra vid nedströmslagret adderas till detta lager. Tillsammans gör dessa ränder att grundvattenytan får en lutning och att grundvattnet får en hastighet mot positiva x.
3. Det övre xy-lagret, atmosfärvillkoret, har nu fått en ny tryckfördelning vilken hålls konstant tillsammans med de konstanta randvillkoren från föregående steg. Bensin injiceras i ett av injektionsblocken.
4. Injektion upphör och utsläppet sprids i modellen.

## Resultat från TOUGH/T2VOC

För att kunna jämföra resultaten från TOUGH/T2VOC med resultaten från *Spridning Mark* görs nedanstående antaganden och tolkningar.

### Tid tills kemikaliefas når grundvattnet

I de cylindriska TOUGH/T2VOC-rutsystemen bestäms grundvattendjupet av trycket i det nedre konstanta lagret och grundvattenytan är belägen i centrum av det andra lagret nedifrån räknat.

I TOUGH/T2VOC sprids kemikaliefasen till intilliggande block först när aktuellt block har en NAPL-mättnad, SO, som överstiger residualmättnaden, RP(3). I utvärderingen tolkas det som att kemikaliefasen når blockgränsen vid denna tidpunkt. Således antas kemikaliefasen nå blockcentrum vid den tidpunkt då mättnadsgraden är lika med halva residualmättnaden.

I utvärderingen studeras lagret där grundvattenytan är belägen och kemikaliefasen antas nå grundvattenytan vid den tidpunkt då NAPL-mättnaden i något av blocken är lika med halva residualmättnaden.

Tidpunkten erhålls genom linjär interpolation av NAPL-mättnaden i de två tidssteg då aktuellt block har en mättnadsgrad som ligger närmast under respektive över halva residualmättnaden.

## Horisontell transport av vattenlöst kemikalie i grundvattnet

Koncentrationer av vattenlöst bensin, CVOCAQ, lägre än  $0,0003 \text{ kg/m}^3$  försummas i utvärderingen. Denna koncentration motsvarar WHO:s dricksvattenrekommendationer för toluen  $0,06 \cdot 10^{-3} \text{ kg/m}^3$  (WHO, 1993) och maximal viktprocent av toluen i bensin 21,8 % (LUFT, 1988).

Transport av vattenlöst kemikalie definieras i utvärderingen som det längsta avståndet i x-led från utsläppets centrum till den punkt där koncentrationen av vattenlöst bensin är  $0,0003 \text{ kg/m}^3$ . Det längsta avståndet erhålls i grundvattenlagret, i den riktning grundvattnet strömmar.

För varje block vid grundvattennivån nedströms utsläppet görs en linjär interpolation mellan de två tidssteg då koncentrationen av vattenlöst bensin ligger närmast över respektive under gränsvärdet. Detta ger tidpunkten då plymen når blockets centrum. För att få fler tidpunkter att utvärdera studeras även tidssteg var för sig, och linjär interpolation utförs mellan de block vars koncentration av vattenlöst bensin ligger över respektive under gränsvärdet för att erhålla horisontell transport vid aktuell tidpunkt. Totalt utvärderas 4 - 8 punkter för varje scenario.

## Retention av kemikaliefas

I *Spridning Mark* ges kemikaliefasens retention som en andel av totalt utsläppt volym. För att erhålla motsvarande siffra från TOUGH/T2VOC görs antagandet att endast den del av kemikaliefasen, SO, som överstiger residualmättnaden, RP(3), i ett block transporteras vidare. Resterande mättnadsgrad hålls således kvar i blocket, och utifrån blockets volym samt porositet beräknas kvarhållen volym. Summan för samtliga block divideras med totalt utsläppt volym och andel kvarhållen kemikalie för studerat tidssteg erhålls. För varje scenario väljs 3 - 6 tidssteg under simuleringstiden 0 - 48 timmar.

## Indata till Spridning Mark

Nedan följer en sammanställning över hur indata till *Spridning Mark* väljs för att skapa samma scenarier som i TOUGH/T2VOC. Enhetskonvertering utförs där så krävs.

### Utsläppets area

I TOUGH/T2VOC används ett injektionslager för att efterlikna den laterala spridning som i verkligheten sker på markytan. För att använda samma area i jämförelsen beräknas i TOUGH/T2VOC den sammanlagda arean av elementen i det översta jordlagret (under injektionslagret) som har en gasmättnad som är mindre än den normala för det jordlagret.

<b>Utsläppets volym</b>	I TOUGH/T2VOC injiceras bensin med konstant flöde (kg/s) i ett visst antal sekunder. Tillsammans med densiteten beräknas utsläppt volym.
<b>Tid sedan utsläppets början</b>	Samma som TOUGH/T2VOC.
<b>Densitet</b>	Samma som i TOUGH/T2VOC, RHOREF.
<b>Viskositet</b>	Viskositeten beräknas enligt Reid m.fl. (1987)
	$\eta = e^{VLOA - \frac{VLOB}{INCON(X4)}}$
	<p><math>\eta</math> viskositet [mPa·s]</p> <p>VLOA Viskositetskonstant i TOUGH/T2VOC</p> <p>VLOB viskositetskonstant i TOUGH/T2VOC</p> <p>INCON(X4) temperaturen i TOUGH/T2VOC [K]</p>
<b>Molekylvikt</b>	Samma som i TOUGH/T2VOC, AMO.
<b>Ångtryck</b>	Avdunstning från markytan ingår inte i TOUGH/T2VOC, i <i>Spridning Mark</i> används därför ångtryck från RIB Farliga ämnen.
<b>Kokpunkt</b>	Samma som i TOUGH/T2VOC, TBOIL.
<b>Djup till grundvatten</b>	Utifrån givet tryck i simuleringsteg 1 i TOUGH/T2VOC.
<b>Kapillärzonens höjd över grundvattenytan</b>	Teoretiska värden från Domenico och Schwartz (1997) jämfördes med en graf över vattenmättnad mot djup från TOUGH/T2VOC. De teoretiska värdena 0,33 m för sand och 5,33 m för silt anses motsvara vattenmättnadsfördelningen i TOUGH/T2VOC och används i <i>Spridning Mark</i> .
<b>Grundvattenytans lutning</b>	Utifrån adderat tryck i simuleringsteg 2 i TOUGH/T2VOC för tredimensionell modell. Noll för tvådimensionell modell.

**Hydraulisk  
konduktivitet**

Hydraulisk konduktivitet erhålls genom:

$$K = PER(3) \frac{\rho g}{\mu}$$

K	Hydraulisk konduktivitet [m/s]
PER(3)	Permeabilitet i TOUGH/T2VOC [m <sup>2</sup> ]
$\rho$	Vattens densitet [kg/m <sup>3</sup> ]
g	Tyngdaccelerationen [m/s <sup>2</sup> ]
$\mu$	Vattens viskositet [Ns/m <sup>2</sup> ]

**Porositet**

Samma som TOUGH/T2VOC, POR.

**Retentionskapacitet**

Samma som TOUGH/T2VOC, RP(3).

**Linstjocklek ovanpå  
grundvattnet**

I TOUGH/T2VOC varierar linsens tjocklek med tiden samt avståndet från utsläppet, dessutom är den svår att uppskatta på grund av grov diskretisering. Teoretiska värden från Vanlooche m.fl. (1975), 1,2 cm för sand och 4 cm för silt, används därför i *Spridning Mark*.

**Nederbörd**

Nederbördspåverkan är inte inkluderad i TOUGH/T2VOC och den påverkar heller inte beräkningen i *Spridning Mark*.

**Lufttemperatur**

Samma som i TOUGH/T2VOC, INCON X4.

**Vindhastighet**

Den minsta vindhastighet i *Spridning Mark*, 0,1 m/s, används eftersom evaporation från markytan inte är inkluderad i TOUGH/T2VOC.

**Höjd för vindmätning**

Standardhöjd för vindmätning, 10 m, används.



### 3. Resultat

I detta kapitel redovisas resultaten från utvärderingen. I figurerna markeras resultat från *Spridning Mark* med ett kryss och resultat från TOUGH/T2VOC med en fylld kvadrat. Kring resultaten från *Spridning Mark* bildas 50-procentiga intervall och om resultatet från TOUGH/T2VOC ligger inom detta anses resultatet från *Spridning Mark* vara tillräckligt noggrant.

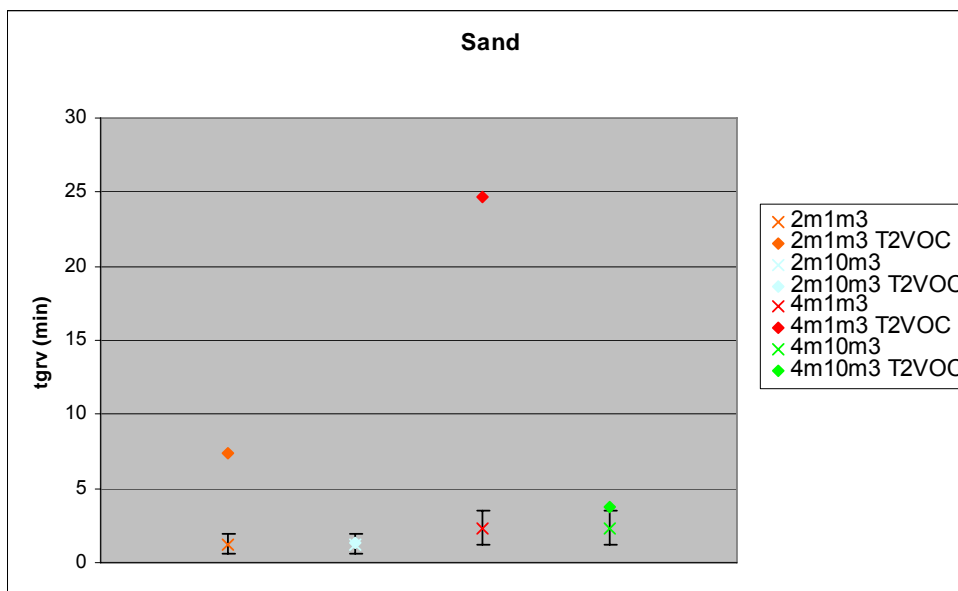
#### Tid tills kemikaliefas når grundvattnet

I *Spridning Mark* anges tid tills kemikaliefas når grundvattnet som ”mindre än 30 min” eller ” $x \pm 0,5x$ ” avrundat till hela och halva timmar.

#### Sand

I figur 2 presenteras resultatet från de fyra scenarier som simulerats för sand; grundvattendjup 2 m med utsläpp av 1 respektive 10 m<sup>3</sup> bensin, samt grundvattendjup 4 m med utsläpp av 1 respektive 10 m<sup>3</sup> bensin. 50-procentiga intervall kring resultatet från *Spridning Mark* visas i figuren men i programmet anges resultatet som ”mindre än 30 min”.

För utsläpp av 10 m<sup>3</sup> bensin ger *Spridning Mark* hög noggrannhet men även resultatet från simulerat utsläpp av 1 m<sup>3</sup> är tillräckligt noggrant eftersom resultatet i *Spridning Mark* är ”mindre än 30 min”.



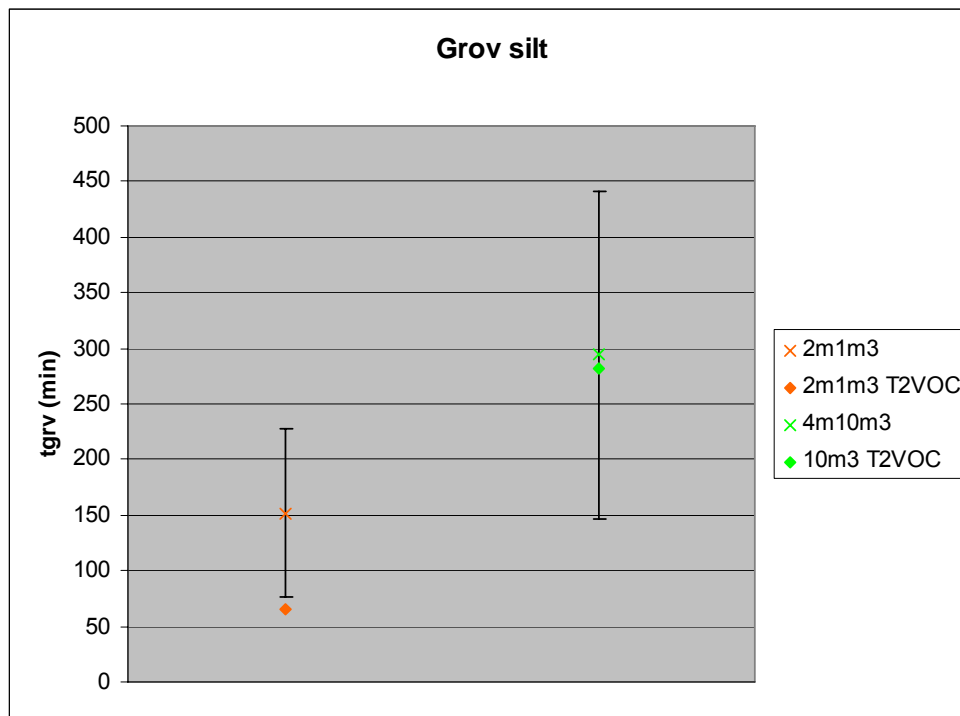
**Figur 2.** Tid tills kemikaliefas når grundvattnet (tgrv) för simulerade scenarier i sand enligt *Spridning Mark* med 50-procentiga intervall tillsammans med resultat enligt TOUGH/T2VOC.

#### Grov silt

Resultaten från de scenarier som simulerats i grov silt; grundvattendjup 2 m med utsläpp av 1 m<sup>3</sup> bensin samt grundvattendjup 4 m med utsläpp av 10 m<sup>3</sup>

bensin, presenteras i figur 3. 50-procentiga intervall kring exakt resultat från *Spridning Mark* visas men programmet avrundar till hela och halva timmar.

Resultatet från de båda modellerna stämmer bra överens vid utsläpp av 10 m<sup>3</sup>. *Spridning Mark* ger en något för långsam transport vid utsläpp av 1 m<sup>3</sup> men eftersom resultatet anges som "2,5 ± 1,5 timmar" är noggrannheten tillfredsställande.



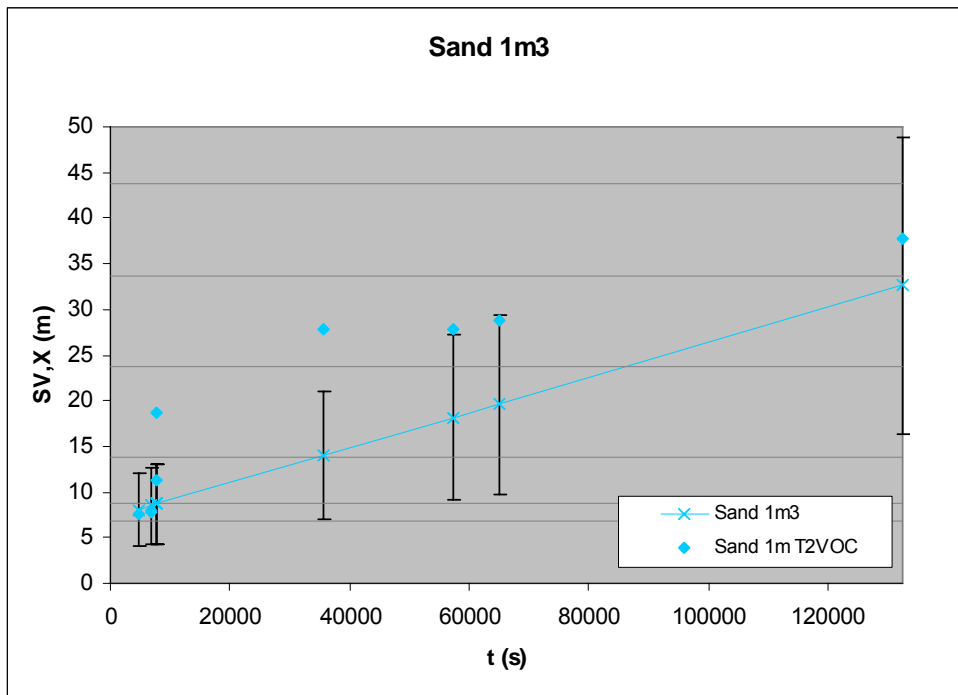
**Figur 3.** Tid tills kemikaliefas når grundvattnet (tgrv) för simulerade scenarier i grov silt enligt *Spridning Mark* med 50-procentiga intervall tillsammans med resultat enligt TOUGH/T2VOC.

## Horisontell transport av vattenlöst kemikalie i grundvattnet

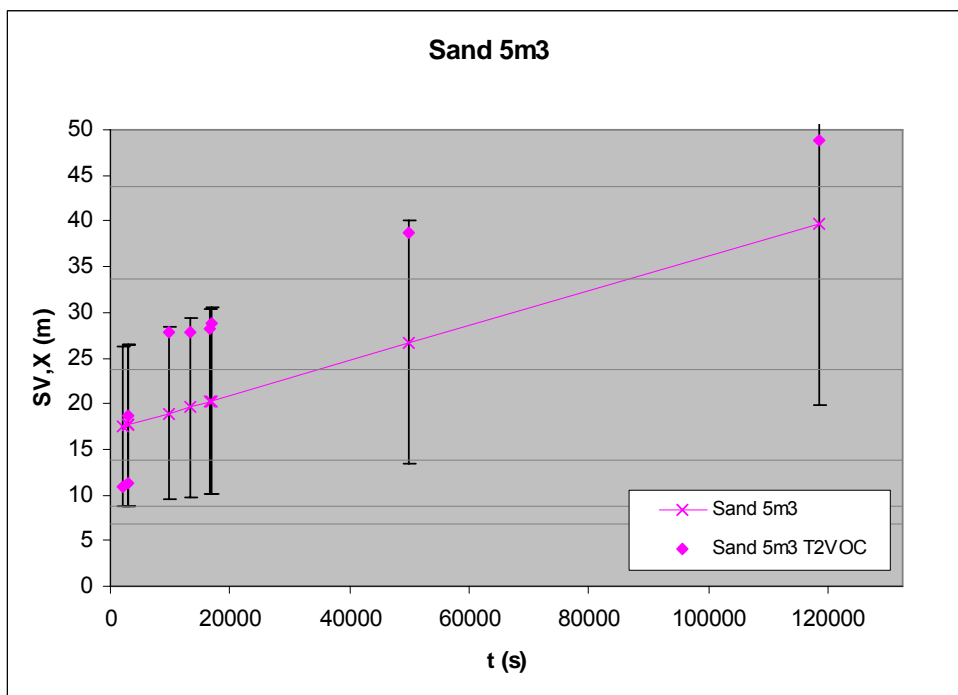
I figurerna nedan representerar de grå linjerna blockgränser i modellen. Det är värt att poängtera att resultatet från det sista blocket i TOUGH/T2VOC är osäkert på grund av att detta gränsar till ett konstant block, vilket kan resultera i för låga koncentrationer och därmed en för liten transport av vattenlöst kemikalie.

## Sand

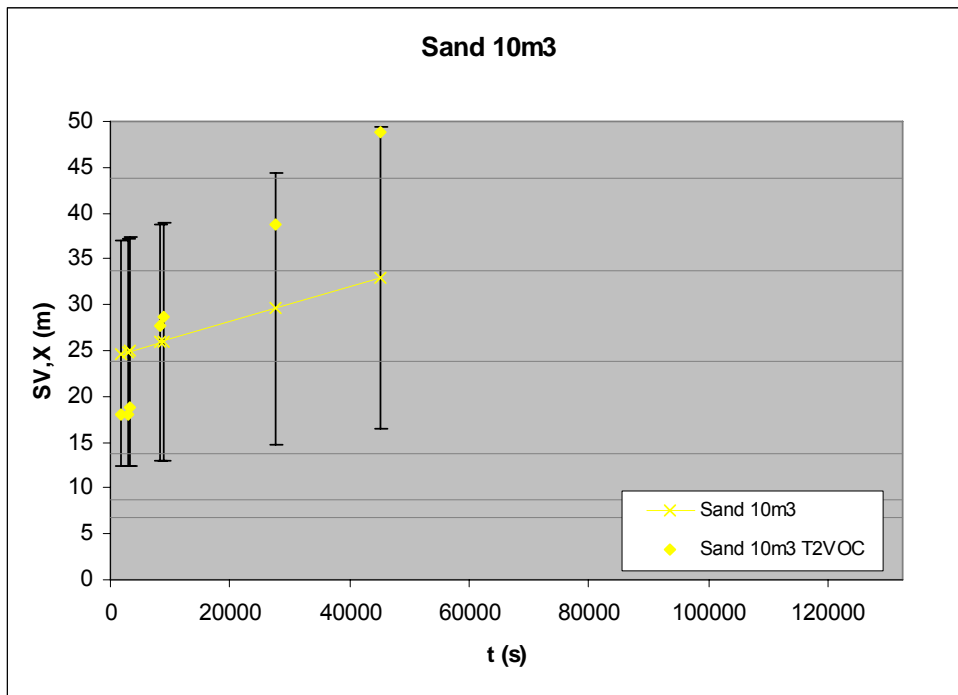
Resultaten från TOUGH/T2VOC och *Spridning Mark* visar liknande trender över tid när det gäller transport av vattenlöst bensin i sand. Som framgår av figur 4, 5, 6 och 7 ger *Spridning Mark* tillräckligt noggrant resultat i 24 av 29 utvärderade tidpunkter. *Spridning Mark* ger långsammare transport än TOUGH/T2VOC vid grundvattenlutning om 1 % och snabbare transport än TOUGH/T2VOC vid grundvattenlutning om 5 %.



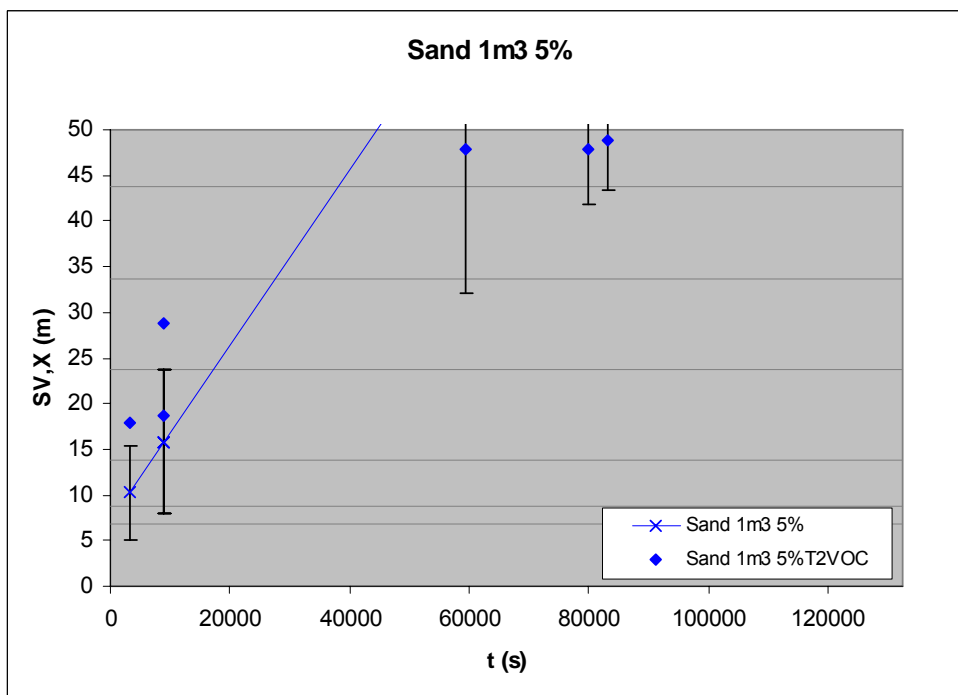
**Figur 4.** Horisontell transport av vattenlöst kemikalie (SV,X), vid utsläpp av 1 m<sup>3</sup> bensin i sand med grundvattenlutning 1 %. Resultat från Spridning Mark med 50-procentiga intervall tillsammans med resultat enligt TOUGH/T2VOC.



**Figur 5.** Horisontell transport av vattenlöst kemikalie (SV,X), vid utsläpp av 5 m<sup>3</sup> bensin i sand med grundvattenlutning 1 %. Resultat från Spridning Mark med 50-procentiga intervall tillsammans med resultat enligt TOUGH/T2VOC.



**Figur 6.** Horisontell transport av vattenlöst kemikalie (SV,X), vid utsläpp av 10 m<sup>3</sup> bensin i sand med grundvattenlutning 1 %. Resultat från Spridning Mark med 50-procentiga intervall tillsammans med resultat enligt TOUGH/T2VOC.

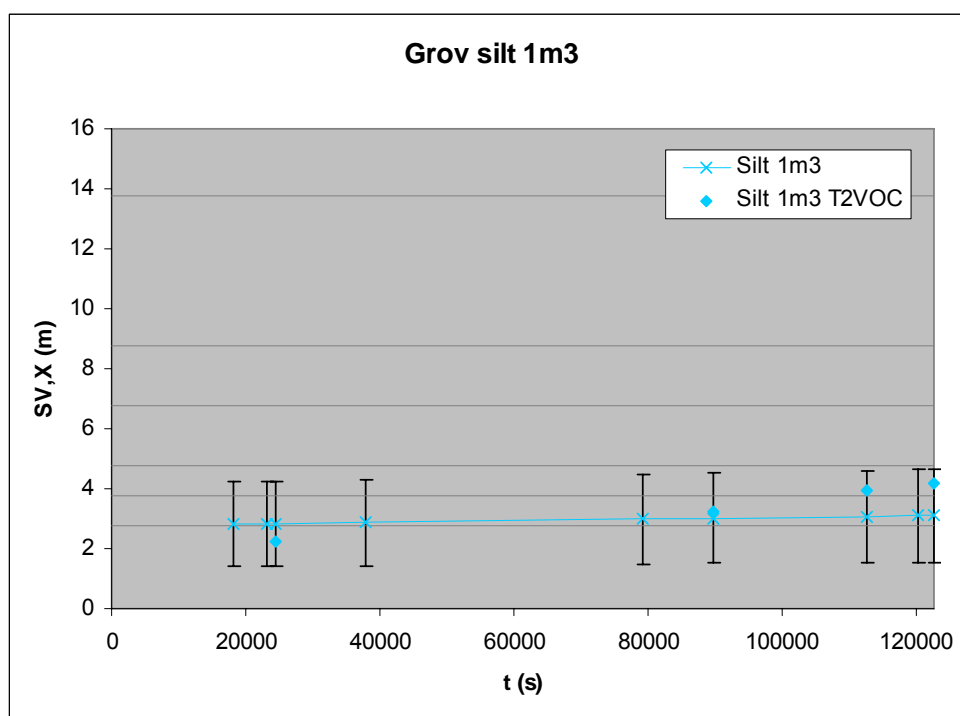


**Figur 7.** Horisontell transport av vattenlöst kemikalie (SV,X), vid utsläpp av 1 m<sup>3</sup> bensin i sand med grundvattenlutning 5 %. Resultat från Spridning Mark med 50-procentiga intervall tillsammans med resultat enligt TOUGH/T2VOC.

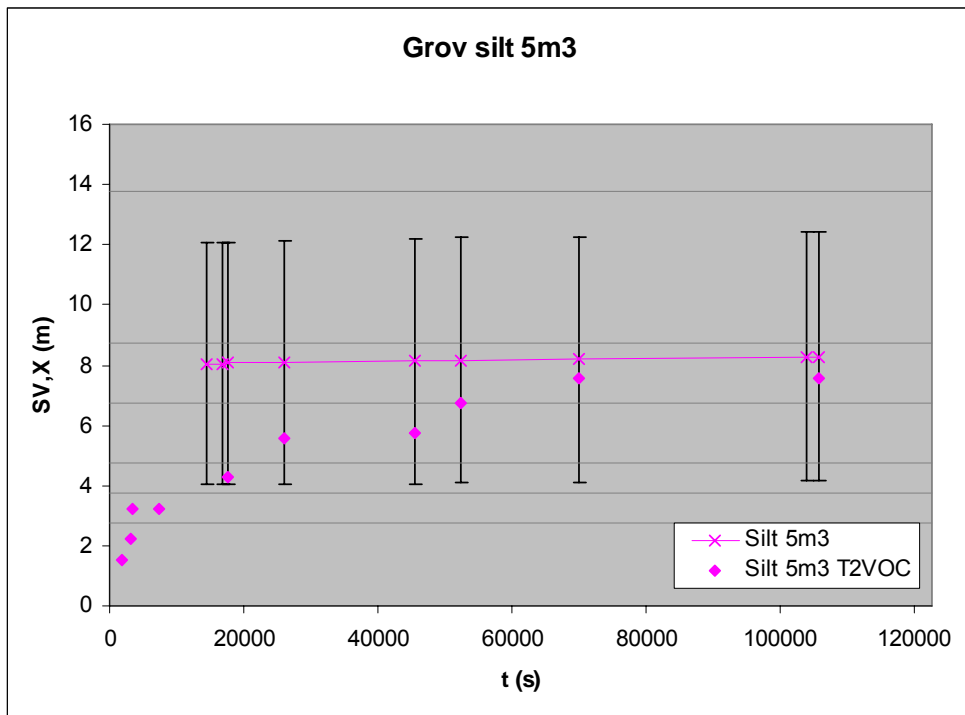
## Grov silt

I samtliga tidpunkter utvärderade för transport av vattenlöst bensin i grov silt, ger *Spridning Mark* ett tillräckligt noggrant resultat. Detta åskådliggörs nedan i figur 8, 9 och 10.

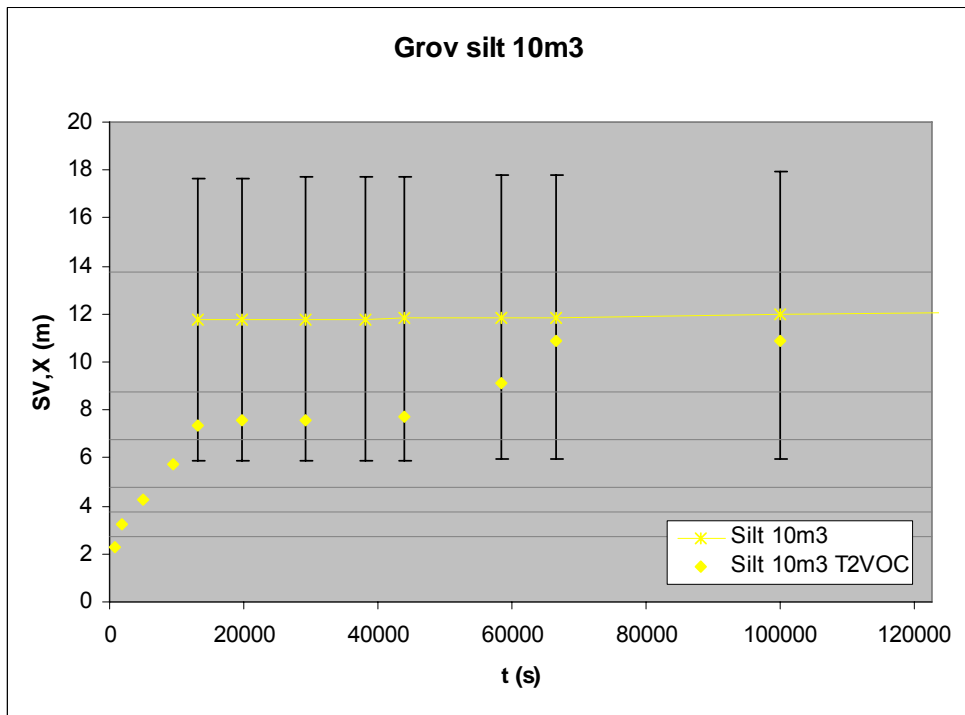
Att transport av vattenlöst bensin vid tider mindre än ca 3 timmar inte redovisas för *Spridning Mark* i figur 9 och 10 beror på att kemikaliefasen inte har nått grundvattnet enligt beräkningen. Då kemikaliefasen inte har nått grundvattnet i *Spridning Mark* sätts transport av vattenlöst kemikalie till noll och istället redovisas horisontell transport av kemikaliefas, vilken är lika med spillareans radie. Vid simulerat utsläpp av 5 respektive 10 m<sup>3</sup> bensin i grov silt är spillareans radie  $2 \pm 1$  m respektive  $3 \pm 1,5$  m och enligt figur 9 och 10 ger detta ett tillräckligt noggrann uppskattning av horisontell transport.



**Figur 8.** Horisontell transport av vattenlöst kemikalie (SV,X), vid utsläpp av 1 m<sup>3</sup> bensin i grov silt med grundvattenlutning 1 %. Resultat från *Spridning Mark* med 50-procentiga intervall tillsammans med resultat enligt TOUGH/T2VOC.



**Figur 9.** Horisontell transport av vattenlöst kemikalie (SV,X), vid utsläpp av 5 m<sup>3</sup> bensin i grov silt med grundvattenlutning 1 %. Resultat från Spridning Mark med 50-procentiga intervall tillsammans med resultat enligt TOUGH/T2VOC.

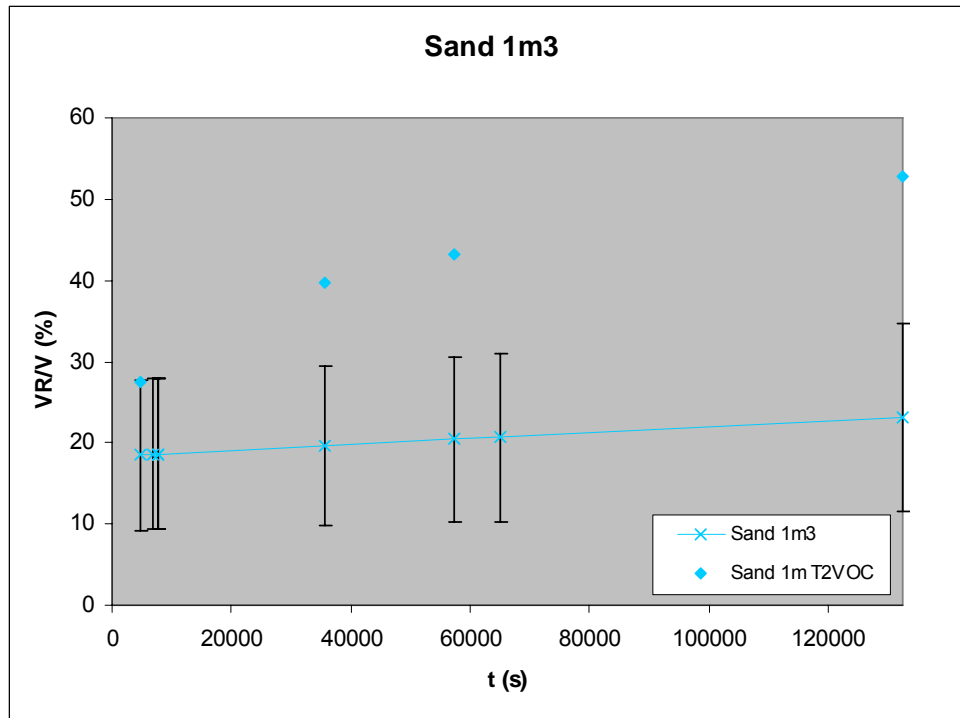


**Figur 10.** Horisontell transport av vattenlöst kemikalie (SV,X), vid utsläpp av 10 m<sup>3</sup> bensin i grov silt med grundvattenlutning 1 %. Resultat från Spridning Mark med 50-procentiga intervall tillsammans med resultat enligt TOUGH/T2VOC.

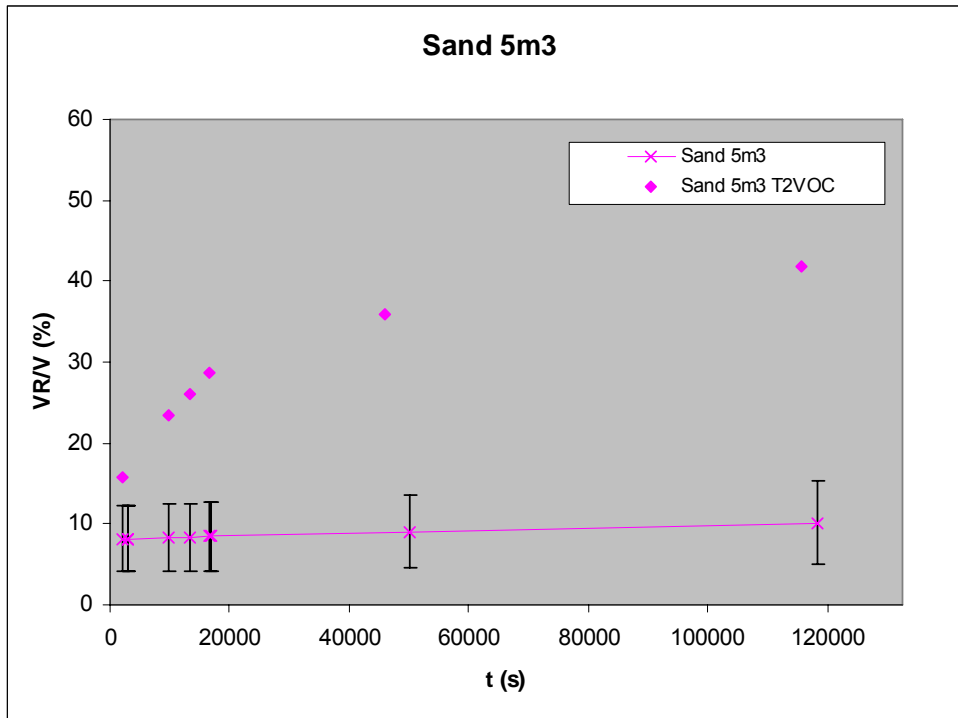
# Retention av kemikaliefas

## Sand

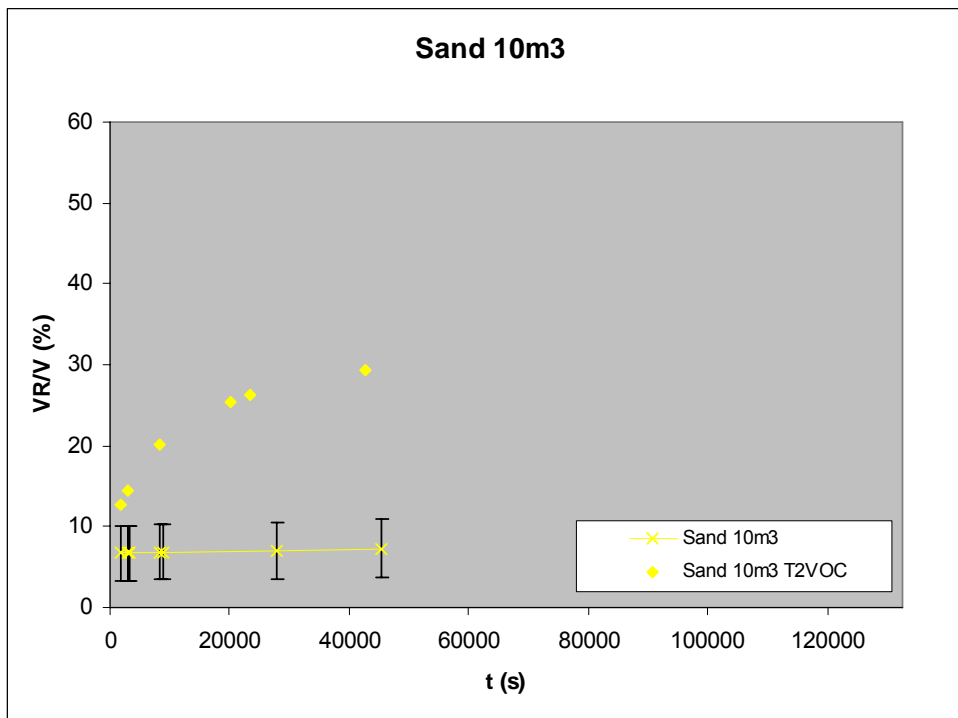
*Spridning Mark* ger konsekvent en för liten retention vid utsläpp av bensin i sand och noggrannheten är endast tillfredsställande i en av de utvärderade tidpunkterna. Jämförelsen presenteras i figur 11, 12, 13 och 14 nedan.



**Figur 11.** Retention av kemikaliefas som andel av totalt utsläpp (VR/V), vid utsläpp av 1 m<sup>3</sup> bensin i sand med grundvattenlutning 1 %. Resultat från *Spridning Mark* med 50-procentiga intervall tillsammans med resultat enligt *TOUGH/T2VOC*.

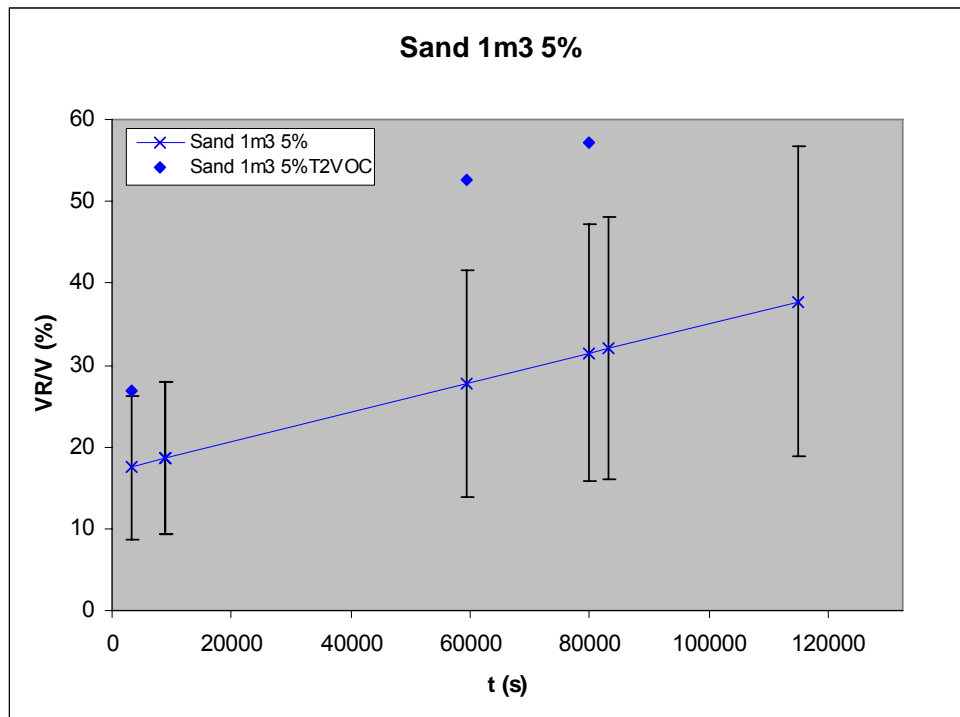


**Figur 12.** Retention av kemikaliefas som andel av totalt utsläpp (VR/V), vid utsläpp av 5 m<sup>3</sup> bensin i sand med grundvattenlutning 1 %. Resultat från Spridning Mark med 50-procentiga intervall tillsammans med resultat enligt TOUGH/T2VOC.



**Figur 13.** Retention av kemikaliefas som andel av totalt utsläpp (VR/V), vid utsläpp av 10 m<sup>3</sup> bensin i sand med grundvattenlutning 1 %. Resultat från Spridning Mark med 50-procentiga intervall tillsammans med resultat enligt TOUGH/T2VOC.

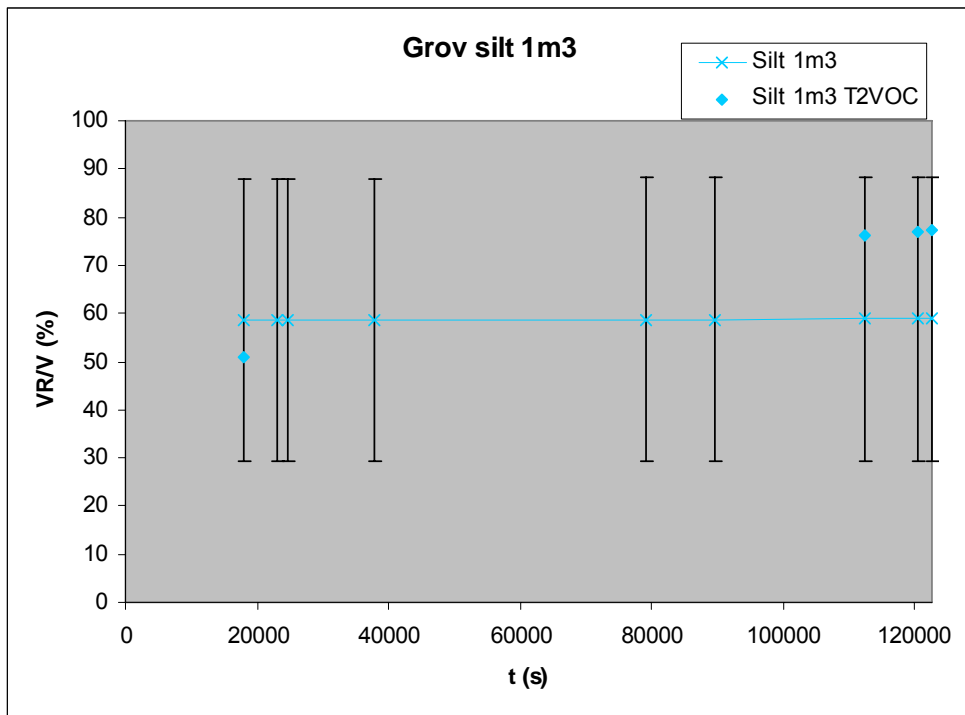




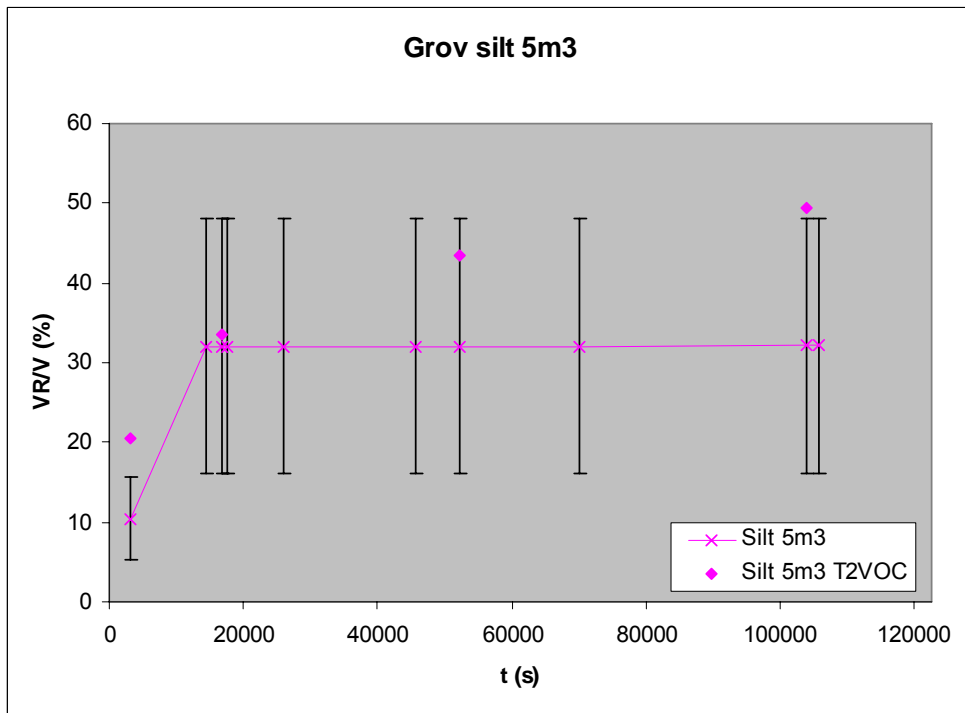
**Figur 14.** Retention av kemikaliefas som andel av totalt utsläpp (VR/V), vid utsläpp av 1 m<sup>3</sup> bensin i sand med grundvattenlutning 5 %. Resultat från *Spridning Mark* med 50-procentiga intervall tillsammans med resultat enligt TOUGH/T2VOC.

## Grov silt

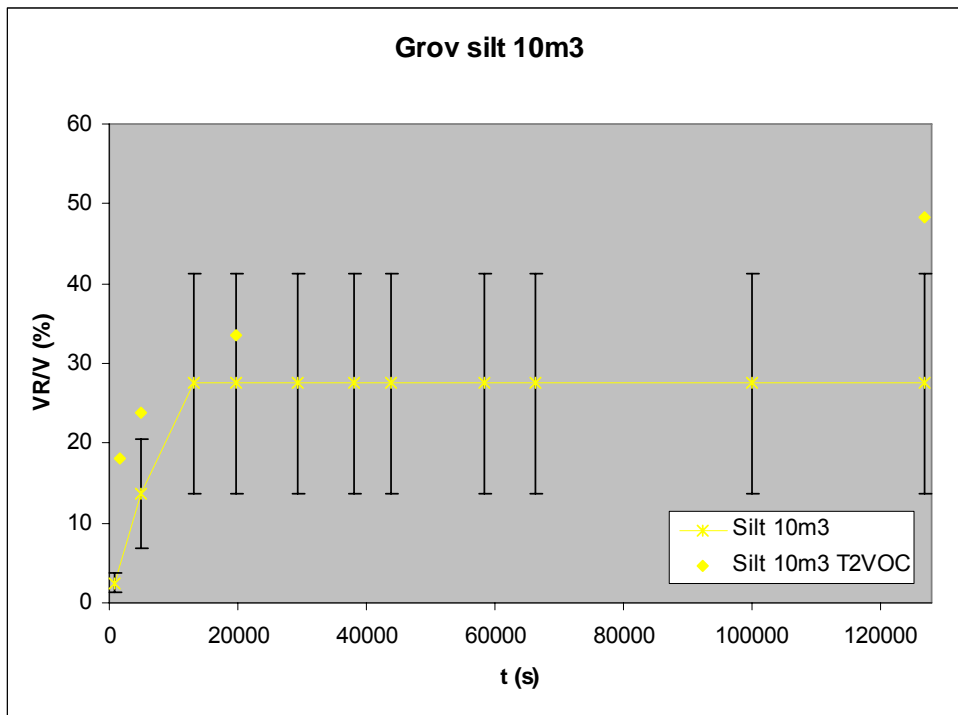
I nio av tolv utvärderade tidpunkter ger *Spridning Mark* ett tillräckligt noggrant resultat avseende retention av kemikaliefas. I de fall resultatet inte är tillfredsställande ger *Spridning Mark* ett för lågt värde, vilket åskådliggörs i figur 15, 16 och 17.



**Figur 15.** Retention av kemikaliefas som andel av totalt utsläpp (VR/V), vid utsläpp av 1 m<sup>3</sup> bensin i grovt silt med grundvattenlutning 1 %. Resultat från Spridning Mark med 50-procentiga intervall tillsammans med resultat enligt TOUGH/T2VOC.



**Figur 16.** Retention av kemikaliefas som andel av totalt utsläpp (VR/V), vid utsläpp av 5 m<sup>3</sup> bensin i grovt silt med grundvattenlutning 1 %. Resultat från Spridning Mark med 50-procentiga intervall tillsammans med resultat enligt TOUGH/T2VOC.



**Figur 17.** Retention av kemikaliefas som andel av totalt utsläpp (VR/V), vid utsläpp av 10 m<sup>3</sup> bensin i grovt silt med grundvattenlutning 1 %. Resultat från Spridning Mark med 50-procentiga intervall tillsammans med resultat enligt TOUGH/T2VOC.

## 4. Diskussion

TOUGH/T2VOC är en modell med förenklingar och antaganden och dess resultat ska tolkas i enlighet med detta. Modellen är dock väl beprövad, betydligt mer komplex samt tar hänsyn till fler processer än *Spridning Mark*, och antas därför fungera som referens i en utvärdering.

Det hade varit önskvärt att simulera fler scenarier med fler kemikalier, jordarter, utsläppta volymer samt grundvattenlutningar. På grund av numerisk instabilitet i TOUGH/T2VOC vid tre faser i samma block, begränsningar i hårdvaruprestanda samt svårigheter att finna nödvändiga data för fler kemikalier, har dock utvärderingen begränsats till de scenarier som redovisas i denna rapport.

Det finns också osäkerhet kring de scenarier som utvärderats. Vissa indata, t.ex. linstjocklek ovanpå grundvattenytan, är inte lika i de båda modellerna och tolkning av utdata från TOUGH/T2VOC kan ha bidragit med osäkerhet.

Med hänsyn till de stora osäkerheter som finns i de indata användare av *Spridning Mark* kommer att använda anses dock denna utvärdering vara tillräcklig för att dra slutsatser för modellen. Resultaten från jämförelsen ska emellertid inte tolkas strikt.

Samtliga utvärderade beräkningar av tid tills kemikaliefasen når grundvattnet ger tillräcklig noggrannhet och därmed anses även beräkning av kemikaliefasens vertikala transport vara tillfredställande.

Enligt utvärderingen ger *Spridning Mark* ett tillfredsställande resultat avseende transport av vattenlöst bensin i grov silt. Beräkningsmodellens noggrannhet accepteras även för sand eftersom över 80 % av de utvärderade fallen gav tillräcklig noggrannhet och eftersom resultaten från *Spridning Mark* visar en trend liknande resultaten från TOUGH/T2VOC.

Trots den stora osäkerheten i retention av kemikaliefas anses beräkningsmodellen i *Spridning Mark* vara tillfredsställande eftersom retentionen konsekvent är för liten vilket är att föredra inom programmets användningsområde.

Sammanfattningsvis kan alltså konstateras att *Spridning Mark* anses ge ett tillräckligt noggrant resultat, förutsatt korrekt indata.

## 5. Referenser

Carsel R. F. och Parrish R. S. (1988). Developing joint probability distributions of soil water retention characteristics, *Water Resources Research* 24(5): 755-769

Domenico P.A. och Schwartz F.W. (1997). *Physical and Chemical Hydrogeology*, andra upplagan, John Wiley & Sons, Inc., Westford, ISBN 0-471-59762-7

Fagerlund F. och Niemi A. (2006). A partially coupled, fraction by fraction modelling approach to the sub-surface migration of gasoline spills, inskickad till *Journal of Contaminant Hydrology*

Falta R. W., Pruess K., Finsterle S. och Battistelli A. (1995). *T2VOC User's Guide*, Lawrence Berkeley Laboratory, University of California, Earth Sciences Division

Gustafsson J. B., Griffith Tell J. och Orem D. (1997). Selection of Representative TPH Fractions Based on Fate and Transport Considerations, *Total Petroleum Hydrocarbon Criteria Working Group Series*, Volym 3, Amherst Scientific Publishers, Massachusetts

Lindmark P. (1991). *Kemikaliespridning i mark, utsläpp av olja i mark – exemplet Sörmon i Karlstads kommun*, del av Rapport R 108, Räddningsverket, Karlstad

LUFT (1988). *Leaking underground fuel tank manual: Guidelines for site assessment, cleanup, and underground storage tank closure*, State of California Leaking fuel tank force, Kalifornien

Parker J. C. (1995). *UST corrective action technologies: engineering design of free product recovery systems*, U.S. EPA

Reid R. C., Prausnitz M. och Poling B. E. (1987). *The Properties of Gases and Liquids*, fjärde upplagan, McGraw-Hill, New York

Vanlooche R., De Borger R., Voets J. P. och Verstraete W. (1975). Soil and Groundwater Contamination by Oil Spills; Problems and Remedies, *International Journal of Environmental Studies*, volym 8, sid 99-111

Vargaftik, N.B. (1975). *Tables on the Thermophysical Properties of Liquids and Gases*, andra upplagan, John Wiley & Sons, New York

WHO (1993). *Guidelines for drinking water quality, Volume 1, Recommendations*, andra upplagan, WHO, Geneve

# Bilagor

## Bilaga 1. Cylindriska rutsystem

Ca 2 m till grundvattnet

Blocklängd r (m)	Kommentarer r
0,49	*
0,52	
0,56	
0,60	
0,64	
0,68	
0,73	
0,78	
0,84	
0,90	
0,96	
1,03	
1,10	
1,18	
1,26	
1,35	
1,44	
1,54	
1,65	
1,76	

Blocklängd z (m)	Kommentarer z
0,25	Atmosfärsvillkor
0,25	Injektionslager
0,25	Injektionslager
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	Konstant

Ca 4 m till grundvattnet

Blocklängd r (m)	Kommentarer r
0,48	*
0,55	
0,64	
0,74	
0,85	
0,99	
1,14	
1,32	
1,53	
1,77	

Blocklängd z (m)	Kommentarer z
0,25	Atmosfärsvillkor
0,25	Injektionslager
0,25	Injektionslager
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	
0,25	Konstant

\* Centrumcylinder, injektion sker i detta block i det nedre injektionslagret

## Bilaga 2. 3D-rutsystem sand

Blocklängd x (m)	Kommentar x
0,25	Konstant Uppströms
10	
2,00	
2,00	
1,00	
1,00	
0,50	
0,50	
0,50	
0,50	
0,50	
0,50	
0,50	
0,50	
0,50	
0,50	
0,50	
1,00	
1,00	
1,00	
1,00	
2,00	
2,00	
5,00	
10,00	
10,00	
10,00	
10,00	
10,00	
0,25	Nedströms Konstant

Blocklängd y (m)	Kommentar y
10	*
2	
2	
1	
1	
0,5	
0,5	
0,5	
0,5	
0,5	
0,5	
0,5	
0,5	
0,5	
1	
1	
2	
2	
10	

Blocklängd z (m)	Kommentar z
0,1	Atmosfärvillkor Injektionslager
0,2	
1	
1	
0,1	
0,1	
0,25	
0,25	
2	

\* Injektion sker i detta block i injektionslagret



### Bilaga 3. 3D-rutsystem grov silt

Blocklängd x (m)	Kommentar x
0,25	Konstant Uppströms
10	
2	
2	
1	
1	
0,5	
0,5	
0,5	
0,5	
0,5	
0,5	
1	
1	
1	
2	
2	
5	
10	
10	
10	
10	
0,25	Nedströms Konstant

Blocklängd y (m)	Kommentar y
10	
2	
2	
1	
1	
0,5	
0,5	
0,5	
0,5	
0,5	
0,5	
0,5	
1	
1	
2	
2	
10	

Blocklängd z (m)	Kommentar z
0,1	Atmosfärsvillkor
0,2	Injektionslager
1	
1	
0,15	
0,15	
0,15	
0,25	
0,25	
2	

\* Injektion sker i detta block i injektionslagret

## Bilaga 4. Kemikaliedata i TOUGH/T2VOC

Parameternamn		Enhet	Bensin	Heptan (C7)	Org. Förening	Referens
Chemical critical temperature	TCRIT	K		540		Reid m.fl. (1987)
Chemical critical Pressure	PCRIT	bar		27,5		Reid m.fl. (1987)
Chemical critical compressibility	ZCRIT			0,263		Reid m.fl. (1987)
Pizer's acentric factor	OMEGA			0,349		Reid m.fl. (1987)
Chemical dipole moment	DIPOLM	debyes		0		Reid m.fl. (1987)
Chemical normal boiling poing	TBOIL	K		371,6		Reid m.fl. (1987)
Chemical vapor pressure constant	VPA			-7,67468		Reid m.fl. (1987)
Chemical vapor pressure constant	VPB			1,37068		Reid m.fl. (1987)
Chemical vapor pressure constant	VPC			-3,5362		Reid m.fl. (1987)
Chemical vapor pressure constant	VPD			-3,20243		Reid m.fl. (1987)
Chemical molecular weight	AMO	g/mol		100,2		Reid m.fl. (1987)
Chemical ideal gas heat capacity constant	CPA			-5,146		Reid m.fl. (1987)
Chemical ideal gas heat capacity constant	CPB			0,6762		Reid m.fl. (1987)
Chemical ideal gas heat capacity constant	CPC			-0,0003651		Reid m.fl. (1987)
Chemical ideal gas heat capacity constant	CPD			7,658E-08		Reid m.fl. (1987)
Reference density for NAPL	RHOREF	kg/m <sup>3</sup>	730			Fagerlund och Niemi (2006)
Reference temperature for NAPL	TDENRF	K	293,15			Fagerlund och Niemi (2006)
Reference binary diffusivity for VOC in air	DIFVO	m <sup>2</sup> /s		0,00000659		Gustafsson m.fl. (1997)
Reference temperature for gas diffusivity	TDFRF	K				
Chemical diffusivity exponent	TEXPO				1,6	Vargaftik (1975)
Liquid NAPL viscosity constant	VLOA		-4,325			Fagerlund och Niemi (2006)
Liquid NAPL viscosity constant	VLOB		1006			Fagerlund och Niemi (2006)
Liquid NAPL viscosity constant	VLOC		0			
Liquid NAPL viscosity constant	VLOD		0			
Chemical critical volume	VOLCRT	cm <sup>3</sup> /mol		432		Reid m.fl. (1987)
H2O chemical solubility constant	SOLA	mole fract.		0,000000526		Gustafsson m.fl. (1997)
H2O chemical solubility constant	SOLB			0		
H2O chemical solubility constant	SOLC			0		
H2O chemical solubility constant	SOLD			0		
Chemical organic carbon partition coef.	OCK	m <sup>3</sup> /kg		18,3		Gustafsson m.fl. (1997)
Default fraction of organic carbon in soil	FOX				0,001	PetraSim default
VOC biodegradation decay constant	ALAM	1/s			0	PetraSim default

## Bilaga 5. Jordartsdata i TOUGH/T2VOC

Parameternamn	Enhet	Sand	Grov silt	Referens
Density	DROK kg/m <sup>3</sup>	2650	2650	Efter exempel i Falta m.fl. (1995)
Porosity	POR	0,43	0,45	Carsel och Parrish (1988)
x Permeability	PER(1) m <sup>2</sup>	8,772·10 <sup>-10</sup>	1,329·10 <sup>-11</sup>	Lika med z permeabilitet
y Permeability	PER(2) m <sup>2</sup>	8,772·10 <sup>-10</sup>	1,329·10 <sup>-11</sup>	Lika med z permeabilitet
z Permeability	PER(3) m <sup>2</sup>	8,772·10 <sup>-10</sup>	1,329·10 <sup>-11</sup>	Carsel och Parrish (1988)
Wet heat conductivity	CWET W/mC	3,1	3,1	Efter exempel i Falta m.fl. (1995)
Specific heat	SPHT J/kgC	1000	1000	Efter exempel i Falta m.fl. (1995)
<b>Relative permeability</b>				
Van Genuchten Mualem	IRP=16			
Residual water saturation, S <sub>wr</sub>	RP(1)	0,13	0,43	Parker m.fl. (1995)
Van Genuchten n	RP(2)	2,68	1,41	Carsel och Parrish (1988)
Residual NAPL saturation, S <sub>nr</sub>	RP(3) m <sup>3</sup> <sub>NAPL</sub> /m <sup>3</sup> <sub>Porer</sub>	0,03	0,07	Parker m.fl. (1995)
<b>Capillary pressure</b>				
3-phase Parker with linearisation		ICP=12	ICP=12	
Residual water saturation, S <sub>ms</sub>	CP1	0,13	0,43	Parker m.fl. (1995)
Van Genuchten n	CP2	2,68	1,41	Carsel and Parrish (1988)
α <sub>gn</sub>	CP3 1/m	50,0	6,9	Beräknas från α och β <sub>gn</sub> , se nedan
α <sub>nw</sub>	CP4 1/m	20,4	2,82	Beräknas från α och β <sub>nw</sub> , se nedan
Linearisation if S <sub>w</sub> > 1 – CP5	CP5	0,01	0,01	

$$\alpha_{gn} = \text{Van Genuchten } \alpha \cdot \beta_{gn}$$

$$\alpha_{nw} = \text{Van Genuchten } \alpha \cdot \beta_{nw}$$

Van Genuchten α för använda jordarter

	Enhet	Sand	Grov silt	Referens
Van Genuchten α	1/m	14,5	0,02	Carsel and Parrish (1988)

Betavärden för bensin

	Bensin	Referens
β <sub>gn</sub>	3,45	Lindmark (1991)
β <sub>nw</sub>	1,41	Lindmark (1991)

## Bilaga 6. Atmosfärsvillkor i TOUGH/T2VOC

Parameternamn		Enhet	Atmosfärsv.
Density	DROK	kg/m <sup>3</sup>	2650
Porosity	POR		0,35
x Permeability	PER(1)	m <sup>2</sup>	1,00·10 <sup>-8</sup>
y Permeability	PER(2)	m <sup>2</sup>	1,00·10 <sup>-8</sup>
z Permeability	PER(3)	m <sup>2</sup>	1,00·10 <sup>-8</sup>
Wet heat conductivity	CWET	W/mC	2,51
Specific heat	SPHT	J/kgC	920
<b>Relative permeability</b>			
Stones 3 phase	IRP=6		
Residual water saturation, S <sub>wr</sub>	RP(1)		0,15
Residual NAPL saturation, S <sub>nr</sub>	RP(2)	m <sup>3</sup> <sub>NAPL</sub> /m <sup>3</sup> <sub>Porer</sub>	0,05
Residual gas saturation, S <sub>gr</sub>	RP(3)		0,05
van Genuchten n	RP(4)		3
<b>Capillary pressure</b>			
No capillary pressure	ICP=9		

## Bilaga 7. Injektionslager i TOUGH/T2VOC

Parameternamn		Enhet	Injektion
Density	DROK	kg/m <sup>3</sup>	2650
Porosity	POR		0,99
x, y, z Permeability 2D modell grov silt 2 m till grundvattnet	PER(1)(2)(3)	m <sup>2</sup>	3,00·10 <sup>-7</sup>
x, y, z Permeability 2D modell grov silt 4 m till grundvattnet	PER(1)(2)(3)	m <sup>2</sup>	3,00·10 <sup>-8</sup>
x, y, z Permeability Övriga modeller	PER(1)(2)(3)	m <sup>2</sup>	3,00·10 <sup>-9</sup>
Wet heat conductivity	CWET	W/mC	3,1
Specific heat	SPHT	J/kgC	1000
<b>Relative permeability</b>			
Van Genuchten Mualem	IRP=16		
Residual water saturation, S <sub>wr</sub>	RP(1)		0,05
Van Genuchten n	RP(2)		2,68
Residual NAPL saturation, S <sub>nr</sub>	RP(3)	m <sup>3</sup> <sub>NAPL</sub> /m <sup>3</sup> <sub>Poref</sub>	0
<b>Capillary pressure</b>			
No capillary pressure	ICP=9		