



Miljø- og Fødevareministeriet  
Miljøstyrelsen

# JAGG 2 - Vertikal transport ned til førstkommende betydende magasin

Miljøprojekt nr. 1828, 2016

**Titel:**

JAGG 2 - Vertikal transport ned til  
førstkommende betydende magasin

**Redaktion:**

Anders G. Christensen  
NIRAS A/S  
Philip J. Binning, Mads Troldborg, Peter Kjeldsen og  
Mette Broholm  
Institut for Vand og Miljøteknologi, DTU

**Udgiver:**

Miljøstyrelsen  
Strandgade 29  
1401 København K  
www.mst.dk

**År:**

2016

**ISBN nr.**

978-87-93435-31-5

**Ansvarsfraskrivelse:**

Miljøstyrelsen vil, når lejligheden gives, offentliggøre rapporter og indlæg vedrørende forsknings- og udviklingsprojekter inden for miljøsektoren, finansieret af Miljøstyrelsens undersøgelsesbevilling. Det skal bemærkes, at en sådan offentliggørelse ikke nødvendigvis betyder, at det pågældende indlæg giver udtryk for Miljøstyrelsens synspunkter. Offentliggørelsen betyder imidlertid, at Miljøstyrelsen finder, at indholdet udgør et væsentligt indlæg i debatten omkring den danske miljøpolitik.

Må citeres med kildeangivelse.

# Indhold

<b>Forord</b> .....	<b>5</b>
<b>Konklusion og sammenfatning</b> .....	<b>6</b>
<b>Summary and conclusions</b> .....	<b>7</b>
<b>1. Læsevejledning</b> .....	<b>8</b>
<b>2. Baggrund og formål</b> .....	<b>9</b>
<b>3. Transportprocesser og fasefordeling</b> .....	<b>10</b>
3.1 Advektion .....	10
3.2 Hydrodynamisk dispersion .....	11
3.2.1 Mekanisk dispersion .....	11
3.2.2 Diffusion .....	12
3.3 Fasefordeling.....	13
3.3.1 Sorption .....	13
3.3.2 Flygtighed.....	14
3.4 Blandingsforureninger og Fri fase .....	15
3.5 Nedbrydning .....	15
3.6 Kolloid transport.....	16
3.7 Sprækketransport .....	16
3.8 Samlet stoftransport .....	17
<b>4. Gennemgang af eksisterende risikovurderingsværktøjer</b> .....	<b>18</b>
4.1 Afgrænsning .....	18
4.2 Numeriske værktøjer .....	18
4.3 Analytiske risikovurderingsværktøjer .....	19
4.3.1 R-UNSAT.....	19
4.3.2 ConSim .....	20
4.3.3 RISC Workbench 4.0 .....	21
4.4 Andre analytiske modeller og screeningsværktøjer .....	22
<b>5. Matematiske udtryk til beregning af nedadrettet vertikal stoftransport</b> .....	<b>24</b>
5.1 Konceptuelle modeller og forudsætninger for beregninger .....	24
5.2 Model A – Homogen vandmættet ler.....	26
5.2.1 Matematiske modeller .....	26
5.2.2 Sammenfatning på Model A .....	30
5.3 Model C – Umættet sand.....	30
5.3.1 Matematiske modeller .....	32
5.3.2 Sammenfatning af Model C .....	36
5.3.3 Diskussion af 1D kontra 3D løsninger.....	36
5.3.4 Anbefaling for Model C.....	40
5.4 Model D.....	40
5.4.1 Matematiske modeller .....	42
5.4.2 Sammenfatning af Model D.....	47
5.5 Transport gennem vandmættet sprækket ler (Model B).....	48
5.5.1 Matematiske modeller .....	49

5.5.2	Strømning i sprækker .....	49
5.5.3	Stoftransport i sprækker .....	50
5.5.4	Praktiske erfaringer med sprække-transport .....	53
5.6	Samlede konklusioner .....	54
5.7	Videnskabelige udfordringer .....	54
<b>6.</b>	<b>Nyt risikovurderingskoncept .....</b>	<b>56</b>
6.1	Valg af konceptuel model .....	56
6.2	Faseopdelt risikovurdering for den umættede zone .....	56
6.3	Sammenhæng mellem risikovurderingen for vertikal transport og grundvandszonen.....	56
6.4	Beskrivelse af de enkelte faser (1-3) .....	56
6.4.1	Fase 1 .....	56
6.4.2	Fase 2 .....	57
6.4.3	Fase 3 .....	57
	<b>Referencer .....</b>	<b>59</b>
	<b>Symboliste.....</b>	<b>66</b>

**Bilag 1: Beregningseksempler**

**Bilag 2: 1. ordens nedbrydningsrater for den umættede zone**

# Forord

Denne rapport beskriver de gennemførte aktiviteter, der ligger til grund for opdateringen af JAGG 1.5 til JAGG 2.1 (Miljøstyrelsens værktøj for risikovurdering af forurenede lokaliteter), og omhandler beregning af den vertikale transport af opløste stoffer fra en kilde og ned til det førstkommende, betydende grundvandsmagasin.

Nærværende projekt er udført af NIRAS A/S i samarbejde med Institut for Miljø & Ressourcer på DTU. Herudover har Matt Lahvis fra SHELL Global Solutions, USA, fungeret som ekstern sparringspartner.

Projektet er igangsat af Miljøstyrelsen under Teknologipuljen, og er et af i alt 4 projekter, der danner grundlag for en revision af JAGG - Miljøstyrelsens værktøj for risikovurdering af forurenede lokaliteter.

De tre øvrige projekter omhandler:

- 1) En revision af indeklimaberegninger. Udført af COWI.
- 2) En revidering af den eksisterende stofdatabase med fysisk/kemiske parametre og nedbrydningsrater for relevante komponenter, herunder forskellige oliekomponenter, pesticider m.v., samt fasefordeling af oliekomponenter i poreluft og porevand. Udført af COWI i samarbejde med DHI.
- 3) Vertikal transport i opsprækket jord. Udført af Institut for Vand og Miljøteknologi, DTU.

Der har foregået en løbende koordination mellem projektgrupperne.

Miljøstyrelsen har nedsat en styregruppe til at følge arbejdet. Styregruppen har udover projektlederne for de enkelte projekter omfattet følgende personer:

Arne Rokkjær, Miljøstyrelsen  
Ole Kiilerich, Miljøstyrelsen  
Thomas H. Larsen, Orbicon  
Morten Nielsen, Region Syddanmark  
Jesper Elkjær Christensen, Region Hovedstaden  
Peter Kjeldsen, DTU  
Poul L. Bjerg, DTU  
Per Brask, Oliebranchens Miljøpulje

# Konklusion og sammenfatning

På baggrund af den gennemførte litteraturgennemgang er de væsentligste processer, der har betydning for stoftransport under både mættede og umættede forhold, beskrevet. I forbindelse hermed er en række eksisterende risikoværktøjer og programmer, der specifikt omhandler risikovurdering af den umættede zone, gennemgået og beskrevet.

Der er opstillet 4 forskellige konceptuelle modeller (A-D), som dækker de typiske situationer, der forekommer ved praktisk risikovurdering. For hver af de 4 konceptuelle modeller er der opstillet simple 1-dimensionale beregningsudtryk for transporten fra kilden og ned til det underliggende grundvand. De konceptuelle modeller inkluderer vertikal transport igennem både mættet (Model A) og umættet homogen jord (Model C) samt opsprækket jord (Model B). Den sidste model (Model D) omhandler horisontal transport ved diffusion under umættede forhold, og er primært tænkt som et hjælpeværktøj. For alle modeller er der indbygget en mulighed for at medtage biologisk nedbrydning i beregningerne. Nedbrydningen antages at følge en 1.ordens kinetik, og der er sammenstillet en oversigt over publicerede 1.ordens rater for en række aromatiske forbindelser (BTEX) og alifatiske kulbrinter under umættede forhold.

Der er beskrevet et idéoplæg til faseopdelt risikovurdering for den umættede zone. Konceptet indeholder 3 faser, hvor den første fase anvendes i forbindelse med indledende undersøgelser - og hvor biologisk nedbrydning ikke medtages i beregningerne. I den anden fase kan der, når en række specifikke forudsætninger er opfyldt, gennemføres beregninger, hvor nedbrydning medtages i form af meget konservative 1.ordens rater. Endelig gennemføres der i fase 3 en egentlig dokumentation af den faktiske rate på en given lokalitet, og der udføres monitoring over en tilstrækkelig lang periode til at kunne vise, at der er stabile forhold i den umættede zone.

Med udgangspunkt i de konceptuelle modeller A, C og D og det udarbejdede faseopdelte koncept, er der udarbejdet en række konkrete eksempler til illustration af, hvordan risikovurderingen i praksis kan gennemføres. Udover selve beregningen ved hjælp af de nye udtryk, er der givet en række konkrete anvisninger på, hvordan det kan dokumenteres, at der sker biologisk nedbrydning, samt anvisninger på hvilke metoder, der kan anvendes til fastlæggelse af den aktuelle nedbrydningsrate.

De opstillede beregningsudtryk for model A, C og D er programmeret i EXCEL, og Model A og C er indarbejdet i Miljøstyrelsens risikovurderingsværktøj JAGG 2. Model B, som vedrører opsprækkede media, er videreudviklet i projektet, udført af DTU/Chambon et al., 2010/.

# Summary and conclusions

Based on a detailed literature study, the most important processes involved in contaminant transport from the source to the groundwater zone under both saturated and unsaturated conditions are described. The study includes evaluation of risk assessment tools and programs that specifically concern the vertical contaminant transport in the unsaturated zone above groundwater reservoirs.

Four conceptual models (A-D) for typical risk assessment situations are defined and for each of the four conceptual models, a simple 1 dimensional mathematical solution for transport from the source and down to underlying groundwater is proposed.

The conceptual models include vertical transport through both saturated (model A and unsaturated soil media (model C) as well as fractured media (model B). The fourth model (Model D) concerns the horizontal transport by diffusion in unsaturated media, and is primarily considered to be a tool to support the establishment of a conceptual site model.

For all models, biological degradation can be included in the mathematical solution. Biological degradation is assumed to follow 1. Order kinetics and an overview of published 1. Order rates for degradation in unsaturated soil media for a range of aromatic and aliphatic petroleum are included in the report. A proposal for a stepwise approach to risk assessment for the unsaturated zone is presented with basis in the theoretical models and mathematical solutions. The proposal includes three phases, in which the first phase is applicable for a preliminary investigation and the theoretical calculations do not include biological degradation. In the second phase, biological degradation in the form of conservative first order degradation rates can be included in the theoretical calculations for risk assessment if a range of specific conditions are fulfilled. Finally in the third phase, documentation is required to confirm the theoretical calculations and degradation rates. Monitoring must be carried out for a sufficient period of time to confirm that stable conditions have been achieved in the unsaturated zone.

Based on the conceptual models A, C and D and the proposed stepwise risk assessment procedure, a number of practical examples have been included to illustrate the risk assessment approach. In addition to calculations using the different risk assessment models, guidelines have also been included on methods for documentation of biological degradation rates.

The proposed mathematical solutions for model A, C and D have been programmed in Excel and model A and C are incorporated in The Danish Environmental Protection Agency's risk assessment tool, JAGG2. Model B is concerned with fractured media and was further developed and programmed in a project conducted by the Technical University of Denmark (DTU), /Chambon et al., 2010/.

# 1. Læsevejledning

Denne rapport beskriver baggrunden for – og den opdaterede metode til beregning af vertikal stoftransport fra en jordforurening og ned til det førstkommende betydende magasin.

For at kunne anvende den nye beregningsmetode kræves et indgående kendskab til JAGG 2.1, samt et vist kendskab til de faktorer, der er af betydning for spredning af organiske stoffer i den umættede zone.

Rapporten er opdelt i følgende kapitler:

1. Læsevejledning
2. Baggrunden for og formålet med opgradering af JAGG beskrives kort.
3. Her beskrives de processer, der er styrende for transport og fasefordeling af organiske forureninger i den umættede zone.
4. I dette kapitel beskrives en række udenlandske risikovurderings-værktøjer og numeriske modeller med henblik på identifikation af brugbare koncepter og ideer.
5. På baggrund af kapitel 3 og 4 er der opstillet en række konceptuelle modeller, der dækker typiske danske forhold mht. geologi og magasinforhold, og for hver model er der opstillet en stoftransportligning, der udgør grundlaget for de egentlige beregninger og udarbejdelsen af de nye beregningsmoduler.
6. I dette kapitel beskrives en faseinddelt beregning af risikoen. Hvordan dette kan gennemføres, er vist i eksemplerne i Bilag 1.

Referencerne til litteraturstudie og symbolliste findes efter kapitel 6.

I bilag 1 er der angivet en række eksempler på anvendelse af beregninger i forbindelse med en risikovurdering, og i bilag 2 er der henvisninger til metoder til vurdering af 1. ordens nedbrydnings-rater.



## 2. Baggrund og formål

Miljøstyrelsen har i 2006 igangsat et arbejde med henblik på revision af formelgrundlaget og det tilhørende regnearksprogram JAGG 1.5 for risikovurdering af forurenede lokaliteter, omfattet af den offentlige indsats. Det daværende formelgrundlag i JAGG 1.5 var baseret på arbejde, der var 10 år gammelt eller ældre. Miljøstyrelsen igangsatte derfor i foråret 2006 en proces med henblik på at afdække, hvilke områder af formelgrundlaget og JAGG 1.5, der havde størst behov for revision. Processen har bl.a. omfattet indkaldelse af forslag til ændringer fra en bred vifte af interessenter og afholdelse af workshop med inviterede deltagere på baggrund af de indsendte forslag. Disse aktiviteter blev herefter sammenfattet i et projektkatalog.

På baggrund af anbefalingerne i projektkataloget har Miljøstyrelsen i løbet af 2007 valgt at i gang-sætte 4 projekter med revision af forskellige dele af formelgrundlaget og indholdet i risiko-vurderingsværktøjet JAGG. De tre øvrige projekter er relateret til en opgradering af indeklimadelen, håndtering af fasefordeling af olieprodukter og en generel opdatering af stofdatabasen samt vertikal transport i opsprækkede media.

Overordnet har projektet, i sammenhæng med de tre øvrige projekter igangsat af Miljøstyrelsen, til formål at levere det faglige input til en opgradering af Miljøstyrelsens værktøj til risikovurdering af forurenede lokaliteter – JAGG 2.1. Det specifikke formål med projektet er at opstille et formel-grundlag for beregning af opløste komponenter fra de terrænnære jordlag til underliggende grundvandsmagasiner. Formelgrundlaget skal kunne beskrive transport igennem forskellige jordtyper, herunder effekten af de processer, som stofferne underkastes.

Alle væsentlige aspekter af vertikal transport af organiske forureninger, fra øvre jordlag til først-kommende grundvandsmagasin, skal belyses. De parametre, der indgår i beregningerne, skal evalueres mht. muligheden for måling i praksis, samt mht. hvilken følsomhed, der er knyttet til de resultater, der fås på baggrund af disse parametre.

# 3. Transportprocesser og fasefordeling

I det følgende gives en kort generel gennemgang af de væsentligste processer for transport og fasefordeling af organisk forurening i den umættede zone.

## 3.1 Advektion

Advektion er betegnelsen for, at et stof vil transporteres med nettostrømningen af den fase,  $\alpha$  (luft eller vand), som stoffet befinder sig i Nazaroff & Alvarez-Cohen (2001). Ved advektion flyttes massecentrum af forureningsstoffet. Den advektive stoftransport er proportional med fasens strømningshastighed,  $v_\alpha$ , og kan beskrives ved følgende udtryk /Fetter, 1999/:

$$\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = -\mathbf{v}_\alpha \cdot \nabla C_\alpha$$

$C_\alpha$ :	KONCENTRATION I FASEN $\alpha$
$v_\alpha$ :	FASENS GENNEMSNITLIGE STRØMNINGSHASTIGHED
$t$ :	TID

LIGNING 1

Fasens gennemsnitlige strømningshastighed kan bestemmes ved Darcys lov, og den advektive stoftransport er dermed styret af trykforskelle samt jordens konduktivitet/permeabilitet.

$$\mathbf{v}_\alpha = \frac{\mathbf{q}_\alpha}{\theta_\alpha} = -\frac{1}{\theta_\alpha} \mathbf{K} \cdot \nabla h_\alpha$$

$v_\alpha$ :	FASENS GENNEMSNITLIGE STRØMNINGSHASTIGHED
$q_\alpha$ :	FASENS DARCY HASTIGHED
$\theta_\alpha$ :	FASEMÆTNING
$K$ :	HYDRAULISK LEDNINGSEVNE
$\nabla h_\alpha$ :	DEN HYDRAULISKE GRADIENT

LIGNING 2

Strømning i den umættede zone kompliceres af, at vandindholdet,  $\theta_w$ , ikke er konstant over tid og dybde. I den umættede zone er både jordens vandindhold og den hydrauliske konduktivitet således funktioner af porevandets trykhøjde/tension. Generelt vil den hydrauliske ledningsevne for den enkelte fase stige med en stigende mætning af denne fase. Der eksisterer flere empiriske formler til bestemmelse af sammenhængen mellem  $K$  og  $\theta_\alpha$  i umættet zone, hvor udtryk præsenteret af van Genuchten (1980) og Brooks & Corey (1964) hører til de oftest benyttede.

I den umættede zone sker advektiv stoftransport i vandfasen primært som følge af opløsning i den infiltrerende nettonedbør. Transport ved advektion i gasfasen forekommer pga. trykgradienter, der bl.a. kan stamme fra variationer i barometertrykket, temperaturforskelle, variationer i grundvandspejlet samt densitetsforskelle /AVJ, 2004; Mendoza & McAlary, 1990; Mendoza & Frind, 1990; Pruess, 1998; Falta et al., 1989/.

### 3.2 Hydrodynamisk dispersion

Hydrodynamisk dispersion er en samlet betegnelse for diffusion og mekanisk dispersion /Fetter, 1999/. Både diffusion og dispersion fører til en stofspredning væk fra forureningskildens massecentrum, og medfører således en fortynding af kilden. Diffusion og dispersion kan være meget svære at skelne fra hinanden. Som hovedregel er diffusion den dominerende transportproces ved lave strømningshastigheder eller korte afstande, mens dispersion er dominerende ved høje strømningshastigheder /Flury & Gimmi 2002/.

Den hydrodynamiske dispersion beskrives med udgangspunkt i den hydrodynamiske dispersionskoefficient,  $D_\alpha$ , der er givet ved:

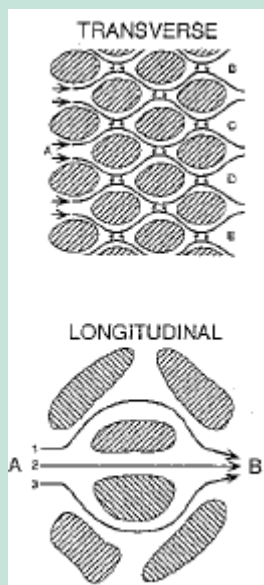
$$D_\alpha = D_\alpha^* + \alpha v_\alpha$$

$D_\alpha^*$ :	HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT
$D_\alpha$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT
$\alpha$ :	DISPERSIVITET
$v_\alpha$ :	FASENS GENNEMSITLIGE STRØMNINGSHASTIGHED

LIGNING 3

#### 3.2.1 Mekanisk dispersion

Mekanisk dispersion beskriver spredning grundet hastighedsfluktuationer på mikroskopisk niveau, der opstår, fordi fasestrømningen som følge af det porøse mediums struktur ikke bevæger sig med den samme hastighed langs alle flowlinier /Fetter, 1999/. Den mekaniske dispersion fører til stofspredning både på langs (longitudinalt) og på tværs (transversalt) af strømningsretningen. Både den longitudinale og transversale dispersion afhænger af fasens strømningshastighed samt af hhv. den longitudinale og transversale dispersivitet,  $\alpha_L$  og  $\alpha_T$  (jf. Ligning 3). Dispersivitet er et karakteristika, der gælder for det enkelte medie /Fetter 1999/. Den transversale dispersivitet er erfaringsmæssigt mindre end den longitudinale /Bedient et al., 1997; Gelhar et al., 1992/.



FIGUR 3-1  
PRINCIPPET I MEKANISK DISPERSION. FRA APPELO & POSTMA (1996)

Dispersiviteter er generelt svære at estimere, og afhænger bl.a. af mediets heterogenitet. Ofte er det derfor nødvendigt at benytte estimerede værdier baseret på tidligere feltforsøg. Samtidig skal det bemærkes, at litteraturen vedrørende dispersiviteter overvejende fokuserer på horisontal transport i mættet zone og ikke på vertikal transport i umættet zone. I mættet zone har tidligere studier peget på, at dispersiviteter er skalaafhængig, idet længere transporttider medfører en større spredning, da forureningen introduceres til mere og mere heterogenitet /Gelhar et al., 1992/. Nyere studier bekræfter, at der er en sammenhæng mellem longitudinal dispersivitet og skalaeffekter/Schulze-Makuch, 2005; Xu & Eckstein, 1995/. Det er blevet foreslået, at der findes en lineær sammenhæng mellem transversal og longitudinal dispersivitet, men det er ikke eftervist i den videnskabelige litteratur /Aziz et al., 2000/. At der eksisterer en relation mellem longitudinal og transversal dispersiviteter, anses derimod som meget tvivlsomt. De nyeste studier peger på, at de disse relationer ofte fører til en overestimering af de transversale dispersiviteter. Således har flere studier vist transversale dispersiviteter, der er meget mindre end dem, der er opnået ud fra tidligere antagede relationer /Olsson & Grathwohl, 2006; Maier & Grathwohl, 2005/.

Hvorvidt estimerede dispersivitets-værdier og relationer gældende for mættet zone kan overføres til en beskrivelse af vertikal transport i umættet zone, må endvidere betegnes usikkert. I forhold til transport i umættet zone forventes diffusion dog at være mere dominerende end mekanisk dispersion.

### 3.2.2 Diffusion

Diffusion er stoftransport som følge af koncentrationsgradienter. Et opløst stof vil bevæge sig fra områder med høj stofkoncentration til områder med lav stofkoncentration. Massefluxen af det diffunderende stof er proportional med koncentrationsgradienten, hvilket er udtrykt ved Fick's 1. lov. Hvis koncentrationsgradienten ændrer sig over tid, benyttes Ficks 2. lov til at beskrive stof-fluxen /Fetter, 1999/:

$$\frac{\partial C_{\alpha}}{\partial t} = \theta_{\alpha} D_{\alpha}^{*} \nabla^2 C_{\alpha}$$

$C_{\alpha}$ :	KONCENTRATION I FASEN
$t$ :	TID
$\theta_{\alpha}$ :	FASEMÆTNING
$D_{\alpha}^{*}$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT

#### LIGNING 4

Det ses, at den diffusive flux er afhængig af den effektive diffusionskoefficient,  $D_{\alpha}^{*}$ . Den effektive diffusionskoefficient er reduceret i forhold til den frie diffusionskoefficient,  $D_{d,\alpha}$ , hvilket er udtrykt som følger:

$$D_{\alpha}^{*} = D_{d,\alpha} \tau$$

$D_{\alpha}^{*}$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT
$D_{d,\alpha}$ :	FRIE DIFFUSIONSKOEFFICIENT
$\tau$ :	TORTUOSITET

#### LIGNING 5

Reduktionsfaktoren,  $\tau$ , kaldes tortuositeten og skyldes, at der er tale om porøse medier, hvor diffusionsvejen bliver længere, da stoffet skal udenom fx sandkorn /Sonnenborg et al., 2001; Fetter, 1999/. I den umættede zone er tortuositeten meget afhængig af vandindholdet. Den diffusions-drevne flux i gasfasen vil således være større i tørre områder end i våde områder /Moldrup et al., 2000, Moldrup et al., 2004/. Diffusionen i luft er ca. 10.000 gange så stor som i vand /AVJ, 1998; Lindhardt & Christensen, 1996/.

I tilfælde af, at et stofs diffusionskoefficient ikke er kendt, kan det estimeres vha. forskellige empiriske udtryk /Lindhardt & Christensen, 1996/. Der eksisterer ligeledes flere teoretiske og empiriske udtryk til at estimere et medies tortuositet og dermed også til at bestemme den effektive diffusionskoefficient /Moldrup et al., 2000; Moldrup et al., 2004; Millington & Quirk, 1961/.

### 3.3 Fasefordeling

Når en organisk forurening indtræder i et jord- og grundvandsmiljø, vil en række processer og reaktioner have afgørende betydning for, hvordan forureningen vil fordele og sprede sig i miljøet. I hydrogeologiske miljøer skal der tages hensyn til, at forureningen kan forekomme i op til 4 forskellige faser. Forurening med organiske stoffer vil dels kunne optræde på dampform i poreluften og dels på opløst form i porevandet. Derudover vil en del af stoffet kunne sorbere til jordens faste partikler, og endelig kan de organiske stoffer også optræde i separat fase (fri fase) /Kjeldsen & Christensen, 1996/.

Et stof vil udveksles mellem de eksisterende faser i et forsøg på at opnå ligevægt, der som hovedregel antages at forløbe momentant og være fuldstændig reversibel. I praksis vil denne ligevægt dog sjældent være hverken momentan eller fuldstændig reversibel, hvilket bl.a. er årsag til, at der ofte observeres en tilbageslagseffekt efter en jordventilering eller en afværgepumpning er stoppet. Forudsætningerne om momentan og reversibel ligevægt har kun indflydelse på transiente situationer, hvor antagelserne vil være gyldige, når transportprocesserne er langsommere end ligevægtsreaktionerne. For stationære betragtninger har dette imidlertid ingen betydning.

Hvordan forureningen fordeler sig mellem faserne afhænger i høj grad af den pågældende forurenings fysiske og kemiske egenskaber samt af omgivelserne. Faktorer som pH, temperatur, vandindhold samt jordens indhold af organisk kulstof vil således kunne influere på, hvordan forureningen fordeler sig. Desuden kan den konkrete sammensætning af den separate fase ligeledes have betydning for fasefordelingen /Kjeldsen & Christensen, 1996 og Andersen & Oberender, 2006/.

Fasefordelingen betyder, at der i den umættede zone kan opnås stoffkoncentrationer i både luft, vand og jord. Dette kan influere på mobiliteten af stoffet og i sidste ende have stor betydning for, hvor stor en risiko forureningen udgør.

#### 3.3.1 Sorption

Opløste forureningsstoffer vil kunne binde sig til jorden ved en proces kaldet *sorption*. Fordelingskoefficienten,  $K_d$ , beskriver, hvorledes et forureningsstof i ligevægt fordeler sig mellem den faste og opløste fase.  $K_d$  er en stoffs specifik parameter, som afhænger af jordens indhold af organisk materiale,  $f_{oc}$ , og  $K_{oc}$ , der betegner fordelingskoefficienten for et organisk stof i en jord, der består af 100 % kulstof. For opløste organiske forureninger benyttes ofte følgende relation, der gælder for  $f_{oc}$ -værdier  $> 0,1\%$  og  $\log K_{ow}$ -værdier  $< 5$  /Kjeldsen & Christensen, 1996/:

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

$K_d$ : FORDELINGSKOEFFICIENT MELLEML VAND OG JORD

$K_{oc}$ : FORDELINGSKOEFFICIENT MELLEML VAND OG EN 100 % ORGANISK KULSTOFFASE

$f_{oc}$ : FRAKTION AF ORGANISK KULSTOF I JORD

#### LIGNING 6

I Kjeldsen (1996) er flere empiriske udtryk til estimering af  $K_{oc}$  (og dermed  $K_d$ ) præsenteret. Disse tager hovedsagligt udgangspunkt i det specifikke stofs oktanol-vandfordelingskoefficient,  $K_{ow}$ .

Sorption vil forårsage en reduktion af forureningsfrontens hastighed, idet forureningsstofferne sorberer og derved tilbageholdes i jorden. Denne reduktion beskrives ved hjælp af retardationsfaktoren,  $R$ , beregnet ud fra stoffets  $K_d$ -værdi samt det porøse mediums egenskaber.

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\theta_w} K_d$$

$R$ : RETARDATIONSFAKTOR

$\theta_w$ : VANDFYLDT PORØSITET

$\rho_b$ : BULKDENSITET

$K_d$ : FORDELINGSKOEFFICIENT MELLEM VAND OG JORD

#### LIGNING 7

Ligning 7 beskriver retardationen af stoffet som følge af sorption fra vandfasen til jordpartiklerne. Forureningsfrontens gennemsnitlige hastighed,  $v_s$ , er nu givet ved:

$$v_s = \frac{v_w}{R}$$

$v_s$ : FORURENINGSFRONTENS GENNEMSITLIGE HASTIGHED

$v_w$ : GENNEMSITLIG VANDSTRØMNINGSHASTIGHED

$R$ : RETARDATIONSFAKTOR

#### LIGNING 8

For Ligning 7 og 8 antages det, at ligevægtsfordelingen mellem fast og opløst fase kan beskrives ved en lineær isotherm /Kjeldsen, 1996/.

Sorption fra poreluften til jordpartiklerne vil i den umættede zone kun spille en betydelig rolle ved lave vandindhold. Ved vandindhold over det kritiske vandindhold, der defineres som det vandindhold, hvor jordpartiklerne er dækket af 10 lag vandmolekyler, antages det, at der ikke forekommer nævneværdig sorption direkte fra gasfasen /Kjeldsen, 1996/.

### 3.3.2 Flygtighed

Forureningsstoffer kan også udveksles mellem gas- og væskefasen. Fordelingen af stof mellem luft- og vandfasen kan ved ligevægt udtrykkes med udgangspunkt i Henrys konstant,  $H$  [ $\text{Pa m}^3\text{mol}^{-1}$ ], der beskriver et stofs tendens til at flygte fra en vandig opløsning til luften /Kjeldsen & Christensen, 1996/:

$$H = \frac{P_a}{C_w}$$

$H$ : HENRY'S KONSTANT

$P_a$ : STOFFETS PARTIALTRYK OVER VANDFASEN

$C_w$ : KONCENTRATION I VANDFASEN

#### LIGNING 9

Oftes opereres med den dimensionsløse Henrys konstant,  $K_H$ , da denne direkte udtrykker forholdet mellem koncentrationen i luft- og vandfasen /Kjeldsen & Christensen, 1996/:

$$K_H = \frac{H}{R_g \cdot T} = \frac{C_a}{C_w}$$

$K_H$ :	DIMENSIONSLØS HENRYS KONSTANT
$H$ :	HENRYS KONSTANT
$R_g$ :	GASKONSTANT (8,314 J.MOL <sup>-1</sup> . K <sup>-1</sup> )
$T$ :	TEMPERATUR
$C_a$ :	KONCENTRATION I GASFASE
$C_w$ :	KONCENTRATION I VANDFASEN

#### LIGNING 10

Stoffer med lave værdier af  $K_H$  har en lav flygtighed.

### 3.4 Blandingsforureninger og Fri fase

Ofte vil en forurening bestå af flere komponenter med forskellige egenskaber, hvilket kan komplicere forureningstransporten. Dette gælder især for olie- og benzinprodukter, der kan bestå af hundredvis af komponenter. Ved modellering af stoftransport i den umættede zone betragtes i mange tilfælde kun enkelt-komponenter og der ses bort fra tilstedeværelsen af andre stoffer. Dette resulterer i, at forureningsfluxen fra kildeområdet i visse tilfælde vil blive overestimeret /Karapanagioti et al., 2004/, hvilket skyldes, at "konkurrencen" mellem de forskellige komponenter negligeres. En anden typisk måde at håndtere blandingsforureninger er ved at operere med total-koncentrationer (eksempelvis måles i forbindelse med olieforureninger ofte for totalkulbrinter). På den måde opfattes den totale forurening som én komponent. Ulempen ved denne fremgangsmåde er, at de forskellige komponenter i olien/NAPL (Non Aqueous Phase Liquid) har meget forskelligartede egenskaber og at sammensætningen af komponenter samtidig vil ændre sig over tid. Således er det erfaret, at de mest flygtige og vandopløselige stoffer først vil blive udvasket fra olien.

Organiske stoffer kan optræde som fri fase i undergrunden. Ved tilstedeværelse af fri fase vil koncentrationen i de øvrige faser (vand, luft og jord) være konstante og lig mætningskoncentrationen, dog under forudsætning af ligevægt /Kjeldsen & Christensen, 1996/.

Den frie fase kan bevæge sig vertikalt som en separat, ikke-blandbar væske (NAPL) ved advektiv transport, der primært er styret af tyngdekraften, trykgradienter og kapillarkræfter. Ved transporten igennem den umættede og mættede zone tilbageholdes immobile "dråber" af fri fase i jordmatricen – såkaldt residual fase-forurening. Disse zoner med residual fase, samt eventuelle ophobninger af NAPL "pools", kan tjene som kilde til grundvandsforurening i årtier eller århundreder. Udslip af fri fase NAPL forurening kan på den måde give anledning til meget komplicerede forureningsspredninger /Butts & Broholm, 1996/.

I opsprækkede geologiske formationer som fx moræneler vil bevægelsen af den fri fase hovedsageligt ske ved sprækketransport. Fra sprækkerne kan der ske diffusion til jordmatricen /Broholm, 1999/.

### 3.5 Nedbrydning

Forurening vil kunne omdannes både biologisk og abiotisk. Biotransformation forekommer, når mikroorganismer benytter det forurenende stof til deres metaboliske aktivitet og derigennem omdanner stoffet til enten andre mindre forbindelser eller fuldstændigt til CO<sub>2</sub> og H<sub>2</sub>O (mineralisering).

Den biologiske nedbrydning forløber primært i vandfasen, og nedbrydning i den umættede zone vil således være afhængig af vandindholdet. Den biologiske nedbrydning modelleres oftest ud fra en 1. ordens reaktionskinetik:

$$\frac{\partial C_w}{\partial t} = -\lambda C_w$$

$C_w$ :	KONCENTRATION I VANDFASEN
$t$ :	TID
$\lambda$ :	1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE

#### LIGNING 11

Heraf følger, at stofkoncentrationen vil aftage eksponentielt med tiden /Fetter, 1999/.

Andre mulige nedbrydningsmodeller er bl.a. Monod kinetik og momentan reaktionsmodel /Bedient et al., 1997/. Disse vil dog ikke blive beskrevet yderligere her, da de generelt kræver et forholdsvist stort datagrundlag og derfor ikke vurderes egnede i forbindelse med et screeningsværktøj til risikovurdering. Endvidere har flere studier fundet, at nedbrydning simuleret med 1. ordens kinetik giver god overensstemmelse med observationer fra felten /Höhener et al., 2006/. I mange tilfælde vil der dog ikke ske nedbrydning i den umættede zone, hvilket som regel skyldes, at de rette betingelser ikke er til stede. I umættet sand vil ilt eksempelvis sjældent være en begrænsende faktor, og anaerobt nedbrydelige stoffer vil derfor ikke kunne nedbrydes her.

I nogle situationer vil forurening ikke nedbrydes fuldstændigt, hvilket resulterer i dannelsen af nedbrydningsprodukter. Disse nedbrydningsprodukter kan i nogle tilfælde være ligeså alvorlige - eller værre end den oprindelige forurening, hvilket kan være væsentligt for en risikovurdering. Eksempelvis er den væsentligste nedbrydningsproces for de klorerede opløsningsmidler, PCE og TCE, *reduktiv anaerob deklorerings*, hvor en trinvis fjernelse af kloratomer medfører en sekventiel transformation fra PCE til TCE til DCE til VC til ethen /Jørgensen et al., 2005/. I risikovurderingsværktøjet BIOCHLOR er denne type nedbrydning beskrevet ved en sekventiel 1.ordens kinetik /Aziz et al., 2000/.

### 3.6 Kolloid transport

Kolloider er mikroskopiske partikler opløst i vand, der ofte er så små (10 – 10.000 nm), at de ikke vil blive filtreret fra i jordmatricen. Hvis kolloiderne indeholder organisk stof, kan de fungere som bærere for forurenende (hydrofobe) forbindelser, og på den måde øge stoftransporten /de Jonge et al., 2004/. Kolonneforsøg har vist, at kolloider kan influere på transporten af forurening gennem den umættede zone, mens der på nuværende tidspunkt mangler dokumentation for størrelsen og betydningen af kolloidtransport-processer i felten /de Jonge et al., 2004/. Det er som følge heraf valgt at se bort fra kolloidtransport i det videre forløb.

### 3.7 Sprækketransport

I lavpermeable jordlag (som fx ler og kalk) kan der ofte forekomme sprækker, der kan have en signifikant betydning for den vertikale stoftransport fra en forureningskilde til et grundvandsmagasin. Således vil størstedelen af den infiltrerende nedbør forløbe gennem sprækkerne, hvilket kan resultere i en hurtig stoftransport gennem den ellers lavpermeable formation. Samtidig vil stof under transporten gennem sprækkerne kunne transporteres ind i jordmatricen ved diffusion, og på den måde være kilde til forurening i mange år frem.

Sprækketransport er særligt relevant i Danmark, hvor store dele af de øverste jordlag består af moræneler, der fra naturens side er opsprækket /Klint & Gravesen, 1999/. Dermed vil forurening kunne passere lige igennem den biologisk aktive øvre jordzone, og således kun blive reduceret i et begrænset omfang som følge af nedbrydning /Mortensen, 2001; Jørgensen et al., 2006/.



### 3.8 Samlet stoftransport

På baggrund af de ovenfor beskrevne processer kan en samlet generel stoftransportligning opstilles:

$$R \frac{\partial C_{\alpha}}{\partial t} = D_{\alpha} \nabla^2 C_{\alpha} - v_{\alpha} \nabla C_{\alpha} - \lambda_{\alpha} C_{\alpha}$$

$R$ :	RETARDATIONSFAKTOR
$C_{\alpha}$ :	KONCENTRATION I FASEN
$t$ :	TID
$D_{\alpha}$ :	HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT
$v_{\alpha}$ :	FASENS GENNEMSNTLIGE STRØMNINGSHASTIGHED
$\lambda$ :	1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE

#### LIGNING 12

Transportligningen gælder for både vand- og gasfasen. Afhængig af problemstillingen, kan overflødig led fjernes fra Ligning 12. Udtrykket i Ligning 12 medtager ikke sprækketransport.

# 4. Gennemgang af eksisterende risikovurderingsværktøjer

## 4.1 Afgrænsning

I forbindelse med kvantificering af risiko er modelværktøjer ofte effektive og økonomiske at benytte. En lang række lande anvender således modelleringsværktøjer i forbindelse med forureningsundersøgelser, risikomanagement og vandressourceplanlægning. Der eksisterer derfor i dag et stort antal risikovurderingsværktøjer i Europa og USA, både kommercielle og frit tilgængelige /CLARINET, 2002/. Flere af disse værktøjer kan benyttes til at vurdere risikoen fra forureninger i den umættede zone.

Der er tidligere udført en del sammenlignende studier af forskellige risikovurderingsmodeller, hvor værktøjernes styrker og svagheder er blevet belyst. På baggrund af sammenligningsstudier foretaget i US EPA (1999), Walden (2005), Troldborg & Lemming (2005) og Larsen (2006) er en række af de mest anvendte udenlandske værktøjer til risikovurdering udpeget og undersøgt nærmere i nærværende projekt. Der er i den forbindelse kun fokuseret på modeller, hvor den umættede zone er inkluderet. Med udgangspunkt heri ønskes det at få et overblik over, hvorledes den vertikale transport fra den umættede zone til grundvandet er beskrevet i andre værktøjer.

## 4.2 Numeriske værktøjer

Der eksisterer et stort antal numeriske modeller, der kan anvendes til simulering af stoftransport i den umættede zone. Her nævnes blot et lille udvalg af disse.

Programmerne T2VOC, TMVOC og TOUGH2 kan benyttes til at simulere 3-fase flow (vand, luft og VOC) i 3 dimensioner. TMVOC og TOUGH2 kan endvidere håndtere multikomponent NAPL. Programmerne er bl.a. designet til at simulere spredning af NAPL/VOC i umættet zone og til at evaluere effekten ved remediering med fx vakuum-ekstraktion eller air sparging på forurenede lokaliteter. Forureningsspredningen sker ved advektion og diffusion, og der tages hensyn til både nedbrydning og sorption. /Pruess & Battistelli, 2002; Pruess et al., 1999; Falta et al., 1995/.

Med den numeriske finite element model HYDRUS kan multifase- og multikomponent-strømning i variabelt mættede medier simuleres i 2 eller 3 dimensioner. HYDRUS kan tage højde for stoftransport ved advektion og dispersion i vandfasen samt diffusion i gasfasen, og kan derudover bl.a. inkludere ikke-lineær sorption, sekventiel 1.ordens nedbrydning og kolloidtransport.

MOFAT kan ligeledes simulere koblet 3-fase flow og transport (vand samt multikomponent NAPL på væske- og gasform) i 2 dimensioner. MOFAT inkluderer spredning ved hydrodynamisk dispersion og advektion samt nedbrydning og sorption.

Der eksisterer endvidere flere numeriske modeller, der specifikt er designet til at beskrive stoftransport i opsprækkede porøse medier. Her hører bl.a. MACRO, FRACTRAN, FRAC3D, MT3D

og CXTFIT til de mest benyttede /Sudicky & McLaren, 1998; Zheng & Wang, 1999; Toride et al., 1999/. Princippet i disse modeller beskrives i afsnit 5.5.

### 4.3 Analytiske risikovurderingsværktøjer

I forhold til en revidering af JAGG er det især de analytiske værktøjer, der er interessante at se nærmere på. I Tabel 4-1 findes en oversigt over udvalgte risikovurderingsværktøjer. Det fremgår heraf, at der er stor forskel på, hvilke processer og elementer, de enkelte værktøjer medtager. De analytiske risikovurderingsværktøjer betragter alle stoftransporten til grundvandet i én dimension og simplificerer generelt transportprocesserne i den umættede zone betydeligt, og er således langt mindre nuancerede end de beskrevne numeriske modelværktøjer. Hovedparten af disse værktøjer tager således kun højde for transport i vandfasen, der enten beskrives ved ren advektion/opløsning i infiltration (fx ROME, LEACH og SAM) eller på baggrund af en advektion dispersionsligning (fx RISC4, ConSim og VADSAT). Det betyder, at disse programmer, ligesom JAGG, kun forudser en risiko, såfremt der sker infiltration gennem det forurenede område, og derfor er mindre velegnede ved tilstedeværelse af lavpermeable dæklag eller fx direkte under bygninger og befæstede arealer.

Flere af værktøjerne inkluderer stoftransport i gasfasen ved diffusion, men primært kun i forbindelse med vertikalt opadrettet transport til jordoverfladen, samt ved indeklimatebetragtninger. Således opererer RISC4 med afdampning for at beregne udtømningen af kilden, men kun som en opadgående transportproces. R-UNSAT udmærker sig ved at kunne benyttes til at estimere den diffusive stoftransport til grundvandet. Dette gøres med udgangspunkt i Fick's lov.

Flere af de betragtede værktøjer inkluderer både 1. ordens nedbrydning og lineær sorption ved beskrivelsen af stoftransporten. Ingen af værktøjerne kan beskrive fri fase-transport, men i flere af programmerne er der mulighed for at tage højde for tilstedeværelse af immobil residual fase i kildeområder. I RISC4 er koncentrationen i kildeområdet eksempelvis konstant lig stoffets vandige opløselighed ligeså længe, der er residual fase til stede.

ConSim er det eneste af de undersøgte screeningsværktøjer, der tager højde for sprækketransport. Dette gøres vha. et dual-porosity modul, hvor transporten gennem matrix og sprækker beskrives adskilt.

I det følgende gives en kort beskrivelse af 3 af de analytiske værktøjer, som umiddelbart virker mest anvendelige. Det drejer sig om modellen R-UNSAT samt de kommercielle programmer ConSim og RISC4.

#### 4.3.1 R-UNSAT

R-UNSAT er en model udviklet af Matthew A. Lahvis og Arthur L. Baehr for U.S. Geological Survey til simulering af reaktiv stoftransport i den umættede zone. R-UNSAT kan benyttes i mange sammenhænge, bl.a. til bestemmelse af biologiske nedbrydningsrater for organiske stoffer i den umættede zone /Lahvis & Baehr, 1997/.

R-UNSAT tager højde for transport i både gas- og vandfasen. Gastransporten er udelukkende baseret på Ficks lov om diffusion, og programmet tager derfor ikke hensyn til advektion i gasfasen. Transporten i vandfasen beskrives ved en advektion dispersionsligning. R-UNSAT medregner ligevægtsfordelinger mellem jord, vand og luft, og det er endvidere muligt at inkludere nedbrydning.

Den styrende transportligning i R-UNSAT er givet ved (med koncentrationen i gasfasen  $C_a$  som den afhængige variabel):

$$a \frac{\partial C_a}{\partial t} + \nabla \cdot \left[ \frac{q_w}{H} C_a - D_{eff} \nabla C_a \right] = \omega$$

$C_a$ :	KONCENTRATION I GASFASEN
$t$ :	TID
$a$ :	FASELIGEVEGTSKONSTANT
$D_{eff}$ :	EFFEKTIV HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT
$q_w$ :	DARCY HASTIGHED I VANDFASEN
$\omega$ :	REAKTIONSRATE
$H$ :	HENRYS KONSTANT

LIGNING 13

Forureningskilden samt den umættede zone karakteriseres gennem en række rand- og initialbetingelser, og modellen kan således tilpasses mange forskellige forureningsituationer. På baggrund af de angivne rand- og initialbetingelser løser R-UNSAT ovenstående ligning numerisk.

I R-UNSAT kan en mere simpel analytisk 1D model ligeledes vælges. Denne tager kun højde for diffusion i gas, hvorfor Ligning 13 reducerer sig til Fick's 2. lov i 1 dimension:

$$\frac{\partial C_a}{\partial t} = \frac{D_{eff}}{a} \frac{\partial^2 C_a}{\partial z^2}$$

$C_a$ :	KONCENTRATION I GASFASEN
$t$ :	TID
$a$ :	FASELIGEVEGTSKONSTANT
$D_{eff}$ :	EFFEKTIV HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT

LIGNING 14

hvor  $a$  og  $D_{eff}$  begge antages konstant i hele den umættede zone. Igen kan rand- og initialbetingelserne vælges og tilpasses efter den givne forureningsituation.

#### 4.3.2 ConSim

ConSim (*Contamination Impact on Groundwater: Simulation by Monte Carlo Method*) er et risikovurderingsværktøj udgivet af UK Environment Agency. Programmet er opdelt i tre niveauer. I *niveau 1* beregnes porevands-koncentrationen i kilden i den umættede zone med udgangspunkt i ligevægtsbetrægtninger. I *niveau 2* beregnes transporttiden gennem den umættede zone samt forureningskoncentrationen ved grundvandsspejlet og i grundvandsmagasinet under forureningskilden. I *niveau 3* estimeres koncentrationen i grundvandsmagasinet i et nedstrøms receptorpunkt /Davison & Hall, 2003/.

I ConSim anvendes følgende 1-dimensionelle advektion dispersionsligning til beskrivelse af transporten gennem en homogen umættet zone<sup>1</sup>:

<sup>1</sup> Transportligningen i ConSim er vist Ligning 15 som den fremgår i Davison & Hall (2003). Umiddelbart giver Ligning 15 dog ikke mening. Sandsynligvis mangler venstresiden af udtrykket at blive ganget med retardationsfaktoren, indikerende at nedbrydning forløber både i den opløste og sorberede fase.

$$\frac{\partial C_w}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C_w}{\partial z^2} - v \frac{\partial C_w}{\partial z} - R\lambda C_w$$

$C_w$ :	KONCENTRATION I VANDFASEN
$t$ :	TID
$v$ :	POREVANDSHASTIGHED
$D_L$ :	LONGITUDINAL HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT
$R$ :	RETARDATIONSFAKTOR
$\lambda$ :	1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE

#### LIGNING 15

Transportligningen løses vha. Laplace transformationer. Det fremgår, at ConSim ikke medtager diffusion i gasfasen, men udelukkende baserer den vertikale transport på advektion og dispersion i vandfasen. Løsningen tager derudover højde for 1. ordens nedbrydning og sorption.

I ConSim kan det vælges, om koncentrationen i kilden skal være konstant, eksponentielt aftagende, eller der kan angives en koncentrationsfunktion for kilden.

Det er muligt at tage højde for sprække-transport i den umættede zone ved at benytte *dual porosity* modulet i ConSim. Dette modul egner sig bedst til sprække-transport, hvor jordmatricen er meget lavpermeabel som fx ved opsprækket kalk /Davison og Hall, 2003/. I *dual porosity* modulet beregnes transporttiden og koncentrationen ved grundvandsspejlet separat for matrix og for sprækkerne. Mediets hydrauliske egenskaber angives for både matrix og sprækker. Hvis netto-nedbøren overstiger matricens hydrauliske ledningsevne (der antages gradient på 1), vil det over-skydende vand transporteres via sprækker. Stofftransporten gennem matricen beskrives med udgangspunkt i advektion dispersionsligningen ovenover. I tilfælde af sprække-transport antages det, at koncentrationen ved grundvandsspejlet ved forureningens ankomst er den samme som i kilden /Davison og Hall, 2003/. Det antages således, at der ikke sker nedbrydning samt diffusion ud i matricen ved transporten gennem sprækkerne.

#### 4.3.3 RISC Workbench 4.0

RISC (Risc-Integrated Software for Cleanups) Version 4.0 er et kommercielt risikovurderingsværktøj, der er udviklet af Lynn Spence og BP Oil Ltd. Programmet indeholder 3 moduler, der kan anvendes til at evaluere risikoen i forhold til grundvandet fra tre forskellige forureningssituationer. Det drejer sig om modulerne *Vadose zone source*, *Dissolved source* og *Saturated soil source* /Spence, 2001/. I det følgende beskrives kun *Vadose zone* modulet, da de to øvrige tager udgangspunkt i forureningskilder beliggende i grundvandet.

*Vadose zone source* modellen er en 1-dimensionel model, der kan anvendes til at estimere grundvandskoncentrationer ud fra en forureningskilde i den umættede zone. Forureningstransporten i *Vadose zone* modulet beskrives ligeledes med udgangspunkt i en advektion dispersionsligning, der er baseret på Ünlü et al. (1992). Denne ligning er ligeledes fundamentet for computerprogrammet VADSAT /Rixey, 2002/. Ligningen inddrager advektion og longitudinal dispersion i vandfasen, lineær sorption og 1. ordens nedbrydning:

$$R \frac{\partial C_w}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C_w}{\partial z^2} - v \frac{\partial C_w}{\partial z} - \lambda C_w$$

$C_w$ :	KONCENTRATION I VANDFASEN
$t$ :	TID
$v$ :	POREVANDSHASTIGHED
$D_L$ :	LONGITUDINAL HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT
$R$ :	RETARDATIONSFAKTOR
$\lambda$ :	1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE

#### LIGNING 16

Det antages i RISC4, at koncentrationen i kilden,  $C_w(O, t)$ , aftager eksponentielt med rate-koefficienten,  $\beta$ , pga. udvaskning som følge af opløsning i infiltrerende nedbør og fordampning og diffusion til jordoverfladen /Spence, 2001/. RISC4 medtager derimod ikke vertikal, nedadrettet diffusiv transport i gasfasen.

Den diffusive flux fra kilden bestemmes vha. Fick's 1. lov, hvor der benyttes en effektiv diffusionskoefficient, hvori der kan medregnes tilstedeværelse af en lavpermeabel geologisk linse. Den effektive diffusionskoefficient bestemmes med udtryk fra Millington & Quirk (1961) på baggrund af den luft- og vandfyldte porøsitet. Det antages, at der ikke sker bionedbrydning i selve kilden, grundet toksiske koncentrationsniveauer /Spence, 2001/.

Vandindholdet i den umættede zone antages konstant og estimeres ud fra udtryk præsenteret i Brooks og Coreys (1964). På baggrund heraf kan vandets gennemsnitlige strømningshastighed,  $v$ , beregnes.

I *Vadose zone* modulet skal forureningskildens geometri være kendt (dybde, længde og bredde) og en kildekonzentration skal indtastes. For den umættede zone skal nettoinfiltrationen og dybden af den umættede zone kendes. Jordtypespecifikke parametre kan indtastes eller vælges fra database for forskellige jordtyper. Desuden kan 1. ordens nedbrydningsrater indtastes for både umættet og mættet zone, eller default-værdier kan benyttes.

#### 4.4 Andre analytiske modeller og screeningsværktøjer

Der findes i litteraturen et stort antal analytiske modeller til beskrivelse af stoftransporten til grundvandet. Tabel 4-1 viser en oversigt over nogle af de analytiske screeningsmodeller, der fundet ved den udførte vidensindsamling. Med henblik på at finde en optimal matematisk beskrivelse af stoftransporten til førstkommande grundvandsmagasin vil flere af modellerne blive beskrevet nærmere i det følgende kapitel.

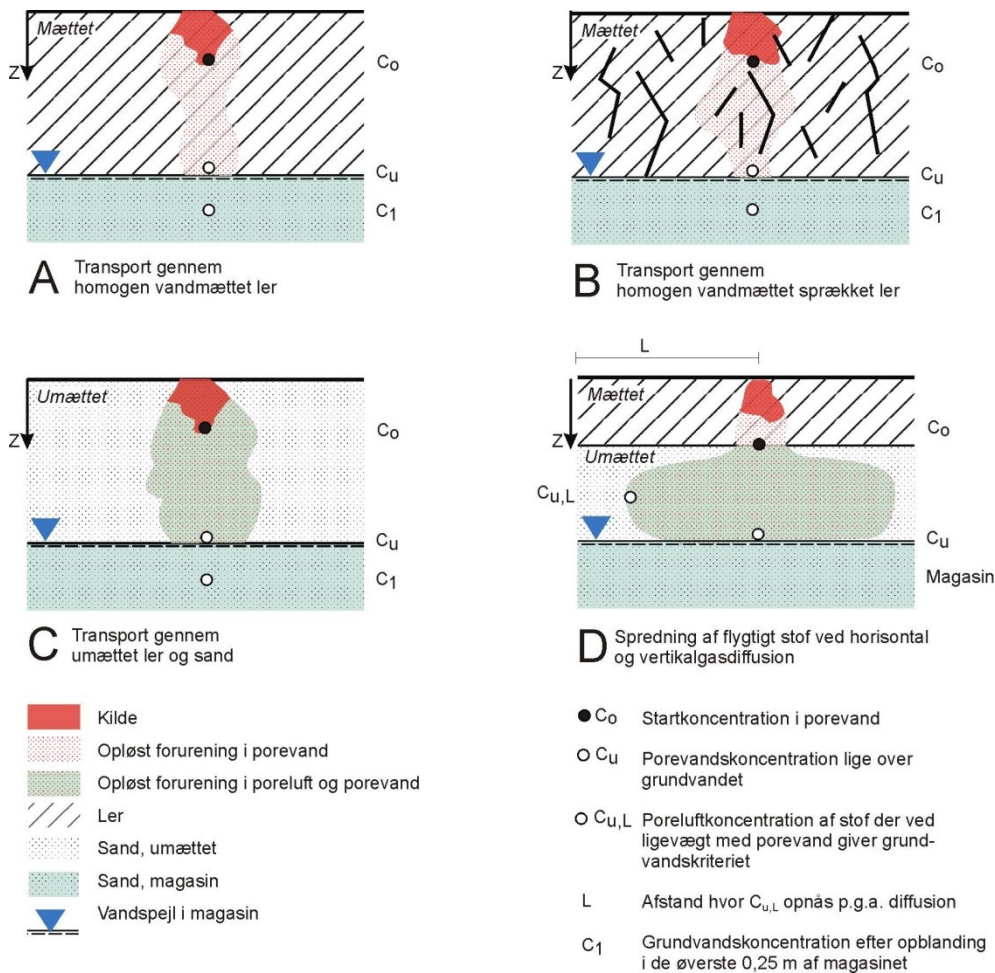
**TABEL 4-1**  
OVERSIGT OVER UDVALGTE ANALYTISKE MODELLER

MODEL	DIMENSION	STATIONÆR (S)/ TRANSIENT (T)	PROCESSER I VAND			PROCESSER I GAS			NEDBRYDNING	SORPTION/ LIGEVÆGT	RANDBETINGELSER
			ADVEKTION	DIFFUSION	DISPERISON	ADVEKTION	DIFFUSION	DISPERISON			
ÜNLÜ ET AL. (1992)	1D	T	X		X				X	X	EKSPONENTIELT AFTAGENDE KILDEKONCENTRATION. KONCENTRATIONSGRADIENT ER 0 UENDELIG LANGT NEDE.
JURY ET AL. (1983)	1D	T	X	X		X	X		X	X	C ER 0 UENDELIG LANGT NEDE. FLUXEN VED JORDOVERFLADEN ER BESTEMT VED <i>STAGNANT AIR BOUNDARY</i> . KILDEN ER PLACERET LIGE VED JORDOVERFLADEN
SHAN & STEPHENS (1995)	1D	T	X	X	X	X	X	X	X	X	KONCENTRATION ER 0 VED JORDOVERFLADEN. KONCENTRATIONSGRADIENT ER 0 VED VANDSPEJL.
DOMENICO & ROBBINS (1987)	3D	S+T	X		X				X		KONTINUERT FORURENINGSUDLEDNING FRA FLADEKILDE. KONCENTRATIONSGRADIENT ER 0 UENDELIG LANGT NEDE.
AZIZ ET AL. (2000)	3D	T	X		X				X	X	AFTAGENDE ELLER KONTINUERT FORURENINGSUDLEDNING FRA FLADEKILDE. KONCENTRATIONSGRADIENT ER 0 UENDELIG LANGT NEDE.
NIELSEN (2007)	3D	T	X	X	X	X	X	X		X	KONTINUERT FORURENINGSUDLEDNING FRA FLADEKILDE. KONCENTRATIONSGRADIENT ER 0 UENDELIG LANGT NEDE.
WEXLER (1992)	1D-3D	S+T	X	X	X				X	X	LØSNINGER PRÆSENTERET MED FLERE FORSKELLIGE RANDBETINGELSER
HUNT (2006)	1D-3D	S+T	X	X	X				X	X	LØSNINGER PRÆSENTERET MED FLERE FORSKELLIGE RANDBETINGELSER
LAHVIS & BAEHR (1997)	1D	S+T					X			X	LØSNING PRÆSENTERET MED FLERE 4 FORSKELLIGE RANDBETINGELSER
RIXEY (2002)	1D	T	X						X	X	EKSPONENTIELT AFTAGENDE KILDEKONCENTRATION. ENSARTET KONCENTRATION I UMÆTTET ZONE.
VAN GENUCHTE N (1982)	1D	T	X	X	X				X	X	LØSNINGER PRÆSENTERET MED FLERE FORSKELLIGE RANDBETINGELSER

# 5. Matematiske udtryk til beregning af nedadrettet vertikal stoftransport

## 5.1 Konceptuelle modeller og forudsætninger for beregninger

I det følgende beskrives den vertikale transport af organiske stoffer i umættet zone med udgangspunkt i 4 forskellige konceptuelle modeller. De konceptuelle modeller er vist i Figur 5-1 og forventes at kunne repræsentere langt de fleste konkrete forureningssager og transportprocesser.



FIGUR 5-1: OVERSIGT OVER KONCEPTUELLE MODELLER

For hver konceptuel model vil der blive fokuseret på at finde en matematisk transportmodel, der inkluderer de væsentligste processer for den givne situation. Dette vil blive gjort med udgangspunkt i eksisterende litteratur og modeller.



Forureningssituationerne illustreret i de konceptuelle modeller A, C og D kan beskrives med udgangspunkt i den samme generelle transportligning (jf. Ligning 12, afsnit 3.8), da disse er baseret på homogen geologi.

For sprækketransportmodellen (Model B) vil de "almindelige" transportligninger derimod sjældent være tilstrækkelige. Der er derfor foretaget en opdeling af de konceptuelle modeller, således at sprækketransportmodellen (Model B) beskrives separat fra de 3 andre.

Som udgangspunkt skal den matematiske formulering af de konceptuelle modeller kunne beskrive både den stationære og transiente vertikale stoftransport fra en vedvarende kontinuert forureningskilde. Som illustreret i Figur 5-1 er målet at bestemme koncentrationen lige over grundvandsspejlet under forureningskilden,  $C_u$ . Denne koncentration indgår efterfølgende i beregningen af  $C_l$  i JAGG's grundvandsmodul (se endvidere afsnit 5.3.3). For Model D vil der dog også blive fokuseret på at finde en transient løsning, der kan bruges til at vurdere omfanget af den laterale stofspredning med tiden. Model D skal således ses som et hjælpeværktøj.

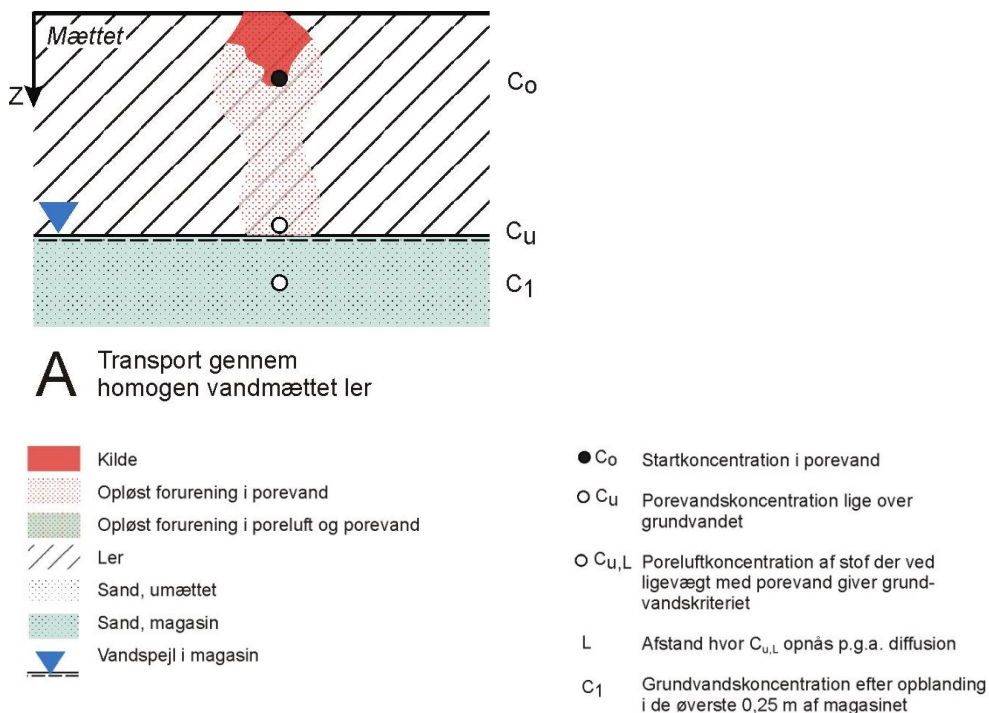
De præsenterede konceptuelle modeller har naturligvis nogle begrænsninger. Der vil kunne optræde situationer, der ikke kan beskrives udelukkende ved én af de opstillede konceptuelle modeller.

Modellerne bygger endvidere generelt på følgende antagelser:

- Homogene forhold, dvs. at alle jordspecifikke parametre (vandindhold, porøsitet, bulk densitet, dispersiviteter og indhold af organisk kulstof) og stofspecifikke parametre (diffusionskoefficienter, Henrys konstant,  $K_{oc}$  og nedbrydningsrater) er konstante over tid og sted
- Lineær, reversibel og momentan ligevægt
- Sorption sker udelukkende fra vandfasen
- Advektion sker kun i én dimension (z-retningen) og er nedadrettet med konstant hastighed
- Nedbrydning beskrives med en 1.ordens kinetik og forløber kun i vandfasen
- Koncentrationen i forureningskilden er konstant med tiden
- Modellerne regner på enkeltkomponenter eller totalkoncentrationer. Tilstedeværelse af flere stoffer (multikomponent/blandingsforurening) påvirker ikke transporten, dvs. molfraktionen antages konstant
- Fri fase-transport er ikke inkluderet, og modellerne beskriver kun opløst transport

Disse antagelser og begrænsninger vurderes rimelige og skal ses i relation til, at JAGG er et screeningsværktøj til risikovurdering og ikke en avanceret stoftransportmodel. I forhold til at sikre, at JAGG bevarer en generel anvendelighed, er det derfor vigtigt, at de konceptuelle beskrivelser ikke bliver for detaljerede, og at mængden af parametre begrænses.

## 5.2 Model A – Homogen vandmættet ler



FIGUR 5-2  
KONCEPTUEL MODEL A

Dæklaget er i denne situation vandmættet, og der vil derfor ikke ske gastransport. De væsentligste transportprocesser gennem et homogent vandmættet ler vil være opløsning i infiltrerende nettonedbør (advektion), diffusion og mekanisk dispersion i vand. Derudover vil både nedbrydning og sorption have indflydelse på stoftransporten.

Idet diffusion og mekanisk dispersion samlet kan beskrives ved en hydrodynamisk dispersionskoefficient  $D_w$  (jf. afsnit 3.2), kan den styrende transiente transportligning for Model A opstilles:

$$R \frac{\partial C_w}{\partial t} = D_w \nabla^2 C_w - v \frac{\partial C_w}{\partial z} - \lambda C_w$$

$C_w$ :	KONCENTRATION I VANDFASEN
$z$ :	VERTIKAL AFSTAND FRA KILDEN
$t$ :	TID
$v$ :	POREVANDSHASTIGHED
$D_w$ :	HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT I VAND
$R$ :	RETARDATIONSFAKTOR
$\lambda$ :	1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE

LIGNING 17

### 5.2.1 Matematiske modeller

I det følgende præsenteres både 1- og 3-dimensionelle løsninger til denne transportligning. Som det fremgår af Ligning 17 vil disse løsninger beskrive den vertikale stoftransport med strømningsretningen langs z-aksen.

1-dimensionelle løsninger til Ligning 17 er præsenteret flere steder i litteraturen. van Genuchten & Alves (1982) har samlet både stationære og transiente 1D-løsninger til Ligning 17, opstillet med udgangspunkt i flere forskellige randbetingelser (bl.a. hvor forureningsudledning er beskrevet som værende kontinuert, eksponentielt aftagende eller som en puls). For en forureningskilde med

konstant koncentration (dvs.  $C(o,t) = C_o$ ) gælder følgende transiente 1D-løsning til Ligning 17 /van Genuchten & Alves, 1982/:

$$C(z,t) = \frac{C_0}{2} \left[ \exp\left(\frac{(v-u)z}{2D_z}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{Rz-ut}{2\sqrt{D_z Rt}}\right) + \exp\left(\frac{(v+u)z}{2D_z}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{Rz+ut}{2\sqrt{D_z Rt}}\right) \right]$$

HVOR

$$u = v \left( 1 + \frac{4\lambda D_z}{v^2} \right)^{1/2}$$

$$D_z = v\alpha_L + D_w^*$$

$C$ :	KONCENTRATION
$z$ :	VERTIKAL AFSTAND FRA KILDEN
$t$ :	TID
$C_0$ :	KONCENTRATION I KILDEN
$\operatorname{erfc}$ :	DEN KOMPLIMENTÆRE ERROR FUNCTION
$v$ :	POREVANDSHASTIGHED
$D_z$ :	HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT
$\alpha_L$ :	LONGITUDINAL DISPERSIVITET
$D_w^*$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I VAND
$R$ :	RETARDATIONSFAKTOR
$\lambda$ :	1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE

#### LIGNING 18

Den tilsvarende stationære løsning er udtrykt ved /van Genuchten & Alves, 1982/:

$$C(z) = C_0 \exp\left(\frac{(v-u)z}{2D_z}\right)$$

$C$ :	KONCENTRATION
$z$ :	VERTIKAL AFSTAND FRA KILDEN
$C_0$ :	KONCENTRATION I KILDEN
$v$ :	POREVANDSHASTIGHED
$D_z$ :	DEFINERET I LIGNING 18
$u$ :	DEFINERET I LIGNING 18

#### LIGNING 19

I Domenico (1987) er en approksimeret 3-dimensionel analytisk løsning til Ligning 17 præsenteret, hvor koncentrationen i forureningskilden med bredden  $X$  og længden  $Y$  er konstant (dvs.  $C(o,x,y,t) = C_o$  for  $-X/2 < x < X/2$  og  $-Y/2 < y < Y/2$ ). Den oprindelige løsning er opstillet uden hensyntagen til sorption, hvilket dog relativt nemt kan inkluderes ved at dividere  $D$ ,  $v$  og  $\lambda$  med retardationsfaktoren  $R$  (jf. Ligning 17). Løsningen langs centerlinjen (dvs. hvor  $x = y = 0$ ) ser ud som følger:

$$C(z,t) = \frac{C_0}{2} f_x f_y f_z$$

hvor

$$f_z = \exp\left(\frac{(v-u)z}{2D_z}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{Rz-ut}{2\sqrt{D_z R t}}\right)$$

$$f_x = \operatorname{erf}\left(\frac{X}{4\sqrt{D_x t / R}}\right)$$

$$f_y = \operatorname{erf}\left(\frac{Y}{4\sqrt{D_y t / R}}\right)$$

hvor

$$D_x = D_y = \alpha_T v + \theta_w D_w^*$$

$C$ : KONCENTRATION

$t$ : TID

$C_0$ : KONCENTRATION I KILDEN

$\operatorname{erfc}$ : DEN KOMPLIMENTÆRE ERROR FUNCTION

$\operatorname{erf}$ : ERROR FUNCTION

$v$ : POREVANDSHASTIGHED

$D_z$ : HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT

$\alpha_T$ : TRANSVERSAL DISPERSIVITET

$D_w^*$ : EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I VAND

$R$ : RETARDATIONSFAKTOR

$X$ : BREDE AF FORURENINGSKILDEN

$Y$ : LÆNGDE AF FORURENINGSKILDEN

$Z$ : VERTIKAL AFSTAND FRA KILDEN

$D_z$ : DEFINERET I LIGNING 18

$u$ : DEFINERET I LIGNING 18

#### LIGNING 20

Den analytiske løsning fra Domenico (1987) er ofte benyttet og er derudover implementeret i stort antal risikovurderingsværktøjer til beskrivelse af stoftransport i grundvand, deriblandt BIOCHLOR og BIOSCREEN /Aziz et al., 2000/. I tilfælde af steady-state kan Ligning 20 reduceres til /Domenico, 1987/:

$$C(z) = C_0 \exp\left(\frac{(v-u)z}{2D_z}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{X}{4\sqrt{\frac{D_x z}{v}}}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{Y}{4\sqrt{\frac{D_y z}{v}}}\right)$$

$C$ : KONCENTRATION

$C_0$ : KONCENTRATION I KILDE

$\operatorname{erf}$ : ERROR FUNCTION

$v$ : POREVANDSHASTIGHED

$D_z$ : HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT

$X$ : BREDE AF FORURENINGSKILDEN

$Y$ : LÆNGDE AF FORURENINGSKILDEN

$Z$ : VERTIKAL AFSTAND FRA KILDEN

$u$ : DEFINERET I LIGNING 18

#### LIGNING 21

Udtrykket fra Domenico (1987) er baseret på den 1-dimensionelle løsning præsenteret ovenover, men er udvidet til også at tage højde for dispersion i 3 dimensioner. Det skal bemærkes, at der kun er tale om en tilnærmet beskrivelse af dispersionen, og at Domenicos løsning i 3 dimensioner derfor ikke er eksakt. Der er især i nyere litteratur stillet spørgsmålstegn ved modellens nøjagtighed. I Srinivasan et al. (2007) er modellen sammenlignet med en eksakt løsning til Ligning 17, præsenteret af Wexler (1992). På baggrund heraf er der fundet uoverensstemmelser imellem de to modeller, der er mest udprægede, når den longitudinale dispersivitet er høj. Srinivasan et al. (2007) konstaterer, at den matematiske argumentation for Domenico (1987) modellen er mangelfuld, og at modellen afviger fra den eksakte løsning, medmindre den longitudinale dispersion er nul. Det skal dog pointeres, at Srinivasan et al. (2007) vurderer, at Domenicos løsning vil give en udmærket tilnærmelse under stationære forhold.

I Wexler (1992) og Hunt (2006) er analytiske løsninger til advektions dispersionsligningen fremstillet i 1, 2 og 3 dimensioner med forskellige randbetingelser. Begge præsenterer bl.a. løsninger til Ligning 17, hvor forureningskilden er beskrevet som en puls (*instantaneous*) eller ved en konstant/kontinuert kilde (*continuous*).

Den eksakte løsning til den samme problemstilling som beskrevet i Domenico (1987) er uden sorption givet ved /Wexler, 1992/:

$$C(z, x, y, t) = \frac{C_0}{8} \int_{\tau=0}^{\tau=t} f'_z(z, \tau) f'_x(x, \tau) f'_y(y, \tau) d\tau$$

hvor

$$f'_z(z, \tau) = \frac{z}{\sqrt{\pi D_z}} \exp\left(\frac{vz}{2D_z}\right) \cdot \exp\left[-\tau\left(\frac{v^2}{4D_z} + \lambda\right) - \frac{z^2}{4D_z\tau}\right] \cdot \tau^{-3/2}$$

$$f'_x(x, \tau) = \left\{ \operatorname{erf}\left[\frac{x + \frac{X}{2}}{2\sqrt{D_x\tau}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{x - \frac{X}{2}}{2\sqrt{D_x\tau}}\right] \right\}$$

$$f'_y(y, \tau) = \left\{ \operatorname{erf}\left[\frac{y + \frac{Y}{2}}{2\sqrt{D_y\tau}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{y - \frac{Y}{2}}{2\sqrt{D_y\tau}}\right] \right\}$$

$C$ :	KONCENTRATION
$t$ :	TID
$C_0$ :	KONCENTRATION I KILDE
$\operatorname{erf}$ :	ERROR FUNCTION
$v$ :	POREVANDSHASTIGHED
$D_z$ :	HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT
$X$ :	BREDDE AF FORURENINGSKILDEN
$Y$ :	LÆNGDE AF FORURENINGSKILDEN
$Z$ :	VERTIKAL AFSTAND FRA KILDEN
$\tau$ :	TORTUOSITET
$U$ :	DEFINERET I LIGNING 18.

#### LIGNING 22

Den stationære løsning vil efterfølgende kunne tilnærmes ved at lade tiden gå mod uendelig. Ulempen ved løsningen fra Wexler (1992) er, at en numerisk evaluering af integralet er påkrævet.

### 5.2.2 Sammenfatning på Model A

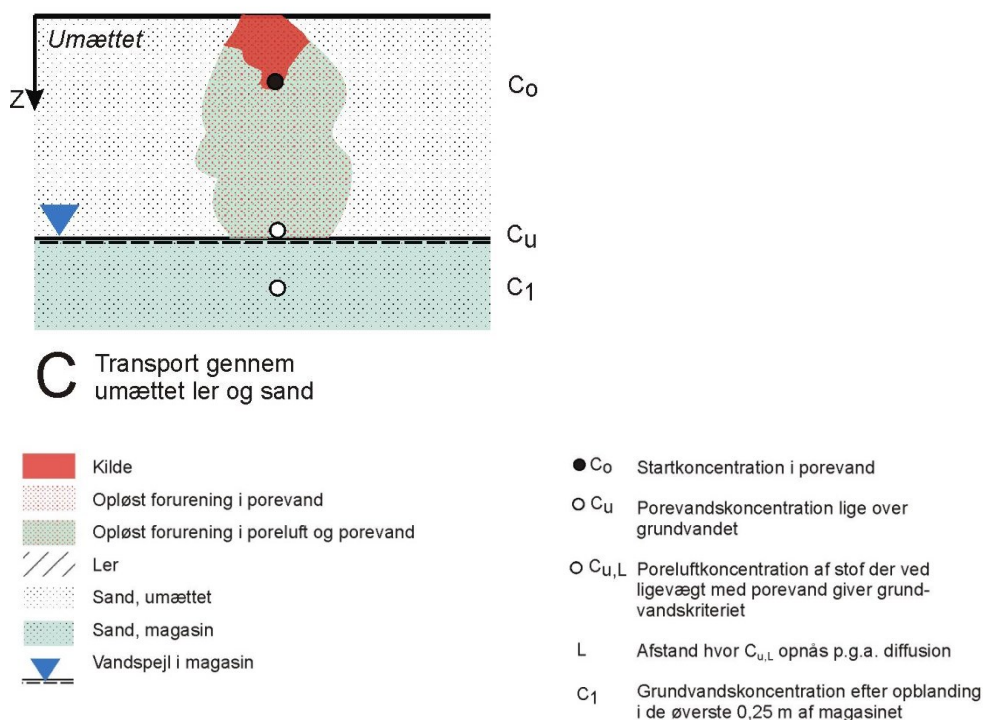
Ud fra litteraturgennemgangen er der fundet mulige løsningsmodeller i både 1, 2 og 3 dimensioner. Generelt vil stoftransport bedst kunne beskrives med 3D-modeller frem for de mere hyppigt anvendte 1D-modeller. Dette taler for at anvende den approksimerede løsning, baseret på Domenico (1987) (Ligning 21) eller ideelt set løsningen fra Wexler (1992) (Ligning 22), der som tidligere nævnt repræsenterer en eksakt løsning. Fordelen med en model i 1D er imidlertid, at løsningen er simplere og behøver færre input.

For at afklare hvilken betydning det har, om der anvendes en 1D- eller en 3D- løsning, er der foretaget en sammenligning af de to løsninger. På baggrund heraf er det konstateret, at der stort set ikke er nogen forskel mellem 1D-løsningen (Ligning 19) og 3D-centerlinjekoncentrationen (Ligning 21), når der er tale om en vandmættet homogen ler. I denne situation er den transversale dispersion så lille, at Domenicos 3D-udtryk reduceres til et 1D udtryk identisk med løsningen præsenteret af van Genuchten & Alves (1982).

Det vurderes derfor, at stoftransporten for Model A vil kunne beskrives tilfredsstillende med de 1-dimensionelle udtryk præsenteret i Ligning 18 og Ligning 19.

### 5.3 Model C – Umættet sand

I Model C er der tale om umættede forhold, og stoftransporten vil derfor kunne ske i både gas- og vandfasen. Forureningen vil i princippet kunne sprede sig ved advektion og hydrodynamisk dispersion i begge faser, men det forventes dog, at diffusion i vandfasen er uvæsentlig i forhold til de øvrige processer.



FIGUR 5-3:  
KONCEPTUEL MODEL C

Gastransport i umættet zone kan være en væsentlig proces, der kan bidrage til spredning af stoffer til grundvandet. Flere studier har fundet, at diffusion i gasfasen er en dominerende transportmekanisme i den umættede zone, især for flygtige stoffer /Jury et al., 1984; Christophersen et al., 2005/. Både feltundersøgelser og modeller har vist, at risikoen for grundvandet fra forureninger bestående af flygtige forbindelser vil være begrænset i områder med manglende eller sparsom

befæstning/dæklag som følge af stor diffusiv transport og tab til atmosfæren /Christophersen et al., 2005; Lahvis et al., 2004; Grathwohl et al., 2002; Lahvis & Rechmann, 2000/. I afsnit 5.3.3 er der foretaget eksempelberegninger i 1 og 3 dimensioner, der illustrerer, hvor meget horisontal og vertikal gastransport betyder kvantitativt for forureningsspredningen.

Den advektive gastransport kan være betinget af flere faktorer og er ligeledes i flere tilfælde fundet væsentlig for forureningstransporten i den umættede zone. Advektion i gasfasen drevet af barometriske trykvariationer kan være en afgørende transportproces, og er i flere studier konstateret væsentlig, når dybden af den umættede zone er stor /Parker, 2003; Choi & Smith, 2005; Tillman & Smith, 2005/. Advektion i gasfasen kan også være styret af densitetsforskelle. Densitetsdrevne advektion i gasfasen er demonstreret som værende signifikant ved høje permeabiliteter (groft sand og grus), mens diffusionen er styrende ved lavere permeabiliteter /Mendoza & McAlary, 1990; Falta et al., 1989/. Endelig har undersøgelser og studier vist, at den advektive gastransport kan være forårsaget af den infiltrerende nettonedbør /Celia & Binning, 1992/, omsætning af stof ved biokemiske reaktioner /Thorstenson & Pollock, 1989/ og vandspejlsfluktuationer /Choi & Smith, 2005; Parker 2003/.

I mange tilfælde ses imidlertid bort fra den advektive gastransport. Choi & Smith (2005) konkluderer, at den diffusive flux af VOC generelt er størrelsesordenen større end den advektive. Lahvis & Baehr (1997) argumenterer for, at advektiv gastransport som følge af barometriske trykændringer kan negligeres, hvis gaskoncentrationsmålinger er indsamlet over flere barometriske cykler. Dette er til dels i tråd med resultater fra Nielsen (2007), der på baggrund af et modelleringsstudie har observeret, at advektion (betinget af barometriske trykændringer) især forårsager udsving omkring den naturlige diffusive koncentrationsudvikling. I det følgende antages det derfor, at advektiv gastransport kan negligeres.

Advektion i vandfasen er også identificeret som værende væsentlig i forbindelse med transporten af forurening til grundvandet. Denne proces er specielt relevant for de mest opløselige stoffer /Dakhel et al., 2003; Lahvis & Rehmann, 2000/.

I umættet zone vil biologisk nedbrydning især være relevant for stoffer, der kan nedbrydes under aerobe forhold som fx aromatiske hydrocarboner. Flere studier har eksempelvis fundet, at aerob nedbrydning af olie- og benzinstoffer i den umættede zone har en signifikant indvirkning på koncentrationer i indeluften /DeVaull et al., 2002; Glenn et al., 2002; DeVaull et al., 1997; Lahvis et al., 1999/. Medtages nedbrydning ikke, kan en stor overestimering af koncentrationsbidraget til både grundvand og indeluft risikeres.

På baggrund af ovenstående betragtninger kan der for Model C formuleres en styrende transportligning, der medtager advektion og dispersion i vandfasen, diffusion i gasfasen, bionedbrydning samt sorption. Denne er baseret på Binning et al. (1995):

$$\frac{\partial(R\theta_w + K_H\theta_a)C_w}{\partial t} = \nabla(\theta_w \mathbf{D}_w + \theta_a K_H \mathbf{D}_a) \nabla C_w - q_w \frac{\partial C_w}{\partial z} - \theta_w \lambda C_w$$

$C_w$ :	KONCENTRATION I VANDFASEN
$R$ :	RETARDATIONSFAKTOR
$K_H$ :	DIMENSIONSLOS HENRYS KONSTANT
$\theta_w$ :	VANDFYLDT POROSITET
$\theta_a$ :	LUFTFYLDT POROSITET
$t$ :	TID
$q_w$ :	DARCY HASTIGHED
$D_w$ :	HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT I VAND
$D_a$ :	HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT I LUFT
$\lambda$ :	1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE

#### LIGNING 23

### 5.3.1 Matematiske modeller

Der eksisterer i litteraturen flere analytiske modeller til beskrivelse af den vertikale forurenings-transport i den umættede zone. Der er dog stor forskel på, hvilke processer disse modeller medtager.

Transiente analytiske løsninger i 1-dimension er bl.a. præsenteret af Ünlü et al (1992), Jury et al. (1983) og Shan & Stephens (1995). I løsningen af Jury et al. (1983) er advektiv og diffusiv transport i både vand- og gasfasen inkluderet, og modellen tager endvidere hensyn til sorption og 1.ordens nedbrydning. Der er ved opstillingen af modellen benyttet randbetingelser med henblik på at bestemme stoffluxen til atmosfæren, dvs. at fokus er på den opadrettede transport.

Shan & Stephens (1995) udtryk er opstillet med henblik på beskrivelse af vertikal VOC-transport gennem den umættede zone til grundvandet. Udtrykket inkluderer stationær advektion, diffusion og dispersion i både luft- og vandfasen samt sorption og 1. ordens nedbrydning. Løsningen er en videreudvikling af analytiske løsninger, præsenteret i Jury et al. (1983), og tager udgangspunkt i en uniform kilde med konstant initial koncentration i en specificeret dybde under jordoverfladen. Modellen af Ünlü et al. (1992) er baseret på udtryk fra van Genuchten & Alves (1982) og udgør grundlaget for risikovurderingsværktøjet RISC4 (se afsnit 4.3.3). Modellen tager højde for advektion i vandfasen, dispersion i vand, sorption og nedbrydning og beskriver koncentrationen i forureningskilden som eksponentielt aftagende pga. udvaskning. Løsningen fra Ünlü et al. (1992) er her modificeret således, at diffusion i gasfasen er inkluderet og kildekonzentrationen er konstant. Udtrykket fremgår af Ligning 24:



$$C_w(z,t) = \frac{C_0}{2} \left[ \exp\left(\frac{(v_w - u)z}{2D_z}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{R_T z - ut}{2\sqrt{D_z R_T t}}\right) + \exp\left(\frac{(v_w + u)z}{2D_z}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{R_T z + ut}{2\sqrt{D_z R_T t}}\right) \right]$$

hvor

$$u = v_w \left( 1 + \frac{4\lambda D_z}{v_w^2} \right)^{1/2}$$

$$v_w = \frac{N}{\theta_w}$$

$$R_T = \frac{R\theta_w + \theta_a K_H}{\theta_w}$$

$$D_z = \frac{\theta_w \alpha_L v_w + \theta_w D_w^* + \theta_a D_a^* K_H}{\theta_w}$$

$$D_a^* = D_{d,a} \frac{\theta_a^{2,5}}{n}$$

$$D_w^* = D_a^* \cdot 10^{-5}$$

$C_w$ :	KONCENTRATION I VANDFASEN
$t$ :	TID
$z$ :	VERTIKAL AFSTAND UNDER FORURENINGSKILDEN
$C_0$ :	KONCENTRATION I KILDEN
$\operatorname{erfc}$ :	DEN KOMPLIMENTÆRE ERROR FUNCTION
$v_w$ :	POREVANDSHASTIGHED
$q_w$ :	DARCY HASTIGHED I VAND
$R_T$ :	DEN TOTALE RETARDATIONSFAKTOR
$R$ :	RETARDATIONSFAKTOR DEFINERET I LIGNING 7
$K_H$ :	DIMENSIONSLOS HENRYS KONSTANT
$\theta_w$ :	VANDFYLDT PORØSITET
$\theta_a$ :	LUFTFYLDT PORØSITET
$N$ :	NETTOINFILTRATION
$D_z$ :	LANGSGÅENDE DISERSIONSKOEFFICIENT
$D_{d,a}$ :	FRIE DIFFUSIONSKOEFFICIENT I LUFT
$n$ :	TOTAL PORØSITET (SUM AF $\theta_w$ AF $\theta_a$ )
$D_a^*$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I LUFT
$D_w^*$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I VAND
$\alpha_L$ :	LONGITUDINAL DISPERSIVITET
$\lambda$ :	1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE

#### LIGNING 24

I ligning 24, er de effektive diffusionskoefficienter i luft ( $D_a^*$ ) og vand ( $D_w^*$ ) reduceret i forhold til de frie diffusionskoefficienter, da der er tale om porøse medier, hvor diffusionsvejen forlænges, da stoffet skal uden om fx sandkorn. Samtidig er diffusionskoefficienterne i den umættede zone meget afhængig af vandindholdet. Den diffusionsdrevne flux i gasfasen vil således være større i tørre områder end i våde områder. Generelt gælder, at diffusionen i luft er ca. 10.000 gange så stor som i vand /1,2,3/. De effektive diffusionskoefficienter viste i Ligning 24 udtrykkes efter Moldrup et al. /1/. Det valgte udtryk for den effektive diffusionskoefficient i luft ( $D_a^*$ ) er ændret i forhold til det normale udtryk i JAGG, givet ved Millington /4/. Det nye udtryk er i Wang et al. /5/ generelt vist at

give bedre estimater af  $Da$  og er i Nielsen /6/ samtidig vist at give et lidt større - og dermed mere konservativt estimat på  $Da$  i forhold til det normale udtryk i JAGG.

En stationær løsning af ligning 24 kan heraf udtrykkes som følger:

$$C(z) = C_0 \exp\left(\frac{(v_w - u)z}{2D_z}\right)$$

$C$ :	KONCENTRATION
$Z$ :	VERTIKAL AFSTAND FRA KILDEN
$C_0$ :	KONCENTRATION I KILDEN
$v_w$ :	POREVANDSHASTIGHED
$D_z$ :	DEFINERET I LIGNING 24
$u$ :	DEFINERET I LIGNING 24

#### LIGNING 25

Det ses, at Ligning 24 og Ligning 25 er næsten helt analoge til udtrykkene for den vertikale 1D-stoftransport for Model A, hvilket skyldes, at alle de indgående parametre i Model C forudsættes konstante. Forskellen er blot, at ligningerne for Model C tager højde for transport og ligevægt med gasfasen. Sættes den luftfyldte porøsitet,  $\theta_a$ , til 0 (hvorved  $\theta_w$  bliver lig totalporøsiteten), opnås således den opstillede løsningsmodel for Model A.

På samme måde kan 3D-transportudtrykkene fra Model A omskrives til at gælde for den umættede zone. Dette er gjort af Nielsen (2007), der baseret på udtryk fra Domenico & Robbins (1985) har udledt en løsning til Ligning 23 i 3-dimensioner uden nedbrydning, der kan tage hensyn til, at transporten kan foregå i 2 faser (vand og luft). Den generelle løsning fremgår af Ligning 24. Løsningen er i forhold til Nielsen (2007) her modificeret, således at nedbrydning er inkluderet, mens den advektive gastransport er negligeret.

$$C(z, x, y, t) = \frac{C_0}{8} \exp\left(\frac{(v_w - u)z}{2D_z}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{R_T z - ut}{2\sqrt{D_z R_T t}}\right) \left\{ \operatorname{erf}\left(\frac{x + \frac{X}{2}}{2\sqrt{\frac{D_x z}{v_w}}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x - \frac{X}{2}}{2\sqrt{\frac{D_x z}{v_w}}}\right) \right\} \left\{ \operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\frac{D_y z}{v_w}}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\frac{D_y z}{v_w}}}\right) \right\}$$

hvor

$$D_x = D_y = \frac{\theta_w \alpha_T v_w + \theta_w D_w^* + \theta_a D_a^* K_H}{\theta_w}$$

$C$ :	KONCENTRATION I VANDFASEN
$t$ :	TID
$C_0$ :	KONCENTRATION I KILDEN
$\operatorname{erfc}$ :	DEN KOMPLIMENTÆRE ERROR FUNCTION
$\operatorname{erf}$ :	ERROR FUNCTION
$X$ :	BREDDE AF FORURENINGSKILDEN
$Y$ :	LÆNGDE AF FORURENINGSKILDEN
$Z$ :	VERTIKAL AFSTAND FRA KILDEN
$K_H$ :	DIMENSIONSLOS HENRYS KONSTANT
$\theta_w$ :	VANDFYLDT PORØSITET
$\theta_a$ :	LUFTFYLDT PORØSITET
$v_w$ :	POREVANDSHASTIGHED
$D_a^*$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I LUFT
$D_w^*$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I VAND
$\alpha_T$ :	TRANSVERSAL DISPERSIVITET
$R_T$ :	DEFINERET I LIGNING 24
$u$ :	DEFINERET I LIGNING 24
$D_z$ :	DEFINERET I LIGNING 24

#### LIGNING 26

Et stationært udtryk langs centerlinjen for Model C analog til Ligning 18 kan nu opstilles:

$$C(z) = C_0 \exp\left(\frac{(v_w - u)z}{2D_z}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{X}{4\sqrt{\frac{D_x z}{v_w}}}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{Y}{4\sqrt{\frac{D_y z}{v_w}}}\right)$$

$C$ :	KONCENTRATION I VANDFASEN
$C_0$ :	KONCENTRATION I KILDEN
$\operatorname{erf}$ :	ERROR FUNCTION
$X$ :	BREDDE AF FORURENINGSKILDEN
$Y$ :	LÆNGDE AF FORURENINGSKILDEN
$Z$ :	VERTIKAL AFSTAND FRA KILDEN
$u$ :	DEFINERET I LIGNING 24 OG 26
$D_x$ :	DEFINERET I LIGNING 26
$D_y$ :	DEFINERET I LIGNING 26

#### LIGNING 27

### 5.3.2 Sammenfatning af Model C

Der er på baggrund af litteraturgennemgangen fundet mulige løsningsmodeller for Model C i både 1, 2 og 3 dimensioner. For at verificere disse løsninger er der foretaget eksempelberegninger, der efterfølgende er sammenlignet med tilsvarende beregninger, udført med det numeriske modelværktøj Comsol Multiphysics. Det er på baggrund heraf konstateret, at Domenicos approksimerede 3D-løsning (både den stationære og transiente) i nogle tilfælde kraftigt overestimerer den horisontale forureningsspredning. Dette er særligt udpræget for flygtige stoffer under umættede forhold. Årsagen hertil er, at dispersionskoefficienterne i både den longitudinale og transversale retning bliver meget store, da gasdiffusionen er dominerende, mens den advektive transport stort set ingen betydning har. Som diskuteret i Srinivasan et al. (2007) er fejlen ved Domenico løsning specielt stor ved høje longitudinale dispersionskoefficienter, hvilket netop er tilfældet, når gasdiffusion er styrende. Domenicos 3D-løsning vurderes derfor ikke egnet til at beskrive Model C.

En eksakt analytisk løsning i 3D kan opnås ud fra udtrykket præsenteret af Wexler (1992) (jf. Ligning 22). De præsenterede 1D-modeller (Ligning 24) og (Ligning 25) er ligeledes eksakte analytiske løsninger. Hvorvidt den vertikale transport gennem umættet sand skal beskrives i 1 eller 3 dimensioner, vil blive diskuteret i det følgende.

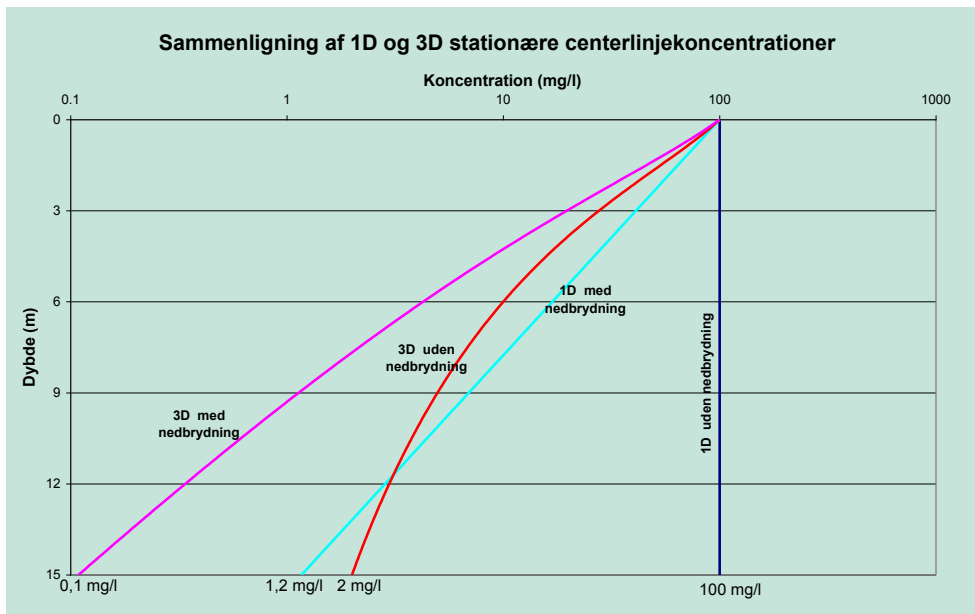
### 5.3.3 Diskussion af 1D kontra 3D løsninger

Fordelene og ulemperne ved hhv. en 1D- og 3D-beskrivelse af den vertikale transport vil i det følgende blive diskuteret og illustreret med udgangspunkt i nogle eksempelberegninger.

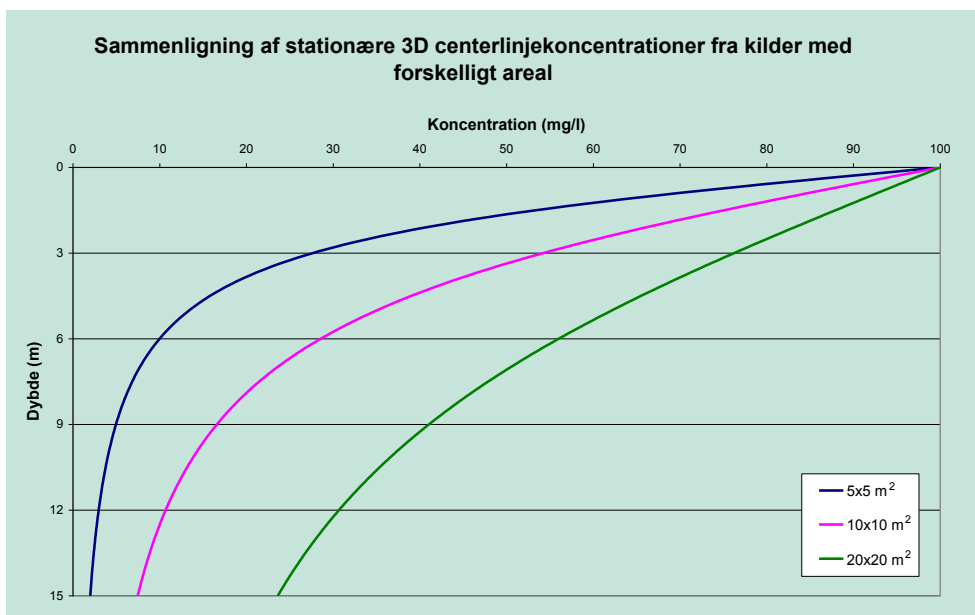
Figur 5-4 viser det vertikale koncentrationsprofil (langs centerlinjen) under en forureningskilde beregnet med hhv. en 1D- og en 3D-model. Beregningerne er foretaget med hhv. Ligning 25 og den analytiske model af Wexler (1992) og er baseret på inputdata fra en PCE-forurennet lokalitet, jf. eksempel 3 i Bilag 1. I forhold til eksempel 3 er det dog valgt at gennemføre beregningerne både med og uden hensyntagen til nedbrydning. Til beregningerne med nedbrydning er der anvendt en 1. ordens nedbrydningsrate på  $0,01 \text{ dag}^{-1}$ .

Hvis der ikke tages højde for nedbrydningen, vil der, som det fremgår af Figur 5-4, opnås en konstant koncentration med dybden med 1D-løsningen, mens 3D-løsningen giver et aftagende profil. I 15 meters dybde opnås således en koncentration på  $2 \text{ mg/l}$ , svarende til en reduktion på en faktor 50 i forhold til 1D løsningen. Dette illustrerer, at den horisontale spredning kan reducere koncentrationen ved grundvandsspejlet betydeligt, og at de ekstra dimensioner derfor kan være afgørende for påvirkningen af grundvandet. Dette illustreres af Figur 5-6, men på trods af de lavere koncentrationer i toppen af grundvandsmagasinet ved den 3D-løsning i forhold til den 1D-løsning, er den samlede flux ens. I dette eksempel er den horisontale spredning ligeså væsentlig for reduktionen af koncentrationen i toppen af grundvandsmagasinet som nedbrydning. Hvis nedbrydning medtages i beregningen, ses det, at der opnås en koncentration på  $1,2 \text{ mg/l}$  og  $0,1 \text{ mg/l}$  med hhv. 1D- og 3D-løsningen i 15 meters dybde.

Det skal dog pointeres, at reduktionen vil være meget afhængig af dybden af den umættede zone samt af forureningskildens areal (i eksemplet er et kildeareal på  $5 \times 5 \text{ m}^2$  anvendt). Figur 5-5 viser, hvordan koncentrationen langs centerlinjen, beregnet med 3D-modellen, afhænger af kildens areal. Jo større kildens areal er desto højere bliver koncentrationerne langs centerlinjen. En tilstrækkelig stor kilde vil således kunne medføre, at der opnås den samme centerlinjekoncentration med både 1D- og 3D-modellen.



**FIGUR 5-4:** SAMMENLIGNING AF VERTIKALE KONCENTRATIONSPROFILER BEREGNET MED HHV. EN 1D OG EN 3D MODEL. BEREGNINGEN ER FORETAGET MED OG UDEN HENSYNTAGEN TIL NEDBRYDNING (DER ER ANVENDT EN 1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE PÅ 0,01 DAG<sup>-1</sup>). BEMÆRK LOGARITMISK SKALA PÅ X-AKSEN.



**FIGUR 5-5:** SAMMENLIGNING AF VERTIKALE KONCENTRATIONSPROFILER BEREGNET MED EN 3D MODEL BASERET PÅ WEXLER (1992). BEREGNINGERNE TAGER IKKE HØJDE FOR NEDBRYDNING OG ER UDFØRT FOR FORURENINGSKILDER MED ET KILDEAREAL PÅ HHV. 5X5, 10X10 OG 20X20 M<sup>2</sup>.

Der er ingen tvivl om, at den mest korrekte beskrivelse af stoftransporten fysisk set opnås med 3D-modeller, hvilket taler for at anvende løsningen fra Wexler (1992) (Ligning 22). En implementering af denne løsning i JAGG er imidlertid ikke uproblematisk. Dette skyldes primært, at resultatet (dvs. de beregnede koncentrationer lige over grundvandsspejlet,  $C_u$ ) efterfølgende skal kobles til JAGG's grundvandsmodul. Ved beregningen af den resulterende koncentration i den øverste del af grundvandet,  $C_1$ , benyttes følgende udtryk, jf. Miljøstyrelsens vejledning nr. 7 (Miljøstyrelsen, 1998)

$$C_1 = \frac{A \cdot N \cdot C_0 + B \cdot 0,25 \cdot k \cdot i \cdot C_g}{A \cdot N + B \cdot 0,25 \cdot k \cdot i}$$

$A$ :	FORURENINGSKILDENS AREAL
$N$ :	NETTONEDBØR
$C_0$ :	KILDESTYRKEKONCENTRATIONEN
$C_i$ :	DEN RESULTERENDE KONCENTRATION I DEN ØVERSTE DEL AF GRUNDVAND – TRIN 1
$B$ :	FORURENINGSKILDENS BREDE PÅ TVÆRS AF STRØMNINGSRETNINGEN I GRUNDVANDET
$k$ :	MAGASINETS HYDRAULISKE LEDNINGSEVNE
$i$ :	DEN HYDRAULISKE GRADIENT
$C_g$ :	DEN NATURLIGE BAGGRUNDSKONCENTRATION I GRUNDVAND

#### LIGNING 28

Det fremgår af Ligning 28, at den advective masseflux fra forureningskilden til grundvandet (dvs.  $A \cdot N \cdot C_0$ ) skal være kendt for at beregne  $C_1$ .

Hvis den samme beregning af  $C_1$  skal foretages under hensyntagen til 3D-spredning og/eller nedbrydning, er det altså nødvendigt at kende den advective forureningsflux til grundvandet. Denne kan beregnes som:

$$F = C_u \cdot A_{gvs} \cdot N = C_u \cdot X \cdot Y \cdot N$$

$F$ :	FORURENINGSFLUX
$C_u$ :	DEN BEREGNEDE KONCENTRATION LIGE OVER GRUNDVANDSSPEJLET
$A_{gvs}$ :	STØRRELSEN AF DET FORURENEDE AREAL LIGE OVER GRUNDVANDSSPEJLET
$X$ :	BREDE AF FORURENINGSKILDE
$Y$ :	LÆNGDE AF FORURENINGSKILDE
$N$ :	NETTONEDBØR

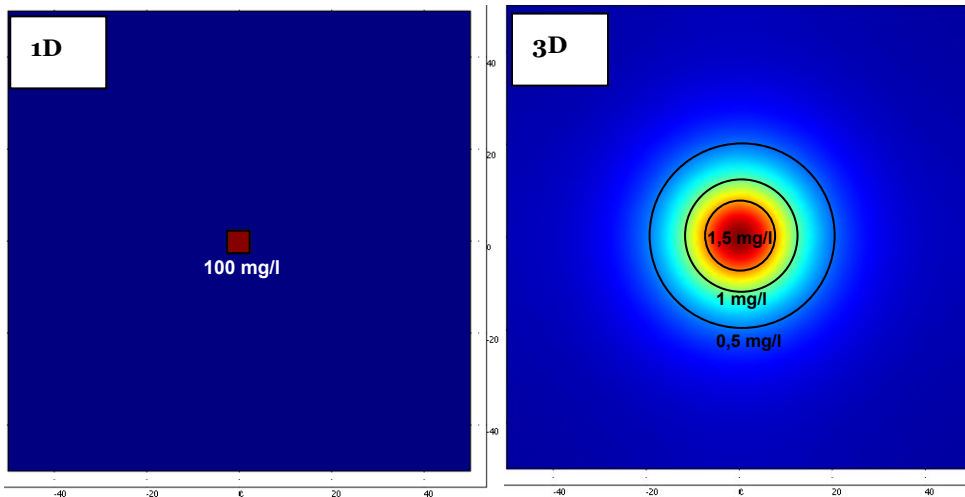
#### LIGNING 29

Med udgangspunkt heri kan Ligning 28 omskrives til:

$$C_1 = \frac{A_{gvs} \cdot N \cdot C_u + B \cdot 0,25 \cdot k \cdot i \cdot C_g}{A_{gvs} \cdot N + B \cdot 0,25 \cdot k \cdot i}$$

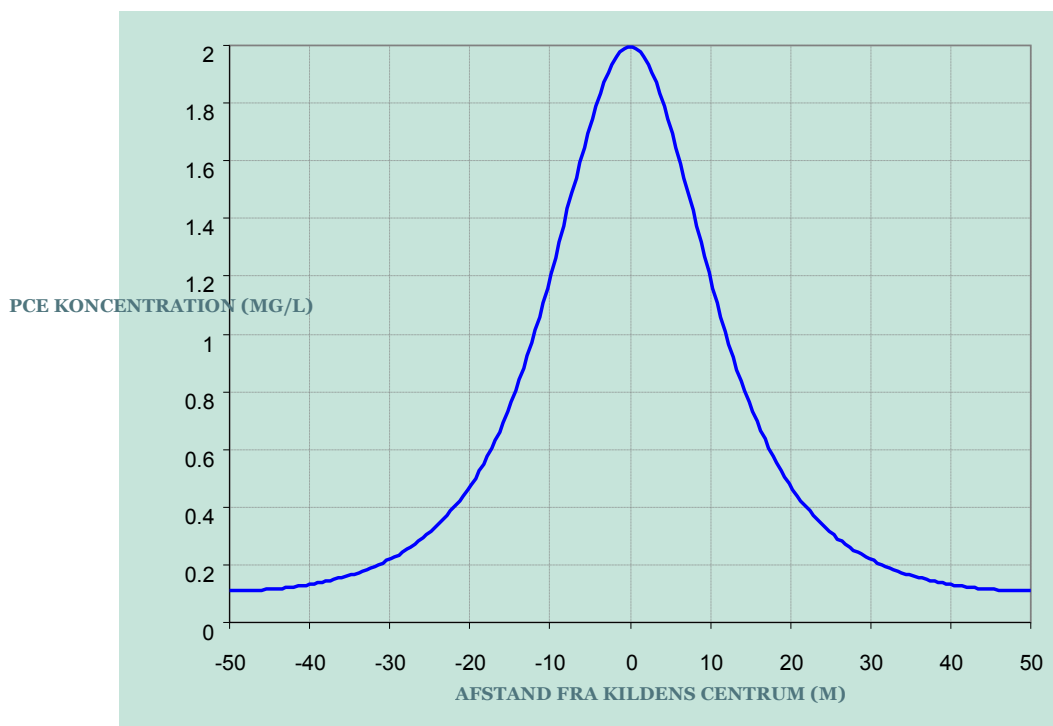
#### LIGNING 30

For en 1D-løsning vil  $A_{gvs}$  være identisk med forureningskildens areal,  $A$  (dvs.  $A = X \cdot Y$ ), og den beregnede koncentration ved grundvandsspejlet,  $C_u$ , vil være konstant indenfor dette areal. Dette er illustreret i Figur 5-6, hvor resultatet af beregningerne baseret på input fra eksempel 3, Bilag 1, er vist i et plan lige over grundvandsspejlet for hhv. en 1D- og en 3D-løsning. Det fremgår heraf, at der med 1D-løsningen opnås en kildestyrkekoncentration på 100 mg/l, da der ikke sker nedbrydning, og det forurenede areal ved grundvandsspejlet har samme størrelse som kilden, dvs. 5x5 m<sup>2</sup>.  $C_1$  vil således let kunne beregnes for en 1D-løsning vha. Ligning 30.



**FIGUR 5-6:** BEREGNING AF STATIONÆRE KONCENTRATIONER I ET PLAN LIGE OVER GRUNDVANDSSPEJLET (15 M U.T.) MED HHV. EN 1D OG EN 3D LØSNING. NEDBRYDNING ER IKKE INKLUDERET OG BEREGNINGERNE ER GENNEMFØRT VHA. COMSOL MULTIPHYSICS.

For en 3D-løsning vil  $A_{gvs}$  derimod være større end forureningskildens areal pga. transversal spredning som følge af diffusion, hvilket til gengæld betyder, at den beregnede koncentration lige over grundvandsspejlet indenfor dette areal er lavere og samtidig ikke er konstant. Med 3D-løsningen er kildestyrkekoncentrationen således reduceret til en max. koncentration på 2 mg/l som følge af den transversale spredning. Den transversale spredning betyder samtidig, at det forurenede areal øges, hvorfor koncentrationen er større end 0,2 mg/l i en radius på 30 m fra centerkoncentration (se Figur 5-7). Dette forhold komplicerer derfor den videre beregning af  $C_1$  med JAGG2's grundvandsmodul.



**FIGUR 5-7:** KONCENTRATIONSPROFIL LIGE OVER GRUNDVANDSSPEJLET I STRØMNINGSRETNINGEN BEREGNET MED 3D LØSNINGEN.

Det skal bemærkes, at den samlede masseflux til grundvandet i princippet vil være uafhængig af, om der benyttes en løsning i 1, 2 eller 3 dimensioner (fluxens størrelse vil primært være afhængig af advektion og nedbrydning).

Den valgte dimension kan imidlertid have en afgørende betydning for den resulterende koncentration i grundvandet, idet massefluxen skal fordeles over et større areal og dermed fortyndes i et større vandvolumen, når den 3-dimensionelle løsning anvendes.

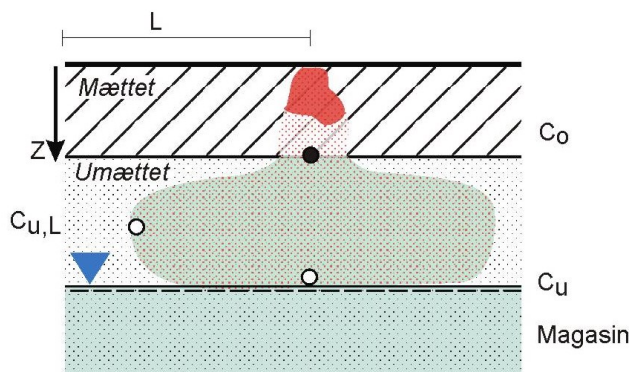
En 3D nedsivningsmodel til beskrivelse af transporten gennem umættet zone vil umiddelbart være problematisk at koble til JAGG2's grundvandsmodul, da det er svært at fastlægge størrelsen af det forurenede areal ved grundvandsspejlet,  $A_{gvs}$ , samt at tildele dette areal en repræsentativ koncentration,  $C_u$ . Problemerne med disse beregninger kan således ikke løses uden at tage stilling til de efterfølgende beregninger for den mættede zone.

### 5.3.4 Anbefaling for Model C











På baggrund af ovenstående betragtninger anbefales det, at 1D-løsningerne, præsenteret i Ligning 24 og Ligning 25, anvendes og implementeres i JAGG2. 1D-løsningerne kan fungere som første approksimation. Ved videre, mere detaljerede lokalitetsundersøgelser bør der tages højde for den horisontale spredning i umættet zone, samt for hvorledes denne spredning influerer på den efterfølgende opblanding i den mættede zone.

Det skal pointeres, at Ligning 24 og Ligning 25 forudsætter, at der sker advektion. Det betyder, at ligningerne ikke kan anvendes i situationer, hvor der ikke antages at ske infiltration. Dette kunne fx tænkes at være under et hus. Denne situation kan i stedet beskrives med Model D.

## 5.4 Model D



### D Spredning af flygtigt stof ved horisontal og vertikal gasdiffusion

- |   |  |   |   |
|---|--|---|---|
|  | Kilde                                    |  | $C_0$ Startkoncentration i porevand   |
|  | Opløst forurening i porevand             |  | $C_u$ Porevandskoncentration lige over grundvandet  |
|  | Opløst forurening i poreluft og porevand |  | $C_{u,L}$ Poreluftkoncentration af stof der ved ligevægt med porevand giver grundvandskriteriet |
|  | Ler                                      | $L$   | Afstand hvor $C_{u,L}$ opnås p.g.a. diffusion   |
|  | Sand, umættet                            | $C_1$   | Grundvandskoncentration efter opblanding i de øverste 0,25 m af magasinet                       |
|  | Sand, magasin                            |   |   |
|  | Vandspejl i magasin                      |   |   |

FIGUR 5-8:  
KONCEPTUEL MODEL D



Princippet i Model D er skitseret i Figur 5-8. Med Model D ønskes det at kunne beskrive den vertikale transport samt den horisontale spredning af forurening i en umættet zone, der er overlejret af et lavpermeabelt dæklag. Da dæklaget i denne situation vil begrænse (og i nogle tilfælde måske helt forhindre) infiltration af nedbør, forventes det, at gastransporten vil være mere dominerende i forhold til Model C.

I tilfælde af, at der sker infiltration gennem det lavpermeable lag, vil de præsenterede løsninger fra Model C kunne benyttes. Hvis der i den forbindelse ønskes en vurdering af den transiente laterale forureningsspredning, anbefales det at benytte et udtryk baseret på Wexler (1992) frem for Domenico (1987).

Såfremt der ikke sker infiltration gennem dæklaget (fx hvis der er tale om et befæstet areal), vil udtrykkene fra Model C ikke længere kunne anvendes, da transporten i den umættede zone primært vil være diffusionsstyret. Netop denne situation er efter vores overbevisning ikke beskrevet i noget eksisterende risikovurderingsværktøj, der alle primært baserer den vertikale transport på advektion i vandfasen (infiltration). Med de eksisterende værktøjer vil en forurening i den umættede zone under et befæstet område således ikke vurderes at udgøre en risiko for grundvandet.

Flere studier har vist, at diffusiv gastransport er væsentlig i den umættede zone, især ved tilstedeværelse af et lavpermeabelt dæklag. Nielsen (2007) har foretaget et omfattende litteraturstudie vedrørende spredning af VOC i umættet zone og har med udgangspunkt i modellering af resultater fra et sporstofforsøg med CFC udpeget de væsentligste processer for VOC-transport under umættede forhold. Nielsen (2007) konkluderer, at diffusiv gastransport er meget afgørende for spredningen af VOC i tilfælde, hvor der sker ingen eller meget begrænset infiltration.

Mendoza & Frind (1990) har ligeledes vist, at udbredelsen af stof i den umættede zone ved diffusion sker hurtigere, hvis der findes et lavpermeabelt dæklag end hvis der er fri kontakt til atmosfæren.

Grathwohl et al. (2002) konstaterer med udgangspunkt i numeriske simuleringer, at der opnås et stort tab af forurening til atmosfæren, når der ikke er tilstedeværelse af et dæklag, især fra overfladenære kilder. Derimod vil tilstedeværelsen af et dæklag kunne reducere ilttilførelsen og virke begrænsende for den aerobe nedbrydning.

Ligesom for Model C er det valgt at se bort fra den advective gastransport ved beskrivelsen af Model D. Hvis dæklaget er lavpermeabelt og homogent, vil de barometriske trykforskelle ikke give anledning til horisontale trykgradienter og dermed horisontal advektion i gasfasen. Nielsen (2007) observerer dog, at såfremt der i det lavpermeable lag optræder områder, hvor der er direkte kontakt til atmosfæren, kan barometriske trykændringer drive en advektiv gastransport, der kan føre til store udsving omkring den diffusive koncentrationsudvikling i specielt det horisontale plan, og på den måde medføre en større lateral spredning.

Ud fra overstående betragtninger kan en samlet styrende transportligning opstilles for Model D. Denne inkluderer diffusion i gas- og vandfasen, nedbrydning og sorption:

$$\frac{\partial(R\theta_w + K_H\theta_a)C_w}{\partial t} = \nabla(\theta_w D_w^* + \theta_a K_H D_a^*)\nabla C_w - \theta_w \lambda C_w$$

$C_w$ :	KONCENTRATION I VANDFASEN
$R$ :	RETARDATIONSFAKTOR
$K_H$ :	DIMENSIONSLOS HENRYS KONSTANT
$\theta_w$ :	VANDFYLDT POROSITET
$\theta_a$ :	LUFTFYLDT POROSITET
$t$ :	TID
$D_a^*$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I LUFT
$D_w^*$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I VAND
$\lambda$ :	1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE

#### LIGNING 31

##### 5.4.1 Matematiske modeller

Der er i litteraturen opstillet flere modeller til beskrivelse af diffusiv gastransport i den umættede zone, hvoraf nogle også medtager nedbrydning. Mange af disse modeller beskriver imidlertid den diffusive transport, hvor der ved jordoverfladen er fri adgang til atmosfæren, bl.a. Wilson (1997) og Bouchard (2005). Da vi med Model D er interesseret i at beskrive transporten, hvor den umættede zone er dækket af et lavpermeabelt lag, kan disse modeller ikke umiddelbart bruges.

Som tidligere nævnt er vi interesseret i både en stationær og en transient løsning, der kan beskrive Model D. Det skal bemærkes, at såfremt der ikke sker nedbrydning eller nogen anden stoffjernelse i den umættede zone, vil der ved stationære forhold over det hele opnås en konstant koncentration, der er lig kildekonzentrationen. Da gasdiffusion kan føre til en hurtig spredning af flygtige stoffer både vertikalt og transversalt, vil antagelsen om momentan ligevægt ved den transiente beskrivelse af denne spredning sandsynligvis ikke gælde. Formålet med den transiente løsning er imidlertid blot at give brugeren et indtryk af omfanget af den transversale stofspreddning med tiden, og det er udelukkende tænkt som et hjælpeværktøj.

Lahvis & Baehr (1997) har opstillet både transiente og stationære analytiske løsninger til Ligning 31 i én dimension, der ikke medtager nedbrydning. Løsningerne er præsenteret med forskellige randbetingelser, og det kan i den forbindelse vælges, at jordoverfladen er impermeabel. Under forudsætning af, at den diffusive flux ved grundvandsspejlet er 0 ( $\partial C / \partial z = 0$ ), kan den tidlige vertikale koncentrationsudvikling bestemmes uden hensyntagen til nedbrydning med udgangspunkt i udtryk fra Lahvis & Baehr (1997):

$$C_w(z,t) = C_0 + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2C_0}{L\lambda_n} \exp\left(-\lambda_n \frac{(\theta_w D_w^* + \theta_a K_H D_a^*)}{(R\theta_w + K_H\theta_a)} t\right) \sin(\sqrt{\lambda_n} L) \cos(\sqrt{\lambda_n} z)$$

HVOR

$$\sqrt{\lambda_n} = (2n-1) \frac{\pi}{2L}$$

$C_w$ :	KONCENTRATION I VANDFASEN
$C_0$ :	KILDEKONCENTRATION
$K_H$ :	DIMENSIONSLOS HENRYS KONSTANT
$D_a^*$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I LUFT
$D_w^*$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I VAND
$R$ :	RETARDATIONSFAKTOR
$\theta_w$ :	VANDFYLDT POROSITET
$\theta_a$ :	LUFTFYLDT POROSITET
$t$ :	TID
$L$ :	AFSTAND FRA FORURENINGSKILDE TIL GRUNDVANDSSPEJL

### LIGNING 32

Ligning 32 tager kun højde for den diffusive spredning i én dimension og medtager ikke nedbrydning. I tilfælde af, at der sker nedbrydning, kan en stationær 1D-løsning til Ligning 31 bestemmes:

$$C_w(z) = A \exp\left(z \sqrt{\frac{\lambda \theta_w}{\theta_a K_H D_a^* + \theta_w D_w^*}}\right) + B \exp\left(-z \sqrt{\frac{\lambda \theta_w}{\theta_a K_H D_a^* + \theta_w D_w^*}}\right)$$

HVOR

$$A = \frac{C_0}{1 + \exp\left(2L \sqrt{\frac{\lambda \theta_w}{\theta_a K_H D_a^* + \theta_w D_w^*}}\right)}$$

$$B = A \exp\left(2L \sqrt{\frac{\lambda \theta_w}{\theta_a K_H D_a^* + \theta_w D_w^*}}\right)$$

$C_w$ :	KONCENTRATION I VANDFASEN
$C_0$ :	KILDEKONCENTRATION
$K_H$ :	DIMENSIONSLOS HENRYS KONSTANT
$D_a^*$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I LUFT
$D_w^*$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I VAND
$\theta_a$ :	LUFTFYLDT POROSITET
$\theta_w$ :	VANDFYLDT POROSITET
$L$ :	AFSTAND FRA FORURENINGSKILDE TIL GRUNDVANDSSPEJL
$\lambda$ :	1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE

### LIGNING 33

For at bestemme den horisontale spredning i Model D, er det fordelagtigt at formulere Ligning 31 i polære (eller evt. cylindriske) koordinater. Dette skyldes, at stofspredningen som følge af diffusion vil være radiale symmetrisk, og derfor kan ansues som et 1-dimensionalt problem i polære koordinater (under forudsætning af, at den vertikale koncentration er konstant fra kilden til grundvandet). Ligning 31 formuleret i polære koordinater ser ud som følger:

$$\frac{\partial(R\theta_w + K_H\theta_a)C_w}{\partial t} = (\theta_a K_H D_a^* + \theta_w D_w^*) \left( \frac{\partial^2 C_w}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_w}{\partial r} \right) - \theta_w \lambda C_w$$

$C_w$ :	KONCENTRATION I VANDFASEN
$R$ :	RETARDATIONSFAKTOR
$K_H$ :	DIMENSIONSLOS HENRYS KONSTANT
$\theta_w$ :	VANDFYLDT POROSITET
$\theta_a$ :	LUFTFYLDT POROSITET
$t$ :	TID
$D_a^*$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I LUFT
$\lambda$ :	1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE

#### LIGNING 34

Den stationære version af Ligning 34 (dvs. venstresiden er lig 0) er Bessel's modificerede ligning, der har følgende generelle løsning /Spiegel, 1968/:

$$C_w(r) = c_1 I_0(\omega r) + c_2 K_0(\omega r)$$

HVOR

$$\omega = \sqrt{\frac{\theta_w \lambda}{\theta_a K_H D_a^* + \theta_w D_w^*}}$$

$C_w$ :	KONCENTRATION I VANDFASEN
$I_0(x)$ :	MODIFICERET BESSEL FUNKTION AF FØRSTE ART OG ORDEN 0
$K_0(x)$ :	MODIFICERET BESSEL FUNKTION AF ANDEN ART OG ORDEN 0
$K_H$ :	DIMENSIONSLOS HENRYS KONSTANT
$\theta_w$ :	VANDFYLDT POROSITET
$\theta_a$ :	LUFTFYLDT POROSITET
$D_a^*$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I LUFT
$D_w^*$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I VAND
$\lambda$ :	1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE
$c_1$ :	ARBITRÆR KONSTANT
$c_2$ :	ARBITRÆR KONSTANT

#### LIGNING 35

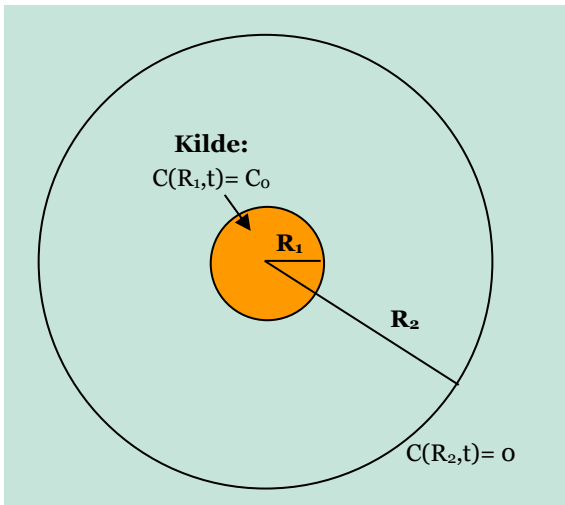
De modificerede Bessel-funktioner er defineret i bl.a. Spiegel (1968). Afhængig af de valgte randbetingelser, kan konstanterne  $c_1$  og  $c_2$  bestemmes, og dermed kan en stationær løsning til Ligning 31 opnås. Ved at anvende randbetingelserne,  $C_w(0 < r < r_1) = C_0$  og  $C_w(r \rightarrow \infty) = 0$ , kan følgende løsning således opnås:

$$C_w(r) = \frac{C_0}{K_0(R_1 \omega)} K_0(r \omega)$$

$C_w$ :	KONCENTRATION I VANDFASE
$K_0(x)$ :	MODIFICERET BESSEL FUNKTION AF ANDEN ART OG ORDEN 0
$C_0$ :	KILDEKONCENTRATION
$r$ :	RADIUS FRA KILDEN
$R_1$ :	RADIUS AF KILDEN
$\omega$ :	DEFINERET I LIGNING 35

#### LIGNING 36

En transient løsning til Ligning 34, der ikke medtager nedbrydning, er præsenteret i Ligning 37. Løsningen beskriver diffusiv transport mellem to koncentriske cylindere/cirkler, hvilket er illustreret i Figur 5-9. Den inderste cirkel repræsenterer forureningskilden med en konstant koncentration, mens den ydre cirkel repræsenterer den afstand, hvor koncentrationen antages lig 0 /Luikov, 1968/.



**FIGUR 5-9:**  
PRINCIPSKITSE TIL BESKRIVELSE AF TRANSIENT RADLÆR DIFFUSION FRA KILDE MED RADIUS  $R_1$  OG KONCENTRATION,  $C_0$ .

$$C_w(r,t) = \frac{C_0}{\ln(m)} \ln\left(\frac{R_2}{r}\right) + \pi \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \frac{J_0(\mu_n m) Y_0(\mu_n r / R_1)}{J_0(\mu_n) + J_0(\mu_n m)} \exp\left(-\mu_n^2 F_0 \left[ \frac{C_0 J_0(\mu_n m)}{J_0(\mu_n) - J_0(\mu_n m)} \right] \right) \right\}$$

HVOR

$$m = R_2 / R_1$$

$$Y_0(\mu_n r / R_1) = J_0(\mu_n r / R_1) Y_0(\mu_n) - J_0(\mu_n) Y_0(\mu_n r / R_1)$$

$$F_0 = \frac{(\theta_a K_H D_a^* + \theta_w D_w^*) t}{(\theta_a K_H + R \theta_w) R_1^2}$$

$C_w$ :	KONCENTRATION I VANDFASE
$r$ :	RADIUS FRA KILDEN
$t$ :	TID
$C_0$ :	OPLØST KILDEKONCENTRATION
$R_1$ :	RADIUS AF KILDEN
$R_2$ :	AFSTAND HVOR KONCENTRATIONEN ANTAGES LIG 0
$J_0(x)$ :	BESSEL FUNKTION AF FØRSTE ART OG ORDEN 0
$Y_0(x)$ :	BESSEL FUNKTION AF ANDEN ART OG ORDEN 0
$\mu_n$ :	RØDDER
$\theta_w$ :	VANDFYLDT PORØSITET
$\theta_a$ :	LUFTFYLDT PORØSITET
$K_H$ :	DIMENSIONSLOS HENRYS KONSTANT
$D_a^*$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I LUFT
$D_w^*$ :	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I VAND
$R$ :	RETARDATION.

#### LIGNING 37

Det ses, at der i løsningen i Ligning 37 indgår en uendelig sum, hvori parametrene  $\mu_n$  optræder.  $\mu_n$  er rødder i den karakteristiske ligning givet ved /Luikov, 1968/:

$$J_0(\mu) Y_0(m\mu) - J_0(m\mu) Y_0(\mu) = 0$$

HVOR

$$m = R_2 / R_1$$

$R_1$ :	RADIUS AF KILDEN
$R_2$ :	AFSTAND HVOR KONCENTRATIONEN ANTAGES LIG 0
$J_0(x)$ :	BESSEL FUNKTION AF FØRSTE ART OG ORDEN 0
$Y_0(x)$ :	BESSEL FUNKTION AF ANDEN ART OG ORDEN 0
$\mu_n$ :	RØDDER

#### LIGNING 38

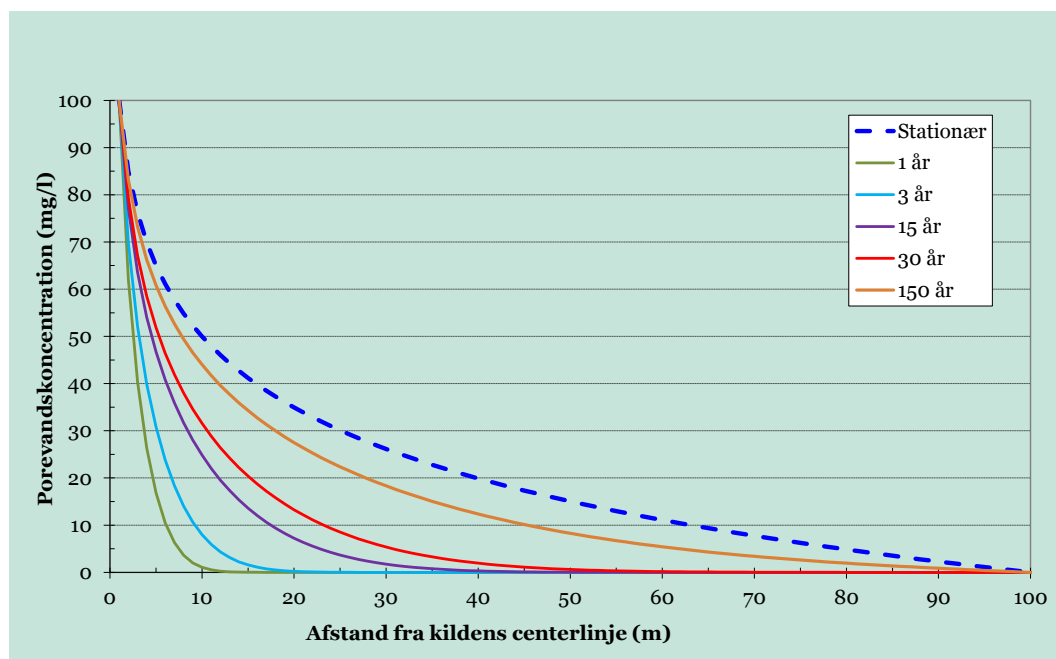
Afhængig af den valgte værdi for  $m$ , kan rødderne  $\mu_n$  bestemmes. Tabel 5-1 viser de første 10 værdier af  $\mu_n$ , hvor  $m=R_2/R_1=100$  (dvs. hvis kilden har en radius på  $R_1 = 1$  meter, antages det, at koncentrationen er lig nul i en afstand  $R_2 = 100$  meter fra kilden). Det skal pointeres, at idet koncentrationen antages lig 0 i en endelig afstand fra kilden, vil der med udtrykket i Ligning 37 med tiden opnås en stationær tilstand, til trods for at der ikke sker nedbrydning. Den stationære løsning er givet ved det første led (dvs. leddet før den uendelige sum) i Ligning 37. Det betyder også, at beregningen af den transiente horisontale forureningsspredning med den opstillede model vil være

påvirket af randeffekter til meget store beregningstider. Dette er illustreret i Figur 5-10, hvor beregninger af den transiente horisontale spredning af PCE med Ligning 37 er udført for en kilde med radius 1 meter og hvor koncentrationen er antaget lig 0 mg/l i en afstand på 100 meter. Det ses heraf, at der i denne situation skal gå mere end 30 år før randeffekter observeres. Hvornår der observeres randeffekter, vil bl.a. afhænge af stoffets flygtighed, den effektive diffusionskoefficient, sorption samt af kildens radius.

**TABEL 5-1:**  
VÆRDIER AF RØDDERNE  $\mu_n$  TIL DEN KARAKTERISTISKE LIGNING (LIGNING 38) FOR  $m = 100$

$m$	$\mu_1$	$\mu_2$	$\mu_3$	$\mu_4$	$\mu_5$	$\mu_6$	$\mu_7$	$\mu_8$	$\mu_9$	$\mu_{10}$
100	0,028	0,060	0,092	0,124	0,156	0,188	0,220	0,252	0,284	0,315

For at anvende Ligning 37 til at beskrive den laterale stofspredning bør det i princippet i felten verificeres, at koncentrationen er 0 mg/l i den givne afstand fra kilden. Det forventes dog umiddelbart, at den valgte  $m = 100$  i de fleste tilfælde vil være tilstrækkelig. Således antages koncentrationen lig 0 mg/l i en afstand af 500 m og 1000 m fra forureningskilder med en radius på hhv. 5 m og 10 m.



**FIGUR 5-10:**  
BEREGNING AF DEN TRANSIENTE HORISONTALE FORURENINGSSPREDNING MED LIGNING 37. KILDENS RADIUS ER 1M OG KONCENTRATIONEN ER ANTAGET LIG 0 MG/L I 100 METERS AFSTAND.

#### 5.4.2 Sammenfatning af Model D

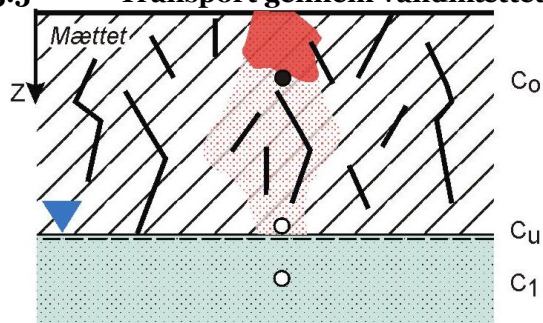
Forskellige løsningsmodeller for Model D i både 1, 2 og 3 dimensioner er søgt identificeret. Der er fundet udtryk, der kan beskrive den horisontale forureningsspredning med udgangspunkt i polære koordinater under forudsætning af, at kilden er kontinuert og lodret igennem hele den umættede zone. Dette anses hensigtsmæssigt, da stoftransport styret af diffusion vil være radiært symmetrisk. Det vurderes, at løsningen præsenteret i Ligning 36 under forudsætning af, at der sker nedbrydning, vil kunne anvendes til at beskrive den stationære horisontale forureningsudbredelse. Til beskrivelse af den transiente horisontale forureningsudbredelse foreslås Ligning 37 anvendt. Det skal bemærkes, at dette udtryk ikke medtager nedbrydning. Det har ikke været muligt at finde en løsning, der kan beskrive forureningstransporten (inklusive nedbrydning) til grundvandsspejlet og som samtidig kan beskrive den horisontale spredning radiært symmetrisk (dvs. en løsning baseret

på cylindriske koordinater). Det vurderes imidlertid, at de identificerede udtryk vil kunne opfylde det primære formål med Model D, nemlig at illustrere den tidslige horisontale spredning fra en forureningskilde i den umættede zone.

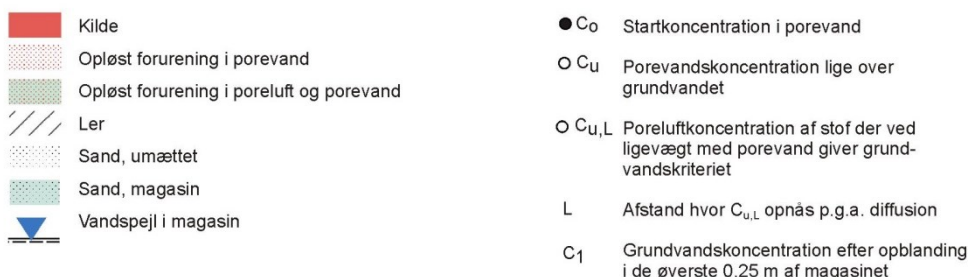
I forureningssituationer, hvor der ikke antages at ske infiltration, kan den vertikale transport i én dimension ikke beskrives med udtrykkene fra Model C. I dette tilfælde anbefales det stationære udtryk præsenteret i Ligning 33 anvendt, mens Ligning 32 anbefales, såfremt en transient løsning (uden hensyntagen til nedbrydning) ønskes.

Problemet med disse 1D-modeller er (som det også var tilfældet med 3D løsningen for Model C), hvordan de beregnede koncentrationer lige over grundvandsspejlet,  $C_u$ , efterfølgende kobles til beregningen af  $C_1$  i JAGG's grundvandsmodul. Problemet her er, at JAGG i den forbindelse skal bruge en infiltrationsrate, som for Model D i princippet er antaget lig 0 mm/år. Ofte kan der dog ske en vis nedsivning/indsivning på tværs under ikke-permeable flader, men størrelsen af denne infiltration vil i langt de fleste tilfælde ikke være kendt. Såfremt  $C_1$  ønskes beregnet (se evt. afsnit 5.3.3) på baggrund af den beregnede koncentration med Model D, kan det antages, at infiltrationen er lig nettonedbøren,  $N$ , og at det forurenede areal lige over grundvandsspejlet har samme størrelse som kilden. Dette kan ses som et konservativt valg, da det forurenede areal i realiteten må forventes væsentlig større, mens både de beregnede koncentrationer og den reelle infiltration må forventes lavere. I tilfælde af, at der foreligger data vedrørende størrelsen af det forurenede areal lige over grundvandsspejlet eller konkrete målinger af infiltrationer under det befæstede areal for en given lokalitet, kan disse data benyttes i stedet.

### 5.5 Transport gennem vandmættet sprækket ler (Model B)



#### B Transport gennem homogen vandmættet sprækket ler



FIGUR 5-11:  
KONCEPTUEL MODEL B

Med Model B skal påvirkningen af det førstkomende underliggende grundvandsmagasin fra en forureningskilde beliggende i en vandmættet opsprækket ler kunne estimeres. Model B er særlig relevant herhjemme, da mere end 40 % af Danmark er dækket af lavpermeable moræneler aflejringer, hvor der generelt har vist sig at være sprækker /Klint & Gravesen, 1999/.



### 5.5.1 Matematiske modeller

En matematisk model til beregning af transport i sprækket ler er præsenteret i Chambon et al. (2010) og implementere i JAGG2.

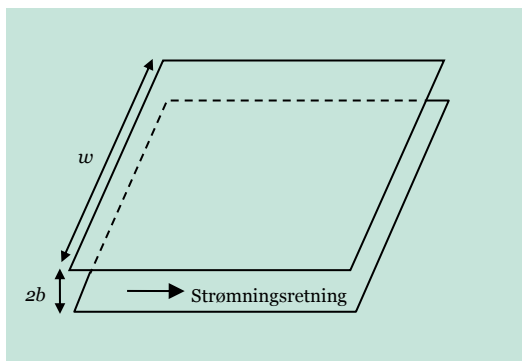
I det følgende er den teoretiske baggrund for transport i sprækker gennemgået.

Ligesom for Model A vil transport i gasfasen være uden betydning i Model B, da der er tale om vandmættede forhold. Forureningstransporten i opsprækket ler kontrolleres af især advektion i sprækkerne samt diffusion ind i matrix. Derudover vil forureningen i både sprækker og matrix kunne evt. udsættes for sorption og nedbrydning /Jørgensen et al., 2004; McKay et al., 1993; Broholm et al., 2000/.

For at simulere transport i komplekse sprækkenetværk er der generelt behov for avancerede numeriske modeller. Der eksisterer dog analytiske modeller til modellering af vandstrømning og stoftransport i simple sprækkesystemer.

### 5.5.2 Strømning i sprækker

Strømning gennem en enkelt åben sprække simuleres ofte vha. den idealiserede *parallel plate model*. Metoden er skitseret i Figur 5-12.



FIGUR 5-12:  
PRINCIPSKITSE FOR PARALLEL PLADE MODEL (BASERET PÅ SCHWARTZ & ZHANG, 2003).

Sprækken afgrænses af 2 parallelle plader, der repræsenterer den impermeable jordmatrice. Strømningen,  $Q$ , gennem sprækken kan bestemmes som følger /Schwartz & Zhang, 2003/:

$$Q = -KA \frac{\partial h}{\partial L} = -\frac{\rho_w g (2b)^2}{12\mu} (2bw) \frac{\partial h}{\partial L}$$

$Q$ :	STRØMNING GENNEM SPRÆKKE
$A$ :	TVÆRSNITSAREAL AF SPRÆKKE
$K$ :	HYDRAULISK LEDNINGSEVNE AF SPRÆKKE
$2b$ :	SPRÆKKEAPERTUR <sup>2</sup> (AFSTAND MELLEMLER PLADER)
$w$ :	SPRÆKKEBREDDE
$\rho_w$ :	DENSITET AF VAND
$\mu$ :	VISKOSITET AF VAND
$g$ :	TYNGDEACCELERATION
$\partial h/\partial L$ :	GRADIENT LANGS SPRÆKKEN

LIGNING 39

<sup>2</sup> I litteraturen angives aperturen typisk som  $2b$ , og det er derfor valgt at benytte samme notation i dette notat.

Ligning 39 benævnes *den kubiske lov*, da flowet er afhængig af aperturen i tredje. Af Ligning 39 fremgår det, at sprækkens "hydrauliske ledningsevne",  $k$ , er givet ved:

$$K = \frac{\rho_w g (2b)^2}{12\mu}$$

$K$ :	HYDRAULISK LEDNINGSEVNE AF SPRÆKKE
$2b$ :	SPRÆKKEAPERTUR
$\rho_w$ :	DENSITET AF VAND
$\mu$ :	VISKOSITET AF VAND
$g$ :	TYNGDEACCELERATION

#### LIGNING 40

Da sprækker ofte er delvist fyldt med porøst materiale, skal der ved bestemmelse af strømnings-hastigheden gennem sprækken tages højde for sprækkens effektive porøsitet.

Hvis der er tale om et system af ligeligt fordelte parallelle sprækker, hvor afstanden mellem sprækkerne er  $2B$ , kan en samlet hydraulisk ledningsevne for sprækkenetværket  $K_f$  bestemmes:

$$K_f = \frac{\rho_w g (2b)^2}{12\mu} \phi_f$$

HVOR:

$$\phi_f = \frac{b}{B}$$

$K$ :	HYDRAULISK LEDNINGSEVNE AF SPRÆKKE
$2b$ :	SPRÆKKEAPERTUR
$\rho_w$ :	DENSITET AF VAND
$\mu$ :	VISKOSITET AF VAND
$g$ :	TYNGDEACCELERATION
$\phi_f$ :	SPRÆKKEPORØSITETEN
$2B$ :	AFSTAND MELLEM SPRÆKKER

#### LIGNING 41

Strømningen gennem sprækkerne kan også bestemmes ved at antage, at hele nettoinfiltrationen passerer gennem sprækkerne. Dette vil være en udmærket tilnærmelse, så længe både matrix og sprækker er vandmættet, samt at matrixens hydrauliske ledningsevne er meget lav. Under antagelse af en enhedsgradient vil Darcy-hastigheden gennem eksempelvis en matrix med en hydraulisk ledningsevne på  $1 \cdot 10^{-9}$  m/s være ca. 3 mm/år. Strømningen gennem matrixen udgør sammenlignet med en typisk dansk nettonedbør på ca. 300 mm/år således kun nogle få procent. Dette er i overensstemmelse med resultater fra Jørgensen & Spliid (1998), der på baggrund af laboratorieforsøg med store morænelerblokke konstaterer, at kun 0,01 – 0,1 % af strømningen forløber i lermatrixen.

### 5.5.3 Stoftransport i sprækker

Overordnet findes der 3 tilgange til beskrivelse af stoftransport i sprækker. Det drejer sig om beregningsmetoderne *ækvivalent porøsitet*, *dobbelt-porøsitet* og *diskrete sprækker*.

*Ækvivalent porøst medie* modellen (EPM) bygger på en antagelse om, at sprækkesystemet kan beskrives som et homogent medie med en ækvivalent effektiv porøsitet. Det forudsættes, at mediet er tilstrækkeligt opsprækket samt at den betragtede skala er stor nok. Permeabiliteten af det ækvivalente porøse medium,  $k$ , kan bestemmes ved /Schwartz & Zhang, 2003/:

$$k = \frac{k_m A_m + A_f k_f}{A_m + A_f}$$

$k$ :	ÆKVIVALENT PERMEABILITET
$k_m$ :	PERMEABILITET AF MATRIX
$k_f$ :	PERMEABILITET AF SPRÆKKERNE
$A_m$ :	KONTAKTAREAL FOR MATRIX
$A_f$ :	KONTAKTAREAL FOR SPRÆKKER

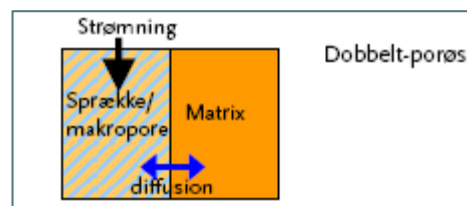
#### LIGNING 42

Ved at anvende de ækvivalente/effektive parametre kan stoftransporten beskrives som et almindeligt porøst medie.

*Dobbelt-porøsitet* (DP) modellen er en af de mest udbredte metoder til sprækketransport og benyttes bl.a. som sprækkemodul i GMS/MT3DMS og i CXTFIT /Jørgensen et al., 2006; Zheng & Wang, 1999; Toride et al., 1999/. Det komplekse sprækkesystem opdeles i to homogene porøse systemer repræsenterende hhv. sprækker og matrix. Både matrix og sprækker er således karakteriseret ved et sæt hydrauliske egenskaber. Transporten i sprækkerne sker primært ved advektion, hvori strømmingen er bestemt af Darcy's lov. Der sker ingen strømning i matrix, hvor stoftransporten foregår ved diffusion. Det antages, at koncentrationen er ens i hele matrix (svarende til øjeblikkelig opblanding). Sprækkerne og matrixen er forbundet til hinanden, og transporten mellem de to domæner bestemmes typisk ved en 1.ordens transferfunktion /Zheng & Wang, 1999; Jørgensen et al., 2004/.

I et opstillet risikovurderingskoncept af Bay et al. (2006) er der ved beskrivelsen af den vertikale transport gennem umættet zone taget udgangspunkt i en simplificeret udgave af den numeriske DP-model MACRO 5.0. Denne model simulerer udvaskningen fra den øverste meter af den umættede zone og benytter såkaldte pedotransfer-funktioner til estimering af de hydrauliske parametre /Bay et al, 2006/. Til bestemmelsen af de hydrauliske parametre (bl.a. van Genuchten parametre) anvender pedotransfer-funktionerne oplysninger vedrørende sand- og lerfraktionen for den øverste meter.

DP-modellen er bedst egnet ved større skalaer og lokaliteter med et relativt tæt sprækkenetværk. Ulempen ved metoden er, at det ofte kan være svært at evaluere transfer-funktionen mellem sprække- og matrixdomænet. Generelt vil der således være behov for at benytte kalibrerede transfer-funktioner for den specifikke forureningssituation, hvilket eksempelvis kan opnås ved at tilpasse efter målte gennembrudskurver i Jørgensen et al.(2006) og Karimi-Fard et al.(2004).



FIGUR 5-13:  
PRINCIPSKITSER FOR DOBBELT-PORØS MODEL. FRA BAY ET AL. (2006).

I *Diskrete sprække* (DS) modeller er den advektive transport langs adskilte, ligeligt fordelte parallelle sprækker koblet med udvekslingen mellem sprækker og den omgivende matrix ved diffusion. Samspejlet mellem matrix og sprækker er i DS-modeller baseret på en fysisk beskrivelse i modsætning til DP-modeller, hvor udvekslingen beskrives empirisk /Jørgensen et al., 2006/. Der findes flere modeller, der baserer beregningerne af stoftransport i opsprækkede medier på DS-metoden,

bl.a. de numeriske programmer FRACTRAN og FRAC3Dvs /Jørgensen et al., 2006; Sudicky & McLaren, 1998/.

Sudicky & Frind (1982) har som de første opstillet analytiske løsninger til beskrivelse af forureningstransport i et sprækket porøst medie, repræsenteret som et system af parallelle sprækker (DS-system – se Figur 5-14). Løsningerne tager højde for konstant strømning gennem sprækkerne, diffusion og dispersion langs sprækkerne, diffusion fra sprække til matrix, sorption og nedbrydning. Ved steady-state opnås følgende analytiske løsning for koncentrationen langs sprækken:

$$\frac{C_w}{C_0} = \exp\left\{z\eta\left[1 - \left(1 + \frac{4}{\gamma}(1 + \beta)\right)^{1/2}\right]\right\}$$

HVOR

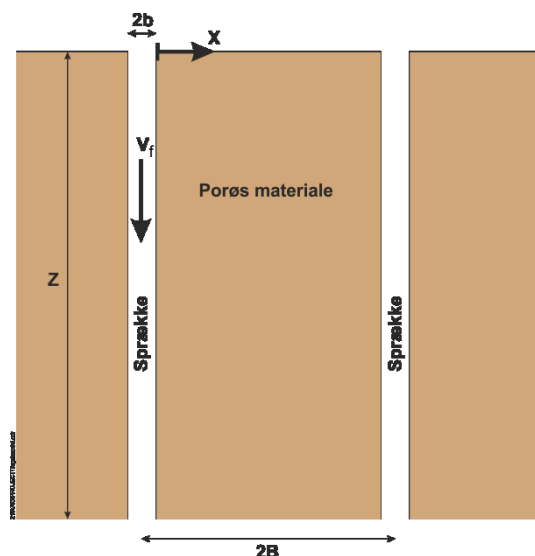
$$\eta = \frac{v_f}{2D_f}, \quad \gamma = \frac{v_f^2}{\lambda D_f R_f}, \quad \beta = \frac{\theta_m \sqrt{R_m D_m}}{b R_f \sqrt{\lambda}} \tanh(\sigma \sqrt{\lambda}), \quad \sigma = (B - b) \sqrt{R_m / D_m}$$

$$v_f = N \frac{b}{B}$$

$C_w$ :	OPLØST KONCENTRATION
$C_0$ :	KONCENTRATION I KILDEN
$v_f$ :	STRØMNINGSHASTIGHED I SPRÆKKER
$\theta_m$ :	PORØSITET AF MATRIX
$D_f$ :	HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT I SPRÆKKE
$D_m$ :	HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT I MATRIX
$R_f$ :	RETARDATIONSFAKTOR TIL SPRÆKKE-MATRIX FLADEN
$R_m$ :	RETARDATIONSFAKTOR I MATRIX
$\lambda$ :	1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE I BÅDE MATRIX OG SPRÆKKE
$2b$ :	SPRÆKKEAPERTUR
$2B$ :	AFSTAND MELLEM SPRÆKKER
$N$ :	NETTONEBØREN

LIGNING 43

I Sudicky & Frind (1982) er der endvidere præsenteret stationære analytiske udtryk for forurenings-transporten i matrix, og for tilfælde, hvor den hydrodynamiske dispersion i sprækken er negligeret.



**FIGUR 5-14:**  
PRINCIPSKITSE FOR DISKRET SPRÆKKE METODEN. FRA SUDICKY & FRIND (1982)

Flere referencer peger på, at netop DS-modeller giver den mest korrekte beskrivelse af forurenings-transporten gennem opsprækkede medier. DS-modeller er uafhængige af skalaen (kan anvendes både på enkeltsprækker og på sprækkesystemer), og metoden kan derfor relativt let implementeres på forskellige lokaliteter /Jørgensen et al., 2006/. Den store ulempe ved metoden er, at sprækkernes dimensioner og egenskaber indgår som input, hvilket almindeligvis er data, der er svære at fremskaffe. Samtidig influerer disse parametre afgørende på resultatet. Ofte vil det være nødvendigt at estimere disse data ud fra geostatistiske informationer eller benytte litteraturdata. Christiansen & Wood (2006) præsenterer på baggrund af et omfattende litteraturstudium en oversigt over karakteristika for opsprækket moræneler under typiske danske forhold.

#### 5.5.4 Praktiske erfaringer med sprække-transport

Den matematiske modelformulering til beskrivelse af sprække-transport i JAGG er ikke verificeret på danske cases. Der eksisterer imidlertid kun meget få cases, hvor anvendeligheden af en sprække-transportmodel evt. vil kunne verificeres i praksis, til trods for at sprække-transport herhjemme har været genstand for en del fokus de seneste år.

Ved Ringe er der gennemført feltforsøg omhandlende stoftransport og nedbrydning i et makroporøst moræneler. På lokaliteten er der foretaget en omfattende kortlægning af sprækker og makroporer /Broholm et al., 2000/. Ud fra tracerforsøg er der bestemt gennembrudskurver, og på baggrund heraf er der fundet en meget hurtig vertikal transport med hastigheder på op til næsten 9 m/dag. Til trods for den hurtige transport, blev der under forsøget konstateret fjernelse af organiske stoffer, der primært er tilskrevet nedbrydning /Broholm et al., 2000/.

Ved Flakkebjerg er der foretaget en kortlægning og karakterisering af sprækkerne i en moræneler ned til 5,5 m under terræn. På baggrund af sporstofforsøg i felten og lysimeterforsøg på jordsøjler er der ligeledes observeret hurtig transport gennem den opsprækkede moræneler /Gravensen et al., 2000/.

Transporten gennem dybe sprækker er undersøgt på en lokalitet ved Havdrup. Også her er der med udgangspunkt i tracerforsøg i felten registreret hurtige gennembrudstider, og hastigheder på mellem 100 – 300 m/dag er rapporteret. Der er endvidere gennemført transportforsøg med

forskellige pesticider, og resultaterne herfra indikerer kun begrænset sorption og nedbrydning ved transport /Gravesen et al., 2000/.

I en Ph.D. afhandling af /Mortensen, 2001/ er betydningen af præferentiel flow-strømning i umættet moræneler undersøgt. I den forbindelse er adskillige tracerforsøg udført i en isoleret blok ved Avedøre. Forsøgene er udført med forskellige konstante vandingsintensiteter. For at kunne vurdere den diffusive udveksling mellem sprækker og matrix er der i forsøgene endvidere tilsat flere tracere samtidigt med forskellige diffusionskoefficienter. Resultaterne fra sporstofforsøgene viser ved høje vandingsintensiteter traditionelle asymmetriske gennembrudskurver med et hurtigt peak og en efterfølgende lang hale. Derudover indikerer resultaterne, at der kun sker begrænset diffusion ind i matrix under transporten ved de største strømningshastigheder. Ved den laveste vandingsintensitet er der derimod observeret gennembrudskurver med dobbelt-peak, hvilket indikerer, at diffusion ud i matrix har været væsentlig /Mortensen, 2001/. Endvidere er der på baggrund af de observerede gennembrudskurver foretaget modellering med den dobbelt-porøse model CXTFIT. Modellen var i stand til at tilpasse observerede data, men resulterede imidlertid i estimering af delvist urealistiske parametre /Mortensen, 2001/.

## 5.6 Samlede konklusioner

I forbindelse med opdatering af Miljøstyrelsens risikovurderingsværktøj JAGG 2 og modulet for vertikale transport af opløste organiske komponenter er der taget udgangspunkt i 4 forskellige konceptuelle modeller. Det var på forhånd ventet, at disse kunne repræsentere de fleste konkrete forureningssager, og på baggrund af det gennemførte litteraturstudium er der da heller ikke fundet grundlag for at udvide antallet af konceptuelle modeller.

Til hver af de konceptuelle modeller er der fundet et matematisk formelgrundlag, der kan beskrive både den transiente og stationære vertikale transport til førstkommande grundvandsmagasin.

Det har vist sig, at transporten i Model A og Model C kan beskrives med udgangspunkt i de samme analytiske løsninger, idet Model A er det "særltilfælde" af Model C, hvor vandindholdet er 100 %. Samtidig er det erfaret, at den tilnærmede 3D stoftransportmodel af Domenico (1987) ikke er anvendelig til beskrivelse af vertikal stoftransport gennem en umættet zone. I Miljøstyrelsens risikovurderingsværktøj JAGG2 er det derfor valgt at præsentere de generelle 1D udtryk angivet i Ligning 24 og Ligning 25, da disse er gældende for både Model A og C.

Den eksakte 3D-model af Wexler (1992) er ikke implementeret i JAGG 2, men kan være af interesse, da det inkluderer horisontal spredning, der kan medføre en væsentlig reduktion af koncentrationen ved grundvandsspejlet.

Til beskrivelse af transporten i Model B anbefales det opstillede udtryk af Sudicky & Frind (1982) i Ligning 43. Spredningen og transporten gennem opsprækket ler er beskrevet i en rapport fra Videncenter for Jordforurening (2008). Efterfølgende har Institut for Miljø & Ressourcer, DTU, udarbejdet et modul til beregning af vertikal transport i opsprækket jord (Chambon et al., 2010).

For Model D kan den stationære og transiente horisontale forureningsspredning beskrives ved hjælp af Ligning 36 og Ligning 37, men disse ligninger er ikke implementeret i JAGG2. da de udelukkende er tænkt som et hjælpeværktøj og ikke kan anvendes i en risikovurdering over for grundvand.

## 5.7 Videnskabelige udfordringer

Under udarbejdelsen af nærværende projekt er vi løbet ind i nogle videnskabelige udfordringer, der kræver videre undersøgelser at få løst optimalt. Det drejer sig om følgende punkter:

- *1D- kontra 3D-modeller.* Hvordan kan resultatet fra en 3D-spredning i umættet zone kobles til en beregning af den resulterende koncentration i den øverste del af mættede zone?
- *Forureningsoverførsel henover grundvandsspejlet.* Hvordan beregnes masseoverførslen fra umættet zone til grundvandsmagasinet for en forureningskilde under et befæstet areal, hvorigennem der ikke sker infiltration?
- *Nedbrydningsrater i umættet zone*

# 6. Nyt risikovurderingskoncept

## 6.1 Valg af konceptuel model

I det følgende beskrives et idéoplæg til, hvordan en faseinddelt risikovurdering kan udføres for en jordforurening i forhold til et grundvandsmagasin, idet der tages hensyn til vertikal transport processer, som beskrevet for de konceptuelle modeller A og C. I en konkret risikovurdering er det væsentligt først at afgøre, hvilken konceptuel model, der skal danne grundlag for beregningerne, herunder om betydningen af sprækketransport – svarende til den konceptuelle model B – skal medtages. Såfremt der ønskes beregninger af sprækkernes betydning, henvises til kapitel 5.5, Chambon et al. (2010), Videncenter for jordforurening (2008), samt DTU V1D modeller, som er implementeret i den nyeste version af JAGG2.

## 6.2 Faseopdelte risikovurdering for den umættede zone

Den faseopdelte risikovurdering indeholder tre faser (1-3), der afspejler den mængde af data, der er til rådighed for den forurenede lokalitet. Med små datamængder benyttes en relativt simpel beregningsmetode, mens der for mere veldokumenterede forureninger kan anvendes mere avancerede metoder. Proceduren er således analog til den trinvis risikovurdering for grundvandszonen, som er beskrevet i afsnit 5.4.2 i Vejledning 6 /Miljøstyrelsen, 1998a/. Eksempler på brug af den faseopdelte risikovurdering for vertikal transport findes i Bilag 1.

## 6.3 Sammenhæng mellem risikovurderingen for vertikal transport og grundvandszonen

Ved den faseinddelte risikovurdering for vertikal transport beregnes alene den resulterende koncentration,  $C_1$ , i toppen af magasinet. Den beregnede koncentration,  $C_1$ , indeholder således effekten af de processer, der sker under vertikal transport, samt den opblanding, der sker i de øverste 0,25 m af magasinet. Herved sikres en sammenhæng med den nuværende trinvis metode til risikovurdering af grundvandszonen. Endvidere vil det være muligt at anvende  $C_1$ , beregnet efter den nye faseinddelte metode, som input til trin 2 og 3 i den eksisterende trinvis metode for grundvandszonen.

## 6.4 Beskrivelse af de enkelte faser (1-3)

### 6.4.1 Fase 1

I fase 1 antages, at geologien samt forureningens type og afgrænsning er kendt, svarende til de data, der indsamles fra en traditionel forureningsundersøgelse. I denne fase vides det ikke, om forudsætningerne for nedbrydning er opfyldt, og der regnes derfor konservativt ved at se bort fra nedbrydning ( $\lambda=0$ ). Der medtages sorption, dispersion og diffusion i den umættede zone. Det antages, at både den umættede og mættede zone er homogene og isotrope. Hvis den beregnede  $C_1$  efter fase 1 ikke overholder grundvandskvalitetskriterierne, udgør forureningen en risiko, og man kan vælge at udbygge datagrundlaget og herefter gennemføre fase 2 i risikovurderingen.



#### 6.4.2 Fase 2

I fase 2 er forudsætningerne for nedbrydning på den konkrete lokalitet undersøgt nærmere. For en række aerobt nedbrydelige stoffer som benzen, toluen, xylen og ethylbenzen (BTEX) m.fl. er der en række specifikke forhold, der skal være opfyldt, førend det er rimeligt at inkludere denne proces. De vigtigste parametre, der bør fastlægges i denne fase, er indholdet af ilt i poreluften, vandindholdet i jorden samt evt. direkte indikationer på forøget biologisk aktivitet som følge af mikroorganismernes respiration. Ved deres respiration bruger mikroorganismene af poreluftens indhold af ilt og tilfører den kuldioxid, samtidig med at de nedbryder kulbrinterne ved at udnytte dem som energikilde.

For BTEX og andre kulbrinter fra olieprodukter vil et naturligt baggrunds-niveau af ilt i poreluften på mere end 5-10 vol.% være nødvendigt for at sikre, at jorden har en tilstrækkelig geniltningsskapacitet. I selve det forurenede område, hvor der findes kulbrinter i jorden, skal indholdet af ilt i poreluften være mindst 1 vol.% for at sikre, at den aerobe nedbrydning kan opretholdes. Observeres der samtidigt et forhøjet indhold af kuldioxid i kildeområdet (typisk mere end 2 vol.%), er der tilstrækkelige indikationer på, at der sker en aerob biologisk nedbrydning af kulbrinter.

Er disse forudsætninger opfyldt, kan der gennemføres en beregning af  $C_1$  hvor aerob nedbrydning medtages. I bilag 2 er der givet forslag til konservative 1.ordens nedbrydningsrater ( $\lambda$ ) for BTEX og alifatiske kulbrinter. Hvis nedbrydning inkluderes i beregningerne, skal der gennemføres en efterfølgende monitoringsfase.

Hvis den beregnede  $C_1$  efter fase 2, hvor der er medtaget nedbrydning i den umættede zone, ikke overholder grundvandskvalitetskriterierne, udgør forureningen en risiko. Med den beregnede  $C_1$  kan der herefter eventuelt fortsættes med trin 2, og evt. trin 3 i den traditionelle metode til risikovurdering i selve grundvandszonen.

Hvis risikovurderingen derimod viser, at grundvandskvalitetskriteriet er overholdt, skal der gennemføres monitoring til kontrol af forurenings-nedbrydningen.

#### 6.4.3 Fase 3

I fase 3 skal der gennemføres monitoring og kontrol af, at de beregnede koncentrationer i grundvandet umiddelbart under forureningen ikke overskrides og at grundvandskvalitetskriteriet er overholdt. Ved monitoringen skal der endvidere fremskaffes data, som kan belyse, at den vertikale transport har nået en stabil og stationær udvikling samt evt. danne grundlag for beregning af den aktuelle 1.ordens nedbrydningsrate.

I forhold til dokumentation af nedbrydning og transport i grundvandszonen, kompliceres forholdene i den umættede zone af en række faktorer. For det første er det rent praktisk vanskeligt at udtage porevandsprøver fra den umættede zone pga. dens lave vandindhold, og i nogle tilfælde på grund af dybden. Endvidere kan indholdet af de stoffer, der ønskes bestemt i porevandet, blive påvirket af selve prøvetagnings-metoden, og derfor resultere i alt for lave koncentrationer. En række metoder til udtagning af repræsentative porevandsprøver fra den umættede zone er afprøvet under feltforhold /Miljøstyrelsen, 2000/, hvortil der henvises for yderligere detaljer.

For en række flygtige stoffer som fx BTEX kan det derfor alternativt vælges at måle poreluftkoncentrationer og herefter omregne dem til porevandskoncentrationer ved hjælp af de traditionelle fugacitetsprincipper. Placeringen af monitoringsfiltre igennem den umættede zone vil afhænge af den konkrete forurening og den aktuelle forurening, og må derfor vurderes i den konkrete sag. Da koncentrationen af kulbrinter i porevandet kan aftage meget hurtigt over dybden i tilfælde af en meget kraftig nedbrydning, kan det være nødvendigt at placere monitoringsfiltre med en lille indbyrdes vertikal afstand lige under kilden. Et eksempel herpå er vist i Bilag 1.

Specielt hvor der er stor dybde til grundvandet, kan der potentielt være mere end 15-20 meter umættet zone under selve jordforureningens nedre afgrænsning. I sådanne situationer kan den forventede gennembrudstid til grundvandet være 5-10 år eller mere. I disse tilfælde, og hvor der samtidig ikke forventes et målbart indhold i grundvandet, kan det således være nødvendigt alene af basere monitoringen på porevand eller poreluft udtaget i den umættede zone.

Dokumentation af, at der på en konkret lokalitet sker en aerob nedbrydning af kulbrinter i den umættede zone, kræver ud over tilstedeværelsen af ilt også at der findes tilstrækkeligt med mikronæringsstoffer (N & P) samt en række spormetaller. Der findes en række konkrete metoder til, hvordan den aktuelle nedbrydning kan fastlægges og aktuelle 1. ordens rater bestemmes under aerobe forhold. Der henvises til Bilag 2, hvor disse metoder er oversigtligt beskrevet og hvor der findes henvisninger til den relevante litteratur. Desuden er der udgivet en Miljøstyrelsens rapport (Muchitsch et.al, 2012) om litteraturgennemgang af strategier til dokumentation af nedbrydning af oliestoffer i den umættede zone.

Et eksempel på, hvordan det kan påvises, at der foregår nedbrydning af BTEX i den umættede zone, er givet i eksempel 2 i Bilag 1.

Som udgangspunkt skal monitoringen eftervise, at den aktuelle koncentration i de øverste 0,25 m af grundvandsmagasinet til enhver tid overholder grundvandskvalitetskriteriet. I forbindelse med nye forureninger - hvor der endnu ikke er opnået en stationær situation ved start af monitoringen, kan det være nødvendigt at følge udviklingen over en længere periode. Først når der foreligger tilstrækkelige resultater, der indikerer en begyndende stabil og stationær situation, kan der gennemføres en vurdering af behovet for yderligere monitoring eller iværksættelse af afværgetiltag. I forbindelse med forureninger, der har ligget i jorden i en længere periode, vil der som udgangspunkt skulle monitoreres i mindst 3 – 10 år afhængig af forholdene. Koncentrationer af kulbrinter i poreluften og toppen af grundvandsmagasinet bør måles kvartalsvis det første år og halvårligt de efterfølgende år. Poreluftens indhold af ilt og kuldioxid bør dog generelt måles kvartalsvis, således at den forventelige naturlige variation kan vurderes.

# Referencer

ANPA (2002). *ROME. Reasonable Maximum Exposure. Version 2.1. Operating Manual*. ANPA Environ.

Andersen, L. og Oberender, A. Opgradering af JAGG. Revision af fugacitetsberegninger, håndtering af fri fase og blandingsforureninger. Miljøprojekt. Miljøstyrelsen (udkast 2006) Ikke udkommet endnu.

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

AVJ (1998): *Håndbog For Poreluftsundersøgelser*. Amternes Videncenter for Jordforurening, Teknik og Administration Nr. 7.

AVJ (2004): *Transport af gasformig forurening i umættet zone og i bygninger*. Amternes Videncenter for Jordforurening, Teknik og Administration Nr. 7.

Aziz, C. E., Newell, C.J., Gonzales, J.R. (2000). *BIOCHLOR- Natural Attenuation Decision Support System. User's Manual Version 1.0*. US Environmental Protection Agency.

Bay, H., Christensen, P.M., Dali, J., Fog, C., Kildeby, M.R., Mortensen, A.P., Persson, B., Rügge, K., Terkelsen, M., Falkenberg, J.A., Spliid, N.H., Jensen, A.R. (2007). Miljøprojekt 1152. *Pesticidtruslen mod grundvandet fra pesticidpunktkilder på oplandsskala - Pesticiddatabase og risikovurdering*. Miljø- og Energiministeriet. Miljøstyrelsen.

Bedient, P.B., Rifai, H.S. & Newell, C.J. (1997). *Groundwater contamination – Transport and remediation*. Second Edition. Prentice Hall PTR, Upper Saddle River, New Jersey, 07458.

Binning, P., Celia, M. A. & Johnson, J. C. (1995). *Auxiliary Analyses in Support of Performance Assessment of a Hypothetical Low-Level Waste Facility: Two-Phase Flow and Contaminant Transport in Unsaturated Soils with Application to Low-Level Radioactive Waste Disposal*. U.S. Nuclear Regulatory Research, NUREG/CR-6114, vol. 2.

Bouchard, D. (2005). *Use of stable isotope analysis to assess biodegradation of volatile organic compounds in the unsaturated subsurface*. Ph.D Thesis. CHYN. University of Neuchâtel, Switzerland.

Broholm, K., Nilsson, B., Sidle, R.C., Arvin, E. (2000). *Transport and biodegradation of creosote compounds in clayey till, a field experiment*. Journal of Contaminant Hydrology, 41: 239–260.

Broholm, M. (1999). *Klorerede opløsningsmidler, hvor stort er problemet?* ATV møde, Chlorerede opløsningsmidler på tværs. Schæffergården 10. juni 1999.

Brooks, R.H. & Corey, A.T. (1964). *Hydraulic properties of porous media*. Hydrology papers, Colorado State University, Fort Collins Colorado. No. 3.

- Butts, M. & Broholm, K. (1996). *Transport af ikke blandbare kulbrinter i jord og grundvand. I: Kemiske stoffers opførsel i jord og grundvand. Bind 1.* Kjeldsen, P. og Christensen, T.H. (Red). Projekt om jord og grundvand fra Miljøstyrelsen, nr. 20, 1996. Miljø- og Energiministeriet. pp. 81-116.
- Celia, M. A. & Binning, P. (1992). *A Mass Conservative Numerical Solution for Two-Phase Flow in Porous Media With Application to Unsaturated Flow*, Water Resources Research, vol. 28, no. 10, pp. 2819-2828.
- Chambon, J., Bjerg, P.L. & Binning, P.J. *A risk assessment tool for contaminated sites in low-permeability fractured media.* Miljøstyrelsen (udkast 2010).
- Choi, J. & Smith, J. A. (2005). *Geoenvironmental Factors Affecting Organic Vapor Advection and Diffusion Fluxes from the Unsaturated Zone to the Atmosphere under Natural Conditions.* Environmental Engineering Science, vol. 22, no. 1, pp. 95-108.
- Choi, J., Tillman, F. D. Jr. & Smith, J. A. (2002). *Relative Importance of Gas-Phase Diffusive and Advective Trichloroethene (TCE) Fluxes in the Unsaturated Zone under Natural Conditions.* Environmental Science Technology, vol. 36, no. 14, pp. 3157-3164.
- Christiansen, C. & Wood, J.S.A (2006): *Environmental Fracturing in Clay Till Deposits. Master Thesis.* Institute of Environment & resources. Technical University of Denmark.
- Christophersen, M., Broholm, M., Mosbæk, H., Karapanagioti, H. K., Burganos, V. N. & Kjeldsen, P. (2005). *Transport of hydrocarbons from an emplaced fuel source experiment in the vadose zone at Airbase Værløse, Denmark.* Journal of Contaminant Hydrology, vol. 81, no. 1-4, pp. 1– 33.
- CLARINET (2002). *Review of Decision Support Tools for Contaminated Land Management, and their Use in Europe.* Austrian Federal Environment Agency, Contaminated Land Rehabilitation Network for Environmental Technologies, November 2002.
- Dakhel, N., Pasteris, G., Werner, D., Höhener P. (2003). *Small-Volume Releases of Gasoline in the Vadose Zone: Impact of the Additives MTBE and Ethanol on Groundwater Quality.* Environmental Science & Technology, vol. 37, no. 10, pp. 2127-2122.
- Davison, R. & Hall, D.H. (2003). *ConSim Version 2. User Manual.* Published by Golder Associates on behalf of the UK Environment Agency.
- de Jonge, L.W., Kjaergaard, C., Moldrup, P. (2004). *Colloids and Colloid-Facilitated Transport of Contaminants in Soils: An Introduction.* Vadose Zone Journal, 3: 321-325.
- DeVaull, G., Ettinger, R., Gustafson, J. (2002). *Chemical Vapor Intrusion from Soil or Groundwater to Indoor Air: Significance of Unsaturated Zone Biodegradation of Aromatic Hydrocarbons.* Soil and Sediment Contamination, 11(4):625-641.
- DeVaull, G., Ettinger, R., Salanitro, J.P., Gustafson, J. (1997). *Benzene, toluene, ethylbenzene, and xylenes [BTEX] degradation in vadose zone soil during vapor transport: First order rate constants.* In Proceedings of the Petroleum Hydrocarbons and Organic Chemicals in Ground Water – Prevention, Detection and Remediation Conference.
- Domenico, P. A. & Robbins, G. A. (1985). *A New Method of Contaminant Plume Analysis.* Groundwater, vol. 23, no. 4, pp. 476-485.

- Domenico, P.A. (1987). *An analytical model for multidimensional transport of a decaying contaminant species*. Journal of Hydrology, 91, 49-58.
- Falta, R.W., Javandel, I., Pruess, K. & Witherspoon, P. A. (1989). *Density-driven Flow of Gas in the Unsaturated Zone Due to the Evaporation of Volatile Organic Compounds*, Water Resources Research, vol. 25, no, 10, pp. 2159-2169.
- Falta, R.W., Pruess, K., Finsterle, S., Battistelli, A. (1995). *T2VOC User's Guide*. March 1995.
- Fetter, C.W. (1999). *Contaminant Hydrogeology*. Second Edition. Prentice Hall. Upper Saddle River, NJ 07458.
- Flury M. & Gimmi, T. (2002). *The Soil Gas Phase. I: Methods of Soil Analysis: Part 4. Physical Methods*, eds. J.H. Dane & G.C. Topp, Soil Science Society of America, Madison.
- Gelhar, L.W., Welty, C., Rehfeldt, K.R. (1992). *A Critical Review of Data on Field-Scale Dispersion in Aquifers*. Water Resources Research, Vol. 28, No. 7, 1992, 1955-1974.
- Glenn, C., Dougherty, K., Arroyo, S., Sheldon, J., Hawley, K. (2002). *Monitored intrinsic remediation of petroleum hydrocarbons in the vadose zone*. A.R. Gavaskar and A.S.C. Chen. Remediation of Chlorinated and recalcitrant compounds (Monterey, 2002).
- Grathwohl, P., Klenk, I.D., Maier, U., Reckhorn, S.B.F. (2002). *Natural attenuation of volatile hydrocarbons in the unsaturated zone and shallow groundwater plumes: scenario-specific modelling and laboratory experiment*. Groundwater Quality: Natural and Enhanced Restoration of Groundwater Pollution.
- Gravesen, P., Klint, K.E.S., Jacobsen, O.S., Harrar, W.G., Felding, G., Jørgensen, P., Fomsgaard, I., Spliid, N.H. (2000). *Transport af vand og pesticider i opsprækket moræner*. Det strategiske miljøforskningsprogram.
- Hunt, B. (2006): *Groundwater analysis using function.xls*. Civil Engineering Department, University of Canterbury. August 2006.
- Höhener, P., Dakhel, N., Christophersen, M., Broholm, M., Kjeldsen, P. (2006). *Biodegradation of hydrocarbons vapors: Comparison of laboratory studies and field investigations in the vadose zone at the emplaced fuel source experiment, Airbase Værløse, Denmark*. Journal of Contaminant Hydrology, 88: 337-358.
- Jury, W.A., Spencer, W.F., Farmer, W.J. (1983). *Behaviour Assessment Model for Trace Organics in Soil: I. Model Description*. J. Environ. Qual., Vol. 12, no. 4, pp 558-564.
- Jury, W.A., Spencer, W.F., Farmer, W.J. (1984). *Behaviour Assessment Model for Trace Organics in Soil: IV. Review of Experimental Evidence*. J. Environ. Qual., Vol. 13, no. 4, pp 580-586.
- Jørgensen, P.R. & Spliid, N. H (1998). *Migration and biodegradation of pesticides in fractured clayey till. Bekæmpelsesmiddelforskning fra Miljøstyrelsen Nr. 37, 1998*. Miljø- og Energiministeriet. Miljøstyrelsen, København.
- Jørgensen, P.R., Helstrup, T., Urup, J., Seifert, S. (2004). *Modelling of non-reactive solute transport in fractured clayey till during variable flow rate and time*. Journal of Contaminant Hydrology, 68: 193-216.

- Jørgensen, P.R., Linderoth, H.C.L, Larsen, L.C. (2006). *Modellering af sprække-transport i moræner*. Vand & Jord, 13. årgang nr. 4.
- Jørgensen, T.H., Scheutz, C., Durant, N.D., Cox, E., Bordum, N.E., Rasmussen, P., og Bjerg, P.L., (2005): Stimuleret in situ reaktiv dechlorering. Vidensopsamling og screening af lokaliteter. Hovedrapport. Miljøprojekt Nr. 983, 2005, Miljøstyrelsen
- Karapanagioti, H., Gaggins, P., Burganos, V. N., and Hohener, P. (2004). "Reactive Transport of Volatile Organic Compound Mixtures in the Unsaturated Zone: Modeling and Tuning with Lysimeter Data". *Envi. Model. & Soft.*, 19, 435-450.
- Karimi-Fard, M., Durlofsky, L.J. and Aziz, K. (2004). *An efficient discrete-fracture model application for general-purpose reservoir simulators*. Society of Petroleum Engineers Vol. 9, Number 2, June: 227-236.
- Kjeldsen, P. (1996). *Sorption af organiske stoffer. I: Kemiske stoffers opførsel i jord og grundvand*. Bind 1. Kjeldsen, P. & Christensen, T.H. (Red). Projekt om jord og grundvand fra Miljøstyrelsen, nr. 20, 1996. Miljø- og Energiministeriet. p. 205-234.
- Kjeldsen, P. & Christensen, T.H. (1996). *Kemiske stoffers opførsel i jord og grundvand – en oversigt. I: Kemiske stoffers opførsel i jord og grundvand*. Bind 1. Kjeldsen, P. & Christensen, T.H. (Red). Projekt om jord og grundvand fra Miljøstyrelsen, nr. 20, 1996. Miljø- og Energiministeriet. pp. 17-79.
- Klint, K.E.S., Gravesen, P. (1999). Fractures and biopores in Weichselian clayey till aquitards at Flakkebjerg, Denmark. *Nordic Hydrology*, 30 (4, 5): 267 – 284.
- Lahvis, M. & Baehr, A.L. (1997). *Documentation of R-UNSAT, A computer model for the simulation of reactive, multispecies transport in the unsaturated zone*. U.S. Geological Survey.
- Lahvis, M.A., Baehr, A.L., Baker, R.J. (1999). *Quantification of aerobic biodegradation and volatilization rates of gasoline hydrocarbons near the water table under natural attenuation conditions*. *Water Resources Research*, vol. 35, no. 3, pp 753-765.
- Lahvis, M. & Rehmann, L.(2000). *Simulation of Transport of Methyl Tert-Butyl Ether (MTBE) to Groundwater From Small-Volume Releases of Gasoline in the Vadose Zone*. API Soil & Groundwater Research Bulletin. No. 10.
- Larsen, T. (2006): *Opdatering af JAGG-projekt-katalog*, Orbicon, udført for Miljøstyrelsen, udkast. 2006.
- Lindhardt, B. & Christensen, T.H. (1996). *Afdampning og transport af flygtige stoffer i jord. I: Kemiske stoffers opførsel i jord og grundvand*. Bind 1. Kjeldsen, P. & Christensen, T.H. (Red). Projekt om jord og grundvand fra Miljøstyrelsen, nr. 20, 1996. Miljø- og Energiministeriet. pp. 17-79.
- Luikov, A.V. (1968). *Analytical heat diffusion theory*. Academic press, New York and London.
- Maier, U., Grathwohl, P. (2005). *Numerical experiments and field results on the size of steady state plumes*. *Journal of Contaminant Hydrology*, 85, 33-52.
- McKay, L.D., Cherry, J.A., Gillham, R.W.(1993). *Field experiment in a fractured clay till. 1. Hydraulic conductivity and fracture aperture*. *Water Resources Research* Vol. 29, No. 4: 1149-1162.

- MDH (2005). *Evaluation of computer models for predicting the fate and transport of hydrocarbons in soil and groundwater*. MDH Engineered Solutions Corporation.
- Mendoza, C. A. & Frind, E. O. (1990). *Advective-Dispersive Transport of Dense Organic Vapors in the Unsaturated Zone: 2. Sensitivity Analysis*. *Water Resources Research*, vol. 26, no. 3, pp. 388-398.
- Mendoza, C. A. & McAlary, T. (1990). *Modelling of Ground-Water Contamination Caused by Organic Solvent Vapors*. *Ground water*. Vol. 28, no. 2, pp. 199-206.
- Miljøstyrelsen (1998a). *Oprydning på forurenede lokaliteter. Hovedbind*. Vejledning fra Miljøstyrelsen Nr. 6, 1998. Miljø - og Energiministeriet.
- Miljøstyrelsen (1998b). *Oprydning på forurenede lokaliteter. Appendikser*. Vejledning fra Miljøstyrelsen Nr. 7, 1998. Miljø - og Energiministeriet.
- Miljøstyrelsen (2000). *Prøvetagning af porevand i umættet zone*. Miljøprojekt nr. 540. 2000.
- Millington, R. J. & Quirk, J. P. (1961). *Permeability of Porous Solids*. *Trans. Faraday. Soc.*, vol. 57, pp. 1200-1207.
- Moldrup, P., Olesen, T., Gamst, J. Schjonning, P., Yamaguchi, T. & Rolston, D.E (2000). *Predicting the Gas Diffusion Coefficient in Repacked Soil: Water-Induced Linear Reduction Model*. *Soil Science Society of America Journal*. Vol. 64, no. 5, pp. 1588-1594.
- Moldrup, P., Olesen, T., Komatsu, T., Schjønning, P. & Rolston, D. E. 2001, 'Tortuosity, Diffusivity, and Permeability in the Soil Liquid and Gaseous Phases', *Soil Science Society of American Journal*, vol. 65, no, 3, pp. 613-623.
- Moldrup, P., Olesen, T., Yoshikawa, S., Komatsu, T. & Rolston, D. E. (2004). *Three-Porosity Model for Predicting the Gas Diffusion Coefficient in Undisturbed Soil*. *Soil Science Society of American Journal*. Vol. 68, pp. 750-759.
- Mortensen, A.P. (2001). *Preferential Flow Phenomena in Partially-Saturated Porous Media*. Ph.D. Thesis. Institute of Environment & Resources, Technical University of Denmark. September, 2001.
- Muchitsch, N., Christensen, A.G., Loll, P og Kristensen A.G. *Litteraturgennemgang af strategier til dokumentation af nedbrydning af oliestoffer i den umættede zone*. Miljøstyrelsen. Miljøprojekt nr. 1413, 2012.
- Nazaroff, W.W. & Alvarez-Cohen, L. (2001). *Environmental Engineering Science*. John Wiley & Sons Inc. New York.
- Nielsen, S. (2007). *Stoftransport i umættet zone. Matematisk modellering af transport af TCE I den umættede zone under befæstet areal*. Eksamensprojekt ved Institut for Miljø & Ressourcer, Danmarks Tekniske Universitet.
- Olsson, Å., Grathwohl, P. (2006). *Transverse dispersion of non-reactive tracers in porous media: A new nonlinear relationship to predict dispersion coefficients*. *Journal of Contaminant Hydrology*, 92, 149-161.

- Parker, J.C. (2003). *Physical Processes Affecting Natural Depletion of Volatile Chemicals in Soil and Groundwater*. Vadose Zone Journal, 2: 220-230.
- Pruess, K. (1998). *Two-Phase Unsaturation Flow at Yucca Mountain Nevada – A Report on Current Understanding*. Earth Sciences Division., Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California, Berkeley.
- Pruess, K. & Battistelli, A. (2002). *TMVOC, A Numerical Simulator for Three-Phase Non-isothermal Flows of Multicomponent Hydrocarbon Mixtures in Saturated-Unsaturated Heterogeneous Media*.
- Pruess, K., Oldenburg, C., Moridis, G. (1999). *TOUGH2 USER'S GUIDE, VERSION 2.0*. Earth Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory University of California, Berkeley, California.
- Ravi, V. & Johnson, J.A. (1997). *VLEACH – A one-Dimensional Finite Difference Vadose Zone Leaching Model*. Version 2.2. US EPA.
- Rixey, W.G. (2002): *Technical Justification Document for Tier 1 Soil Levels for BTEXN and TPH At Exploration and Production Sites in the State of New Mexico*. Prepared for New Mexico Oil and Gas Association.
- Schwartz, F.W. & Zhang, H. (2003). *Fundamentals of Groundwater*. John Wiley & Sons, Inc.
- Schulze-Makuch, D. (2005). *Longitudinal Dispersivity Data and Implications for Scaling Behaviour*. Ground water, Vol. 43, No. 3, pp. 443-456.
- Shan, C. & Stevens, D. (1995). *An analytical solution for vertical transport of volatile chemicals in the vadose zone*. Journal of Contaminant Hydrology, 18, 259-277.
- Sonnenborg, T.O., Engesgaard, P., Rosbjerg, D. (2001). *Groundwater flow and solute transport*. Environment & Resources, DTU. Technical University of Denmark. Kgs. Lyngby, October 2001.
- Spence, L. (2001). *RISC 4. User's manual*. Spence Engineering and BP Oil ltd.
- Spiegel, M.R. (1968): *Mathematical handbook of formulas and tables*. Schaum's outline series. McGraw-Hill book company.
- Srinivasan, V., Clement, T.P., Lee, K.K. (2007). *Domenico Solution – Is It Valid?*. Ground water, Vol. 45, No. 2, pp. 136-146.
- Sudicky, E.A. & Frind, E.O.(1982). *Contaminant transport in fractured porous media: Analytical solutions for a system of parallel fractures*. Water Resources Research, Vol 18, No. 6, pp 1634-1642.
- Sudicky, E.A. & McLaren, R.G.(1998). *FRACTRAN User's Guide – An Efficient Simulator for Two-dimensional, Saturated Groundwater Flow and Solute Transport in Porous or Discretely-fractured Porous Formations*. Groundwater Simulations Group. Waterloo Centre for Groundwater Research. University of Waterloo.
- Thorstenson D. C. & Pollock D. W (1989). *Gas Transport in Unsaturation Porous Media: The Adequacy of Fick's Law*. Reviews of Geophysics, vol. 27, no. 1, pp. 61-78.



- Tillman, F. D. Jr. & Smith, J. A. (2005). *Site Characteristics Controlling Airflow in the Shallow Unsaturated Zone in Response to Atmospheric Pressure Changes*. Environmental Engineering Science, vol. 22, no. 1, pp 25-37.
- Toride, N., Leji, F.J., van Genuchten, M.Th. (1999). *The CXTFIT Code for Estimating Transport Parameters from Laboratory or Field Tracer Experiments. Version 2.1*. U.S. Salinity Laboratory, Agricultural Research Service, U.S. Department of Agriculture, Riverside, CA. Research Report No. 137.
- Troldborg, M. & Lemming, G. (2005): *Værktøjer til risikovurdering af en punktkilde*. Forprojekt, Institut for Miljø & Ressourcer, DTU.
- Ünlü, K., Kemblowski, M.W., Parker, J.C., Stevens, D., Chong, P.K., Kamil, I. (1992). *A screening model for effects of land-disposed wastes on groundwater quality*. Journal of Contaminant Hydrology, 11, 27-49.
- US EPA (1999). *RBCA Fate and Transport models: Compendium and selection guidance*. ASTM Technical & Professional Training.
- van Genuchten, M.T (1980): *A Closed-Form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils*. Soil Science Society of American Journal, vol. 44, pp. 892-898.
- van Genuchten, M.T, & Alves, W.J. (1982): *Analytical Solutions of the One Dimensional Convective-Dispersive Solute Transport Equation*. United States Department of Agriculture. Agricultural research Service. Technical Bulletin, Number 1661.
- Videncenter for Jordforurening. SprækkeJAGG. Regneark til risikovurdering af sprækker i moræneler. Teknik og Administration. Nr. 2 2008.
- Walden, T. (2005): *Risk assessment in soil pollution: comparison study*. Reviews in Environmental Science and Bio/Technology (2005) 4:87-113.
- Wang G., Reckhorn, S.B.F., Grathwohl, P. (2003). *Volatile Organic Compounds Volatilization from Multicomponent Organic Liquids and Diffusion in Unsaturated Porous Media*. Vadose Zone Journal, 2: 692-701.
- Wexler, E.J. (1992). *Analytical solutions for one-, two, and three dimensional solute transport in ground-water systems with uniform flow*. USGS-TWRI Book 3, Chapter B7. Reston, Virginia: USGS.
- Wilson, D.J. (1997). *Soil gas volatile organic compound concentration contours for locating vadose zone nonaqueous phase liquid contamination*. Environmental Monitoring and Assessment, 48: 73-100.
- Xu, M., Eckstein, Y. (1995). *Use of Weighted Least-Squared Method in Evaluation of the Relationship Between Dispersivity and Field Scale*. Ground Water, 33(6): 905-908.
- Zheng, C., Wang, P. (1999). *MT3DMS: A Modular Three-Dimensional Multispecies Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems; Documentation and User's guide*. Strategic Environmental Research and Development Program.

# Symbolliste

Symbol	Beskrivelse
$A:$	TVÆRSNITSAREAL AF SPRÆKKE I LIGNING 39
$a:$	FASELIGE VÆGTSKONSTANT
$A_f:$	KONTAKTAREAL FOR SPRÆKKER I LIGNING 42
$A_{gvs}:$	STØRRELSE AF DET FORURENEDE AREAL LIGE OVER GRUNDEVNDS SPEJLET
$A_m:$	KONTAKTAREAL FOR MATRIX I LIGNING 42
$B:$	FORURENINGSKILDENS BREDE PÅ TVÆRS AF STRØMNINGSRETNINGEN I GRUNDEVANDET
$C:$	KONCENTRATION
$C_0:$	KONCENTRATION I KILDEN
$C_1$ OG $C_2:$	ARBITRÆR KONSTANTER I LIGNING 35
$C_1:$	DEN RESULTERENDE KONCENTRATION I DEN ØVERSTE DEL AF GRUNDEVAND – TRIN 1
$C_a:$	KONCENTRATION I GASFASEN
$C_g:$	DEN NATURLIGE BAGGRUNDSKONCENTRATION I GRUNDEVAND
$C_u:$	DEN BEREGNEDE KONCENTRATION LIGE OVER GRUNDEVANDSSPEJLET
$C_w:$	KONCENTRATION I VANDFASEN
$C_a:$	KONCENTRATION AF FASEN
$D_{d,a}:$	FRIE DIFFUSIONSKOEFFICIENT
$D_{eff}:$	EFFEKTIV HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT
$D_{eff}:$	EFFEKTIV HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT
$D_f:$	HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT I SPRÆKKE I LIGNING 43
$D_L:$	LONGITUDINAL HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT
$D_m:$	HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT I MATRIX I LIGNING 43
$D_w^*:$	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT I VAND
$D_w:$	HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT I VAND
$D_z:$	HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT DEFINERET I LIGNING 18
$D_a^*:$	EFFEKTIV DIFFUSIONSKOEFFICIENT
$D_a:$	HYDRODYNAMISK DISPERSIONSKOEFFICIENT
$erf:$	ERROR FUNCTION
$erfc:$	DEN KOMPLIMENTÆRE ERROR FUNCTION
$F:$	FORURENINGSFLUX
$f_{oc}:$	FRAKTION AF ORGANISK KULSTOF I JORD
$g:$	TYNGDEACCELERATION I LIGNING 39
$H:$	HENRYS KONSTANT
$i:$	DEN HYDRAULISKE GRADIENT
$I_0(x):$	MODIFICERET BESSEL FUNKTION AF FØRSTE ART OG ORDEN 0
$K:$	HYDRAULISK LEDNINGSEVNE AF SPRÆKKE I LIGNING 39
$k:$	ÆKVIVALENT PERMEABILITET I LIGNING 42
$K:$	HYDRAULISK LEDNINGSEVNE
$K_0(x):$	MODIFICERET BESSEL FUNKTION AF ANDEN ART OG ORDEN 0
$K_d:$	FORDELINGSKOEFFICIENT MELLEM VAND OG JORD
$k_f:$	PERMEABILITET AF SPRÆKKERNE I LIGNING 42
$K_H:$	DIMENSIONSLØS HENRYS KONSTANT
$k_m:$	PERMEABILITET AF MATRIX I LIGNING 42

Symbol	Beskrivelse
$K_{oc}$ :	FORDELINGSKOEFFICIENT MELLEM VAND OG EN 100 % ORGANISK KULSTOFFASE
$L$ :	AFSTAND FRA FORURENINGSKILDE TIL GRUNDVANDSSPEJL
$m$	$R_2/R_1$ , SE LIGNING 35
$n$	TOTAL PORØSITET (SUM AF $\theta_w$ AF $\theta_a$ )
$N$ :	NETTONEDBØR
$P_a$ :	STOFFETS PARTIALTRYK OVER VANDFASEN
$Q$ :	STRØMNING GENNEM SPRÆKKE I LIGNING 39
$q_w$ :	DARCY HASTIGHED I VANDFASEN
$q_a$ :	FASENS DARCY HASTIGHED
$r$ :	RADIUS FRA KILDEN
$R$ :	RETARDATIONSFAKTOR
$R_f$ :	KILDENS RADIUS
$R_2$ :	AFSTAND HVOR KONCENTRATIONEN ANTAGES LIG 0
$R_f$ :	RETARDATIONSFAKTOR TIL SPRÆKKE-MATRIX FLADEN I LIGNING 43
$R_g$ :	GASKONSTANT (8,314 J.MOL <sup>-1</sup> . K <sup>-1</sup> )
$R_m$ :	RETARDATIONSFAKTOR I MATRIX I LIGNING 43
$R_T$ :	DEN TOTALE RETARDATIONSFAKTOR
$t$ :	TID
$T$ :	TEMPERATUR
$u$	DEFINERET I LIGNING 18
$u$ :	DEFINERET I LIGNING 18
$v_f$ :	STRØMNINGSHASTIGHED I SPRÆKKER I LIGNING 43
$v$ :	POREVANDSHASTIGHED
$v_s$ :	FORURENINGSFRONTENS GENNEMSITLIGE HASTIGHED
$v_w$ :	GENNEMSITLIG VANDSTRØMNINGSHASTIGHED I LIGNING 8
$v_w$	POREVANDSHASTIGHED I LIGNING 24, LIGNING 25, LIGNING 26 OG LIGNING 27
$v_a$ :	FASENS GENNEMSITLIGE STRØMNINGSHASTIGHED
$w$ :	SPRÆKKEBREDDE I LIGNING 39
$X$ :	BREDDE AF FORURENINGSKILDE
$Y$ :	LÆNGDE AF FORURENINGSKILDE
$Z$ :	VERTIKAL AFSTAND FRA KILDE
$\alpha$ :	DISPERSIVITET
$\alpha_L$ :	LONGITUDINAL DISPERSIVITET
$\alpha_T$ :	TRANSVERSAL DISPERSIVITET
$\theta_m$ :	PORØSITET AF MATRIX I LIGNING 43
$\theta_w$ :	VANDFYLDT PORØSITET
$\theta_a$ :	FASEMÆTNING
$\lambda$ :	1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE
$\mu$ :	VISKOSITET AF VAND I LIGNING 39
$\mu_n$ :	RØDDER I LIGNING 36
$\rho_b$ :	BULKDENSITET
$\rho_w$ :	DENSITET AF VAND I LIGNING 39
$\tau$ :	TORTUOSITET
$\omega$ :	DEFINERET I LIGNING 35
$\omega$ :	REAKTIONSRATE I LIGNING 13
$\phi_f$	SPRÆKKEPORØSITETEN I LIGNING 41
$\partial h/\partial L$ :	GRADIENT LANGS SPRÆKKEN LIGNING 39
$\nabla h_a$ :	DEN HYDRAULISKE GRADIENT
$2b$ :	SPRÆKKEAPERTUR (AFSTAND MELLEM PLADER)
$2B$ :	AFSTAND MELLEM SPRÆKKER

**Bilag 1: Beregningseksempler**

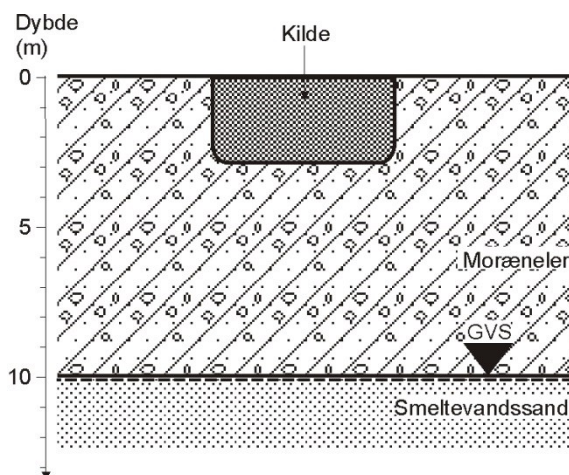
## Eksempel 1

### Sandmagasin med dække af moræneler

### Overfladenær forurening med benzin

#### Formål med eksemplet

Dette eksempel viser, hvordan den generelle transiente 1D-løsningsmodel kan anvendes, når der regnes med vertikal nedsivning under fuld vandmætning. Et simplificeret geologisk profil gennem området er vist på figur 1.



FIGUR 1:  
GEOLOGISK PROFIL

#### Geologi og hydrogeologi

Homogen vandmættet moræneler fra terræn og til ca. 10 m. u.t., hvor der træffes et sandmagasin. Vandspejlet i sandlaget står ca. 10 m u.t. Totalporøsiteten skønnes til  $V_t=0,40$ , og den relative volumenandel af vand i jorden ved fuld vandmætning er derfor  $V_v=0,40$ . Nettonedbøren,  $N$ , skønnes at være ca. 200 mm/år.

#### Forurening

Der er påvist en forurening med benzin på 800 mg totalkulbinter/kg TS. Forureningen dækker et areal  $A$  på ca. 5 x 5 m, og forureningen findes fra terræn og ned til ca. 3 m u.t. Ved ligevægt mellem benzin og nedsivende porevand kan der forventes en max. porevandskoncentration af benzen på ca. 12 mg/l og sum BTEX på ca. 40 mg/l. Kildestyrekekoncentrationen for benzen er således  $C_0=12$  mg/l og anvendes i det følgende beregningseksempel.

#### Spredningsveje og transportprocesser

De relevante processer for vurderingen af risikoen i forhold til grundvandet er opløsning og transport af oliestoffer med det infiltrerende porevand. Under transporten igennem den mættede moræneler vil både sorption til jordens organiske fase, dispersion i vandfasen samt evt. nedbrydning i porevandsfasen være de væsentligste processer.

#### Forudsætninger for biologisk nedbrydning

På grund af de geologiske forhold med vandmættet moræneler fra terræn og ned til grundvandspejlet, forventes der generelt at være anaerobe forhold i den betragtede zone. Der er dog et potentiale for en anaerob nedbrydning af oliestoffer – herunder benzen. Der findes i litteraturen meget lille information om den faktiske nedbrydning under vertikal transport i ler, og der må derfor tages udgangspunkt i nedbrydningsrater bestemt for egentlige grundvandsmagasiner med en dominerende horisontal transport.

## Risikovurdering

I det følgende gennemgås en risikovurdering udført med henblik på at vurdere benzenforureningens påvirkning af det underliggende grundvandsmagasin. Grundvandskriteriet, der skal overholdes i grundvandsmagasinet, er  $1 \mu\text{g}/\text{l}$ . Der udføres alene risikovurdering på enkeltkomponenten benzen, idet benzen vurderes at være det mest kritiske stof i forhold til grundvandsressourcen.

I første fase antages konservativt, at porevandet spredes ned gennem moræneleret og at der ikke sker nogen nedbrydning. Herefter regnes der med en simpel opblanding i de øverste  $0,25 \text{ m}$  af grundvandsmagasinet.

I anden fase beregnes den resulterende forureningskoncentration i grundvandet under hensyntagen til 1.ordens anaerob nedbrydning og opblanding i de øverste  $0,25 \text{ m}$  af grundvandsmagasinet.

## Beregningsmetode

Beregningen af den 1-dimensionale vertikale forureningsspredning, under hensyntagen til de relevante processer nævnt ovenfor, kan udføres i JAGG2 ved hjælp af ligning 24 og 25. Med de opstillede udtryk kan både den transiente og stationære koncentrationsfordeling beregnes. Med de opstillede udtryk beregnes koncentration  $C_u$  lige over grundvandsspejlet samt fluxen ( $F$ ) til grundvandet, inden opblandingen i de øverste  $0,25 \text{ m}$  af magasinet. Koncentrationen  $C_1$  efter opblandingen i de øverste  $0,25 \text{ m}$  af magasinet beregnes i JAGG2 som angivet i ligning 30, svarende Appendix 5.6 – ligning 6 i Miljøstyrelsens (1998b), og giver typisk anledning til en yderligere fortynding på op til 10 gange.

### Fase 1

#### Kildestyrke

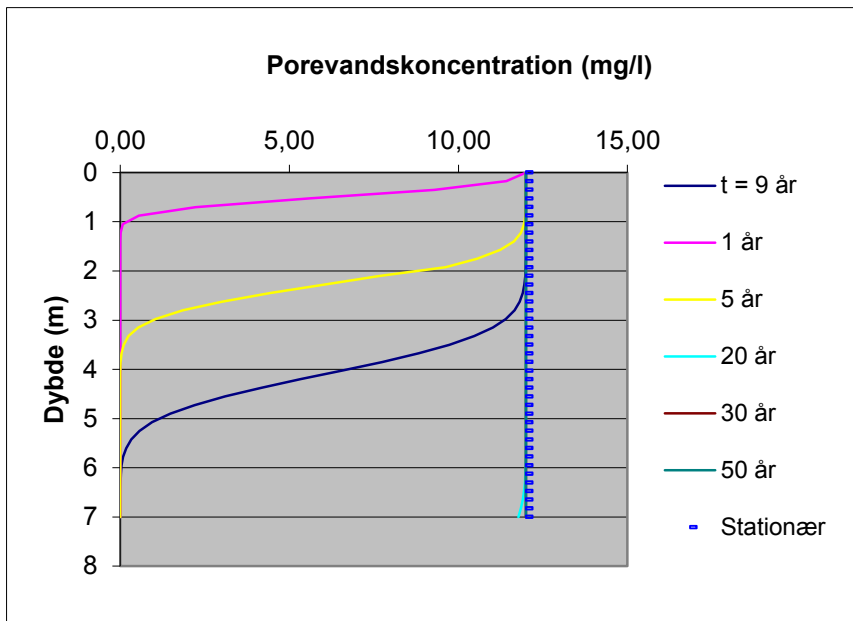
I beregningen antages konservativt, at porevandet i bunden ( $3 \text{ m u.t.}$ ) af det forurenede område har en koncentration af benzen, som er lig med kildestyrken,  $C_0$ .

#### Øvrige parametre

Beregningsformlerne medtager dispersion i vandfasen. I JAGG2 kan anvendes en defaultværdi for dispersion (jf. figur 2 i Appendix 5.8 i Miljøstyrelsen (1998b)) svarende til en den aktuelle transportlængde på  $7 \text{ m}$ . JAGG2 har desuden standardværdier for de fysisk/kemiske data for benzen såvel som jordegenskaber, men brugeren kan vælge at anvende deres egne litteraturværdier, som dog skal dokumenteres. Blandt andet angives i JAGG2, at diffusionskoefficienten for benzen i luft er  $D_L = 9,3 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ , Henrys konstant,  $K_H = 0,223$  (dimensionsløs) og  $K_{oc} = 23,7$ , baseret på en  $\log K_{ow}$  på  $2,13$ . Diffusionskoefficienten i vand,  $D_w$ , er beregnet efter definitionen i ligning 24 og bliver herefter  $D_w = D_L * 10^{-5} = 9,3 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s} * 10^{-5} = 9,3 * 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ . Morænelerets relative vægtandel af organisk stof,  $f_{oc}$ , er  $0,001$  ( $0,1\%$ ), og volumenvægten af ler,  $\rho$ , er  $1,62$  ( $\text{kg}/\text{l}$ ).

#### Resulterende vertikal 1D forureningsspredning som funktion af dybde og tid

Med de givne parametre og uden medtagelse af nedbrydning, er den beregnede porevandskoncentration som funktion af dybden under kildeområdet vist på figur 2. Beregningerne viser en relativt skarp koncentrationsfront, der bevæger sig ned i gennem profilet med en porevands-hastighed på ca.  $0,5 \text{ m}/\text{år}$ . Sorptionen betyder en svag retardation,  $R$ , på  $1,1$  for benzen, og gennembruddet til det underliggende magasin kan skønnes ved hjælp af de transiente beregninger til ske efter ca.  $9 - 10$  år. Stationære forhold opnås efter mindre end  $25$  år, jf. figur 2.



**FIGUR 2:**  
VERTIKALT KONCENTRATIONSPROFIL FOR BENZEN ( $C_0 = 12 \text{ MG/L}$ ) I POREVANDET BEREGNET TIL FORSKELLIGE TIDSPUNKTER OG DYBDER INDTIL STATIONÆRE FORHOLD ER OPNÅET. UDEN NEDBRYDNING.

### Koncentrationen og flux umiddelbart over grundvandsspejlet

Den beregnede koncentration af benzen i porevandet,  $C_u$ , umiddelbart over grundvandsspejlet bliver under stationære forhold identisk med kildestyrkekonzentrationen på  $C_0=12 \text{ mg/l}$ . Den beregnede flux til grundvandet bliver ca.  $60 \text{ g/år}$  – svarende til udvaskningen fra kildeområdet.

### Koncentrationen $C_1$ efter opblanding i de øverste 0,25 m af magasinet

Den resulterende teoretiske koncentration,  $C_1$ , i toppen af grundvandsmagasinet vil således også klart overskride grundvandskriteriet, idet den yderligere opblanding kun medfører en fortynding på maksimalt 10 gange. Der vil således i løbet af en kortere årrække forventes målbare indhold af benzen i grundvandet, og grundvandskriteriet kan derfor ikke overholdes.

## Fase 2

### Anaerob nedbrydning af benzen og valg af 1.ordens rate

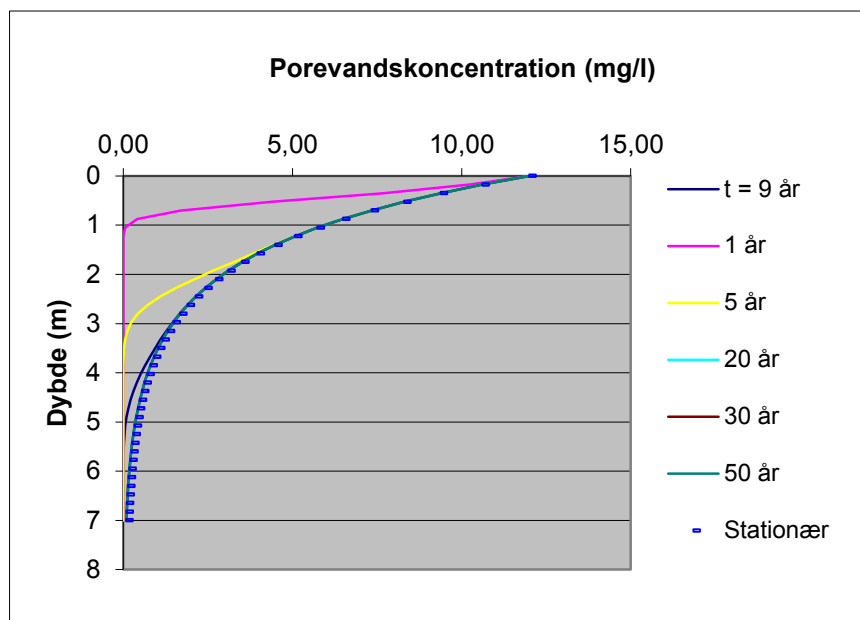
Da det er vurderet, at der potentielt kan ske en anaerob omsætning af benzen under de givne forhold, gennemføres derfor beregninger med en 1.ordens nedbrydningsrate. I JAGG2 er der ikke angivet defaultværdier for nedbrydning under vertikal transport og brugeren skal definere og begrunde valg af 1. ordens aerobic nedbrydningsrater. I dette eksempel anvendes en værdi for  $\lambda$  på  $0,001 \text{ (d}^{-1}\text{)}$ , svarende til JAGG2 defaultværdien for anaerob nedbrydning i grundvand for benzen.

### Effekten af biologisk nedbrydning på det vertikale koncentrationsprofil

Med uændrede parametre fra fase 1, bortset fra en 1.ordens nedbrydningsrate på  $\lambda = 0,001 \text{ (d}^{-1}\text{)}$ , er den beregnede porevandskoncentration som funktion af dybden vist på figur 3. Efter ca. 9 år er de beregnede transiente koncentrationsprofiler ikke til at skelne fra det beregnede stationære profil. Dette indikerer således, at der relativt hurtigt opstår stationære forhold og en ligevægt mellem den stofmængde, der tilføres og kontinuert nedbrydes. De beregnede profiler viser også, at koncentrationen under kilden aftager markant over de øverste 2-3 m af profilet, og lige over grundvandsspejlet i 7 m's dybde er koncentrationen af benzen under stationære forhold reduceret til ca.  $C_u=88 \text{ µg/l}$ . Den beregnede flux til grundvandet bliver ca.  $0,4 \text{ g/år}$  – svarende til en reduktion på ca. 150 gange.

### Koncentrationen $C_1$ efter opblanding i de øverste 0,25 m af magasinet

Den resulterende teoretiske koncentration,  $C_1$ , i toppen af grundvands-magasinet, vil således også i dette tilfælde klart overskride grundvandskriteriet, idet den yderligere opblanding kun medfører en fortynding på maksimalt 10 gange. Der vil således i løbet af en kortere årrække forventes målbare indhold af benzen i grundvandet, og grundvandskriteriet kan derfor ikke overholdes. Til trods for en absolut reduktion i fluxen til grundvandet på over 99 %, kan grundvandskriteriet alligevel ikke forventes overholdt.



**FIGUR 3:**  
VERTIKALT KONCENTRATIONSPROFIL FOR BENZEN ( $C_0 = 12$  MG/L) I POREVANDET BEREGNET TIL FORSKELLIGE TIDSPUNKTER OG DYBDER INDTIL STATIONÆRE FORHOLD ER OPNÅET. DER ER ANVENDT EN 1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE PÅ  $\lambda = 0,001$  ( $D^{-1}$ ).

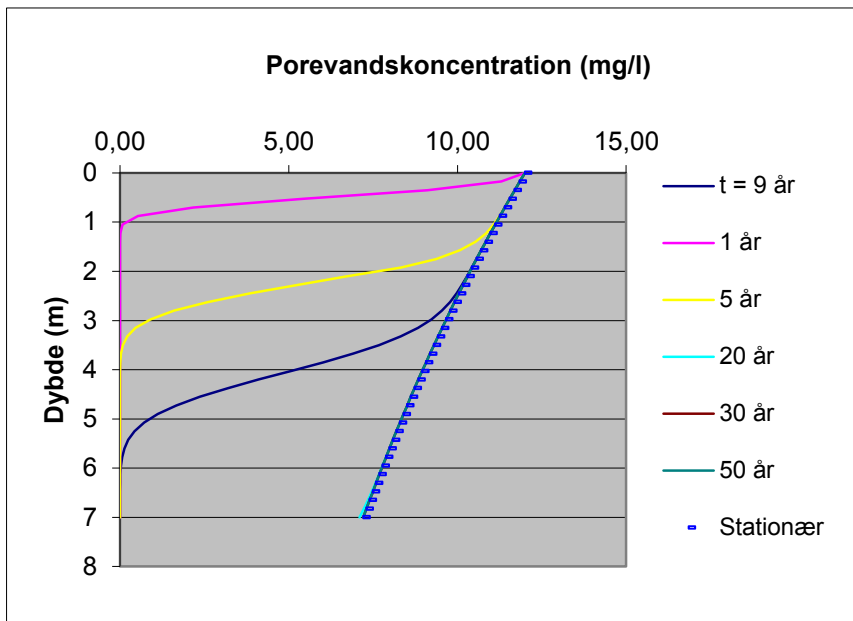
### Følsomhedsberegninger til vurdering af 1.ordens ratens betydning for risikovurderingen

Reduceres 1. ordens nedbrydningsraten med en faktor 10 til  $\lambda = 0,0001$  ( $d^{-1}$ ), er den beregnede porevandskoncentration som funktion af dybden vist på figur 4. Efter ca. 15-20 år opnås et koncentrationsprofil, der ikke er at skelne fra det beregnede stationære profil. Til forskel fra før, aftager koncentrationen under kilden relativt jævnt ned igennem profilet, og lige over grundvands-spejlet, i 7 m's dybde, er koncentrationen af benzen under stationære forhold reduceret til ca. 7 mg/l. Den meget lave nedbrydningsrate resulterer således kun i en reduktion af kildestyrkekoncentrationen på ca. 58 %. Den beregnede flux til grundvandet bliver ca. 36 g/år – svarende til en reduktion på ca. 40 % i forhold til uden nedbrydning. Den resulterende teoretiske koncentration,  $C_1$ , i toppen af grundvands-magasinet, vil således også i denne situation klart overskride grundvandskriteriet, idet den yderligere opblanding kun medfører en fortynding på maksimalt 10 gange.

### Samlet vurdering

Risikovurderingens fase 1 og fase 2 resulterer i de beregnede forureningskoncentrationer,  $C_1$ , der ligger over grundvandskvalitetskriteriet. Der bør derfor enten gennemføres afværgeforanstaltninger eller indsamles yderligere data, hvorefter der kan udføres en fornyet risikovurdering. I den konkrete situation kunne man eventuelt indsamle specifikke data for kildestyrkekoncentrationen,  $C_0$ , lige i undersiden af forureningen, idet der kan være en meget stor forskel mellem teoretisk beregnede værdier og hvad der måles i felten.





**FIGUR 4:**  
 VERTIKALT KONCENTRATIONSPROFIL FOR BENZEN ( $C_0 = 12 \text{ MG/L}$ ) I POREVANDET BEREGNET TIL FORSKELLIGE TIDSPUNKTER OG DYBDER INDTIL STATIONÆRE FORHOLD ER OPNÅET. DER ER ANVENDT EN 1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE PÅ  $\lambda = 0,0001 \text{ (D}^{-1}\text{)}$ .

### Monitering

Såfremt en risikovurdering ønskes baseret på, at der sker nedbrydning under anaerobe forhold under porevandets vertikale transport igennem moræneleret, vil det være nødvendigt at gennemføre en monitering af forholdene. En sådan monitering vil sandsynligvis omfatte prøvetagning fra en række filtre placeret ned igennem profilet. I praksis vurderes det at være meget vanskeligt at gennemføre en sådan monitering, idet den naturlige geologiske og geokemiske heterogenitet medfører store naturlige variationer i båd tid og sted. Endvidere kan det være vanskeligt at udtage vandprøver i moræneler på grund af den lave hydrauliske ledningsevne. Hvis den reelle nedbrydningsrate er meget lille, vurderes det derfor meget vanskeligt at dokumentere, at nedbrydning reelt forekommer. I det konkrete tilfælde vil en 1.ordens nedbrydningsrate på  $\lambda = 0,002 \text{ (d}^{-1}\text{)}$  netop medføre en koncentration af benzen lige over grundvandsspejlet på ca.  $1 \mu\text{g/l}$ .

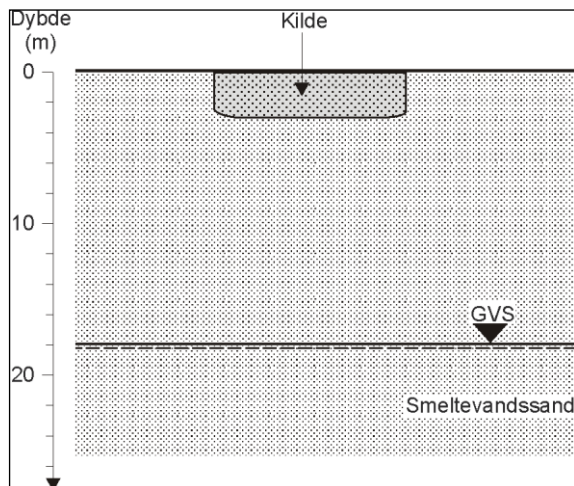
## Eksempel 2

### Sandmagasin uden dæklag

### Forurening med fyringsolie nær terræn

#### Geologi

Under et tyndt mulddække findes smeltevandssand til mindst ca. 35 m u.t. Et simplificeret geologisk profil gennem området er vist på figur 5.



FIGUR 5  
GEOLOGISK PROFIL.

#### Hydrogeologi

Sandlaget udgør det primære magasin, som er frit med et vandspejl beliggende ca. 18 m u.t. I beskrivelsen af jordprøver fra boringer i området er sandet beskrevet som tørt eller svagt fugtigt, fint og velsorteret. Standardværdier i JAGG2 for jordegenskaber foreslår en totalporøsitet for sand på  $V_t=0,45$  og den relative volumenandel af vand i jorden ved markkapacitet til  $V_v=0,15$ . Nettonedbøren,  $N$ , skønnes at være ca. 200 mm/år.

#### Forurening

Fra et utæt produktør ca. 0,5 m u.t. er der over en ukendt tidsperiode sivet fri fase fyringsolie ud i jorden. Produktørret har forbundet en udendørs overjordisk tank og et oliefyr i et enfamiliehus. En mindre del af olien er nu beliggende under huset, mens den resterende del findes tæt op ad fundamentet og ud til et par meter fra fundamentet. Forureningen dækker et areal  $A$  på ca.  $5 \times 5$  m, og forureningen findes fra 0,5 m u.t. og ned til ca. 3 m u.t. Den gennemsnitlige koncentration af fyringsolie i jorden er skønnet til ca. 3.000 mg/kg TS, og det vurderes derfor, at det totale olieindhold i jorden er ca.  $5 \times 5 \times 2,5 \text{ m} \times 1700 \text{ kg/m}^3 \times 3.000 \text{ mg/kg TS} = 318 \text{ kg}$ . Udbredelsen af det forurenede område fremgår af figur 5.

#### Massebalance

En simpel vurdering af udvaskningshastigheden kan fås ved at opstille en massebalance.

Forureningen med fyringsolie indeholder maks. ca. 0,01 % benzen, svarende til en benzenmasse i jord på ca. 0,03 kg. Den effektive vandopløselighed af benzen i ligevægt med fyringsolie i jord kan i JAGG2 skønnes til ca. 0,4 mg/l. Fluxen er bestemt ved  $J=A \times N \times C_o = 25 \text{ m}^2 \times 0,2 \text{ m/år} \times 0,4 \text{ mg/l} = 2 \text{ g/år}$ . Med denne flux går der godt 15 år, inden benzen er helt udvasket fra forureningen.

### **Spredningsveje og transportprocesser**

De relevante processer for vurderingen af risikoen i forhold til grundvandet er opløsning og transport af oliestoffer med det infiltrerende porevand. Under transporten igennem den umættede zone vil både sorption til jordens organiske fase, udveksling mellem porevand og poreluft, dispersion i vandfasen og diffusion i gasfasen samt nedbrydning i porevandsfasen være de væsentlige processer.

### **Forudsætninger for biologisk nedbrydning**

På grund af de geologiske forhold med sand fra terræn og ned til grundvandsspejlet, forventes der potentielt aerobe forhold i den umættede zone, og derfor potentiale for en aerob nedbrydning af oliestoffer – herunder benzen.

### **Risikovurdering**

I det følgende gennemgås en risikovurdering udført med henblik på at vurdere benzen-forureningens påvirkning af det underliggende grundvandsmagasin. Det kritiske stof i forhold til grundvandet vurderes at være benzen, idet grundvandskriteriet er lavt og stoffet er relativt vandopløseligt og kun langsomt udvaskes fra kilden. Der udføres derfor alene en risikovurdering over for denne enkeltkomponent. Grundvandskriteriet for benzen, der skal overholdes i grundvandsmagasinet, er 1 µg/l.

I første fase antages konservativt, at porevandet spredes ned gennem den umættede zone og at der ikke sker nogen nedbrydning. Herefter beregnes den resulterende forureningskoncentration,  $C_1$ , i grundvandet, idet der regnes med en simpel opblanding i de øverste 0,25 m af grundvandsmagasinet.

I anden fase beregnes den resulterende forureningskoncentration,  $C_1$ , i grundvandet under hensyntagen til 1. ordens aerob nedbrydning og opblanding i de øverste 0,25 m af grundvandsmagasinet.

I tredje fase gennemføres der en dokumentation af forudsætningerne for at inkludere nedbrydning i risikovurderingen, og den aktuelle nedbrydningsrate beregnes ud fra lokalitetsspecifikke målinger. Der beskrives, hvordan monitoring over tid kan udføres med et konkret monitoringsprogram.

### **Beregningsmetode**

Beregningen af den 1-dimensionale vertikale forureningsspredning, under hensyntagen til de relevante processer nævnt ovenfor, kan udføres ved hjælp ligning 24 og 24. Med de opstillede udtryk kan både den transiente og stationære koncentrationsfordeling beregnes. Med de opstillede udtryk beregnes koncentration  $C_u$  lige over grundvandsspejlet samt fluxen ( $F$ ) til grundvandet, inden opblandingen i de øverste 0,25 m af magasinet. Koncentrationen,  $C_1$ , efter opblanding i de øverste 0,25 m af magasinet, kan beregnes som angivet i ligning 30, svarende til Appendix 5.6 – ligning 6 i Miljøstyrelsen (1998b), og giver typisk anledning til en yderligere fortynding på op til 10 gange.

#### **Fase 1**

##### **Kildestyrke**

I beregningen antages konservativt, at porevandet i bunden (3 m u.t.) af det forurenede område har en koncentration af benzen, som er lig med kildestyrken,  $C_0$ , på 0,4 mg/l. Fra denne dybde og til grundvandsspejlet (18 m u.t.) beregnes herefter transporten gennem den umættede zone – dvs. transport igennem en 15 m tyk umættet zone.

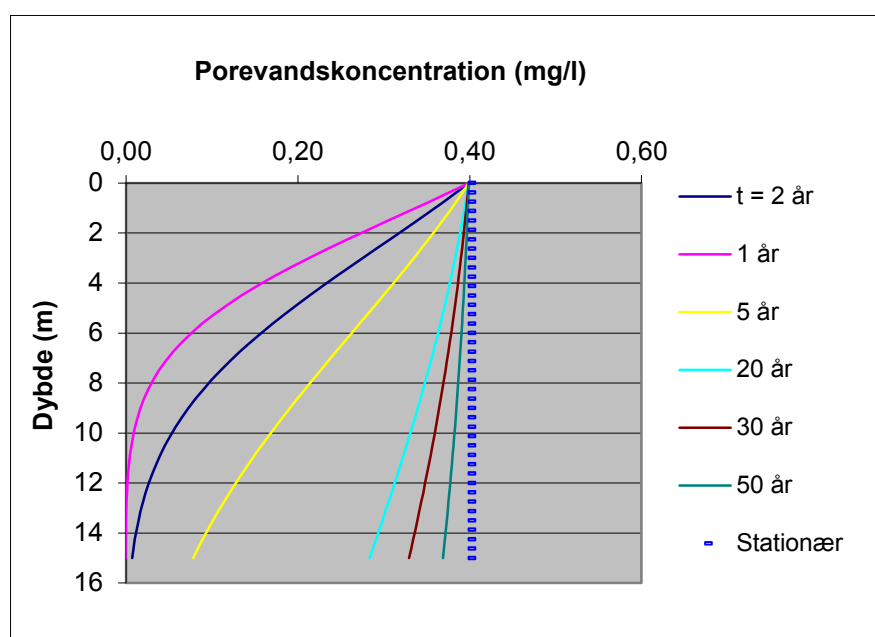
##### **Øvrige parametre**

Beregningsformlerne medtager dispersion i vandfasen. I JAGG2 kan anvendes en defaultværdi for dispersion (jf. figur 2 i Appendix 5.8 i Miljøstyrelsen (1998b), svarende til den aktuelle transport-

længde på 15 m. JAGG2 har desuden standardværdier for de fysisk/kemiske data for benzen såvel som jordegenskaber, men brugeren kan vælge at anvende deres egne litteraturværdier, som dog skal dokumenteres. Blandt andet angives i JAGG2, at diffusionskoefficienten for benzen i luft er  $D_L=9,3 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ , Henrys konstant,  $K_H=0,223$  (dimensionsløs) og  $K_{oc}=23,7$ , baseret på en  $\log K_{ow}$  på 2,13. Diffusionskoefficienten i vand,  $D_w$ , er beregnet efter definition i ligning 24 og bliver herefter  $D_w=D_L \cdot 10^{-5} = 9,3 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s} \cdot 10^{-5} = 9,3 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ . Sandjordens relative vægtandel af organisk stof,  $f_{oc}$ , er 0,001 (0,1%), og volumenvægten af sand,  $\rho$ , er 1,46 (kg/l).

### Resulterende vertikal 1D forureningsspredning uden nedbrydning

Med de givne parametre og uden medtagelse af nedbrydning, er den beregnede porevandskoncentration som funktion af tiden og dybden under kildeområdet vist på figur 2. Beregningerne viser en relativt hurtig vertikal spredning og gennembrud efter knap 2 år, der skyldes, at diffusionen i gasfasen er den dominerende proces i de første ca. 5-10 år. Den vertikale advective porevandshastighed er kun ca. 1,33 m/år, mens den diffusive spredning i denne periode således er ca. 10 gange hurtigere. Stationære forhold opnås først efter ca. 50 - 100 år.



FIGUR 6: VERTIKALT KONCENTRATIONSPROFIL FOR BENZEN ( $C_0 = 0,4 \text{ MG/L}$ ) I POREVANDET BEREGNET TIL FORSKELLIGE TIDSPUNKTER OG DYBDER INDTIL STATIONÆRE FORHOLD ER OPNÅET. UDEN NEDBRYDNING ( $\lambda = 0$ ).

### Koncentrationen og flux umiddelbart over grundvandsspejlet

Den beregnede koncentration af benzen i porevandet,  $C_u$ , umiddelbart over grundvandsspejlet bliver under stationære forhold identisk med kildestyrke-koncentrationen på  $C_0=0,4 \text{ mg/l}$ . Den beregnede flux til grundvandet bliver 2 g/år – svarende til udvaskningen fra kildeområdet.

### Koncentrationen $C_1$ efter opblanding i de øverste 0,25 m af magasinet

Den resulterende teoretiske koncentration,  $C_1$ , i toppen af grundvandsmagasinet vil således også klart overskride grundvandskriteriet, idet den yderligere opblanding kun medfører en fortynding på maksimalt 10 gange. Der vil således i løbet af en årrække forventes målbare indhold af benzen i grundvandet, og grundvandskriteriet kan derfor ikke overholdes. Igangsættes monitoring af grundvandet umiddelbart efter et spill, viser beregninger således, at der skal monitoreres i mange år, førend en evt. påvirkning kan måles.

## Fase 2

### Forudsætninger

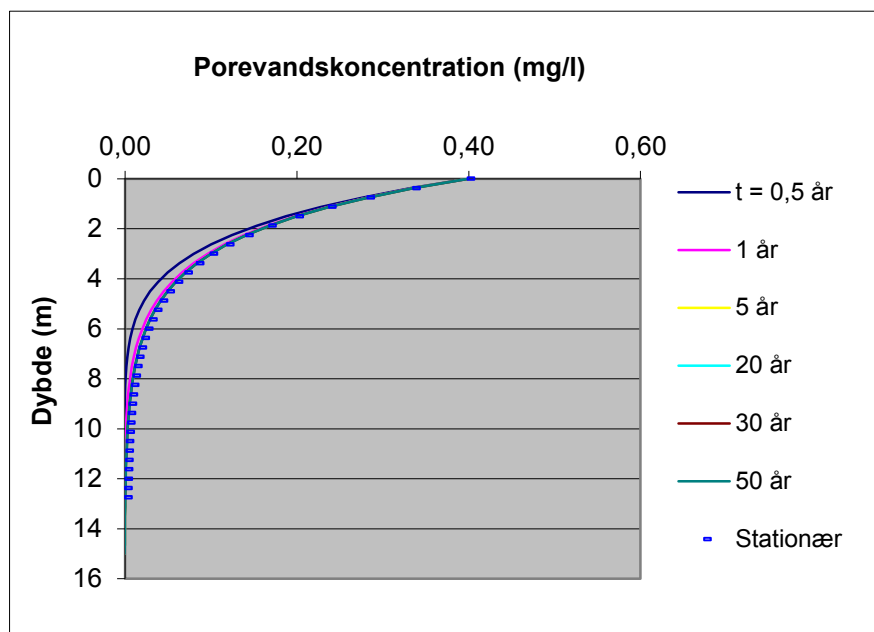
Da det under fase 1 af risikovurderingen blev vurderet, at der potentielt kunne foregå en aerob omsætning af benzen, er der udført en række supplerende borer til vurdering af den umættede zonen naturlige indhold af ilt og kuldioxid. De udtagne poreluftprøver bekræfter, at der over overalt i den umættede zone – og hvor der ikke findes forurening, findes et iltindhold på over 15 vol.% og under 0,1 vol.% kuldioxid.

### Valg af 1.ordens nedbrydningsrate for Benzen

I forbindelse med beregningen af forureningsspredningen af benzen kan betydningen af 1. ordens biologisk nedbrydning derfor indregnes, idet der under de dokumenterede aerobe forhold kan forventes en vis nedbrydning af benzen. I JAGG2 er der ikke angivet defaultværdier for nedbrydning under vertikal transport og brugeren skal definere og begrunde valg af 1. ordens aerobe nedbrydningsrater. I dette eksempel anvendes en værdi for  $\lambda$  på 0,01 ( $d^{-1}$ ), svarende til JAGG2 defaultværdien for aerob nedbrydning i grundvand for benzen.

### Resulterende vertikal 1D forurenings-spredning med nedbrydning

Med de givne parametre og en 1.ordens nedbrydningsrate på  $\lambda = 0,01$  ( $d^{-1}$ ), er den beregnede porevandskoncentration som funktion af tiden og dybden under kilden vist på figur 3. Efter ca. 1 år er de beregnede transiente koncentrations-profiler ikke til at skelne fra det beregnede stationære profil. Dette indikerer således, at der relativt hurtigt opstår stationære forhold og en ligevægt mellem den stofmængde, der tilføres og kontinuert nedbrydes i den umættede zone. De beregnede profiler viser også, at koncentrationen under kilden aftager markant over de øverste 4-6 m af den umættede zone, og allerede i ca. 8,5 m's dybde i den umættede zone er porevandskoncentrationen af benzen reduceret til ca. 10  $\mu g/l$ .



**FIGUR 7:**  
VERTIKALT KONCENTRATIONSPROFIL FOR BENZEN ( $C_0 = 0,4$  MG/L) I POREVANDET BEREGNET TIL FORSKELLIGE TIDSPUNKTER OG DYBDER INDTIL STATIONÆRE FORHOLD ER OPNÅET. DER ER ANVENDT EN 1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE PÅ  $\lambda = 0,01$  ( $D^{-1}$ ).

### Koncentrationen og flux umiddelbart over grundvands-spejlet

Med en 1.ordens nedbrydningsrate på  $\lambda = 0,01$  ( $d^{-1}$ ) er den beregnede koncentration af benzen i porevandet,  $C_u$ , umiddelbart over grundvandspejlet reduceret til ca. 0,4  $\mu g/l$ . Tilsvarende er den oprindelige flux ud af kildeområdet på ca. 2  $g/\text{år}$  også reduceret til ca. 0,002  $g/\text{år}$ , svarende til en reduktion på ca. 3 størrelsesordener (1.000 gange).

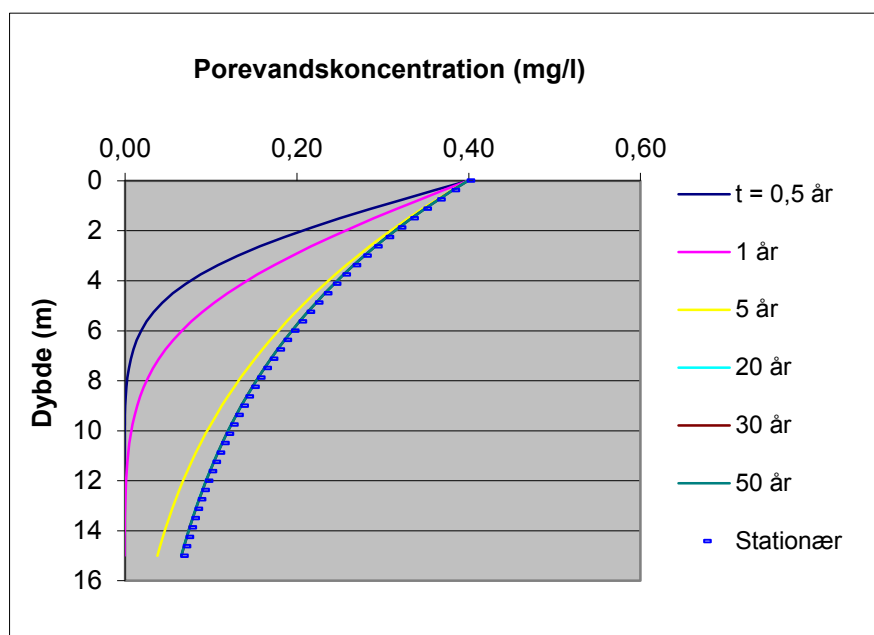
### Koncentrationen $C_1$ efter opblanding i de øverste 0,25 m af magasinet

Den resulterende teoretiske koncentration,  $C_1$ , i toppen af grundvands-magasinet, vil således netop kunne overholde grundvandskriteriet, idet den yderligere opblanding kun medfører en fortynding på maksimalt 10 gange. Der vil således i løbet af en kortere årrække forventes målbare indhold af benzen i grundvandet, men grundvandskriteriet forventes dog at kunne overholdes.

### Følsomhedsvurdering for den anvendte nedbrydningsrate

For at illustrere betydningen af den valgte 1. ordens nedbrydningsrate er der på figur 8 vist resultatet af en beregning med  $\lambda = 0,001$  ( $d^{-1}$ ), svarende til en værdi, der er 10 gange lavere end den anvendte på figur 7. Denne meget lave værdi kunne tænkes at opstå lokalt i den umættede zone, såfremt der opstod anaerobe forhold. Den tidlige udvikling af koncentrationsprofilen viser, at der allerede efter ca. 5 år vil være en næsten stationær situation i den umættede zone. De beregnede profiler viser også, at koncentrationen under kilden aftager mere jævnt over dybden, når nedbrydningsraten reduceres.

Den beregnede koncentration af benzen i porevandet,  $C_u$ , umiddelbart over grundvandspejlet, er nu reduceret til 66  $\mu\text{g/l}$ . Tilsvarende er den oprindelige flux ud af kildeområdet på ca. 2,0  $\text{g/år}$  reduceret til 0,33  $\text{g/år}$ , svarende til en reduktion på ca. 6 gange. Anvendes en 1. ordens nedbrydningsrate på  $\lambda = 0,1$  ( $d^{-1}$ ), fås en koncentration,  $C_1$ , i porevandet på mindre end  $4 \times 10^{-8}$   $\mu\text{g/l}$  og en flux til grundvandet på mindre end  $1 \times 10^{-9}$   $\text{g/år}$  - dvs. tilnærmelsesvis ingen målbare påvirkning af grundvandet.



**FIGUR 8:**  
VERTIKALT KONCENTRATIONSPROFIL FOR BENZEN ( $C_0 = 0,4$   $\text{MG/L}$ ) I POREVANDET BEREGNET TIL FORSKELLIGE TIDSPUNKTER OG DYBDER INDTIL STATIONÆRE FORHOLD ER OPNÅET. DER ER ANVENDT EN 1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATE PÅ  $\lambda = 0,001$  ( $D^{-1}$ ).

### Følsomhedsvurdering generelt

Den anvendte 1.ordens nedbrydningsrate er samlet set den absolut mest følsomme parameter ved beregningen af den resulterende porevandskoncentration i den umættede zone. Dette skyldes, at den har et realistisk variationsinterval på flere størrelsesordener, hvorimod en række af de øvrige parametre i en given situation højst varierer inden for en faktor 10 eller mindre.

### **Konklusion på beregninger**

På baggrund af de gennemførte beregninger med den konservativt lave 1. ordens nedbrydningsrate  $\lambda = 0,01 \text{ (d}^{-1}\text{)}$ , kan det ikke afvises, at der på sigt kan optræde et målbart indhold af benzen ( $0,4 \text{ } \mu\text{g/l}$ ) i porevandet umiddelbart over grundvandsspejlet. Med typiske værdier af hydraulisk ledningsevne og gradient for danske grundvandsmagasiner, vil der forventes en yderligere opblanding på ca. 5-10 gange. Dermed vil den beregnede værdi for  $C_1$  kunne overholde grundvandskriteriet på  $1 \text{ } \mu\text{g/l}$ .

Anvendes en øvre værdi  $\lambda = 0,1 \text{ (d}^{-1}\text{)}$  for 1.ordens nedbrydningsrate for aerob nedbrydning resulterer det i et indhold af benzen i grundvandet mange størrelsesordner mindre end hvad der er målbart i vandprøver – og således også langt under grundvandskriteriet. De konservative beregninger indikerer derfor, at det er sandsynligt, at der på sigt vil optræde et målbart indhold af benzen i grundvandet ( $< 0,02 - 0,08 \text{ } \mu\text{g/l}$ ), men at det må forventes, at grundvandskriteriet kan overholdes.

### **Fase 3**

#### **Monitering**

Selvom de gennemførte konservative beregninger af risikovurderingen i fase 2 indikerer, at grundvandskriteriet er overholdt, er det nødvendigt at gennemføre en yderligere dokumentation og monitering af forholdene. Herigennem skal det dokumenteres, at den aktuelle nedbrydning forløber som forudsat, og at den også i fremtiden vil kunne forventes at være stabil. I forbindelse hermed bør den aktuelle 1.ordens aerobe nedbrydningsrate bestemmes.

#### **Supplerende undersøgelse**

I forbindelse med fase 3 gennemføres derfor supplerende undersøgelser. Der udføres en række boringer både indenfor og udenfor det område, hvor der er påvist olie i de analyserede jordprøver.

Selve jordforureningen er ved de supplerende undersøgelser fundet ned til ca. 3-3,5 m u.t.

Boringerne er filtersat i forskellige dybder i den umættede zone, og enkelte er filtersat i den øverste meter af grundvandsmagasinet. Der er ikke påvist kulbrinter i grundvandet under forureningen. Fra filtrene i den umættede zone er der udtaget prøver af poreluften til analyse for totalkulbrinter, BTEX, ilt, kuldioxid og metan. Fra filtrene i den mættede zone er der analyseret for totalkulbrinter og BTEX samt redoxforhold.

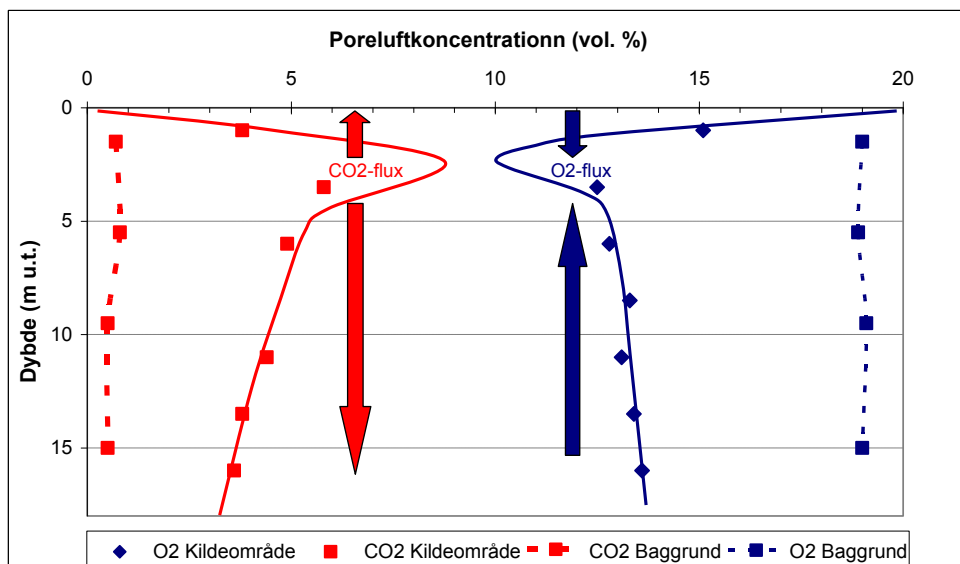
#### **Poreluftens hovedbestanddele**

Poreluftens hovedbestanddele udgøres af ilt og kuldioxid, og der er ikke påvist metan, jf. figur 9. Det naturlige baggrundsniveau for iltindholdet i poreluften er ca. 19 vol.%, hvilket er meget tæt på atmosfærens indhold af ilt på ca. 20,3 vol.%. Tilsvarende er baggrundsniveauet for kuldioxid ca. 0,6 vol. %, og således lidt højere end atmosfærens indhold på ca. 0,01 vol.%. Det målte indhold af kuldioxid i den umættede zone vurderes at skyldes naturlige biologiske processer i jorden.

Målingerne bekræfter således, at der naturligt findes aerobe forhold i den umættede zone fra terræn og ned til grundvandet.

#### **Vertikal variation af ilt som følge af nedbrydning**

Indholdet af ilt er i hele profilet tydeligt reduceret med mellem 5 og 10 vol.% i forhold til det naturlige niveau i den omgivende jord, og den mest markante reduktion ses i ca. 2-3 meters dybde, hvor der lokalt er meget høje koncentrationer af olie i de udtagne jordprøver ( $5-15.000 \text{ mg/kg-TS}$ ). Der sker således et forbrug af ilt i det forurenede jordvolumen, og ved diffusion i gasfasen sker der en transport af ilt til den forurenede jord. Denne diffusive transport af ilt sker både nedad fra terræn (atmosfæren) og opad fra den dybere del af den umættede zone – samt horisontalt ind fra siderne.



**FIGUR 9:**  
VERTIKALE KONCENTRATIONSPROFILER FOR ILT OG KULDIOXID I KILDEOMRÅDET OG UDENFOR KILDEOMRÅDET (NATURLIGT BAGGRUNDSNIVEAU).

### Vertikal variation af kuldioxid som følge af nedbrydning

Indholdet af kuldioxid er i hele profilet tydeligt forøget med mellem 4 og 8 vol. % i forhold til det naturlige niveau i den omgivende jord, og den mest markante forøgelse ses i ca. 2-3 meters dybde, hvor den biologiske omsætning er kraftig på grund af de høje jordkoncentrationer. I dette dybde-interval dannes der således så meget kuldioxid, at der opstår en vertikal koncentrationsgradient både mod terræn og mod den dybere del af den umættede zone. Der sker således også en tydelig transport af kuldioxid i gasfasen, men i modsat retning af ilten på grund af aerob omsætning af kulbrinter.

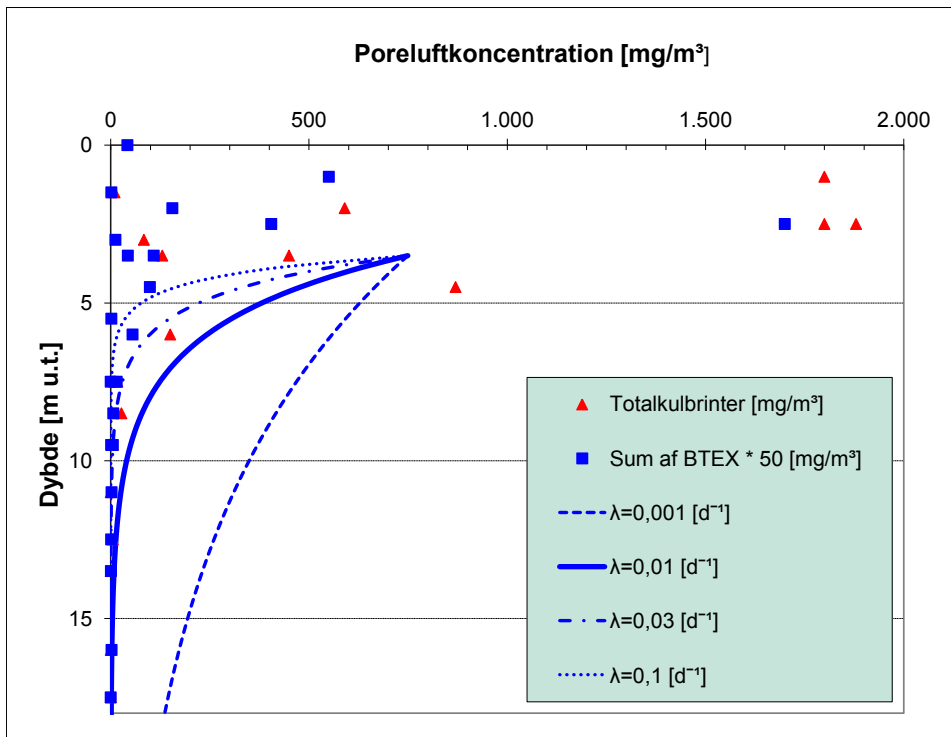
### Poreluftens indhold af benzen

Ved en simpel fugacitetsberegning for benzen, kan det beregnes, at poreluftkoncentrationen skal være over 0,22 mg/m<sup>3</sup> for at resultere i en porevandskoncentration på 1 µg/l – dvs. svarende til grundvandskriteriet. I de udtagne poreluftprøver er der kun påvist en enkelt prøve med et indhold af benzen på 0,23 mg/m<sup>3</sup>, mens hovedparten viser et indhold, der er mellem 10-100 gange lavere. Med de målte poreluftkoncentrationer af benzen i den dybere del af den umættede zone på <0,001 mg/m<sup>3</sup>, er der således ikke nogen indikation på, at benzen skulle udgøre en risiko for grundvandet.

### Poreluftens totale indhold af BTEX og totalkulbrinter

De målte koncentrationer af både BTEX og totalkulbrinter i poreluften er vist på figur 10. (Bemærk at BTEX er vist som 50 gange den reelle værdi for at kunne optegnes på samme skala som totalkulbrinter). Der er målt et samlet indhold af BTEX på op til 35 mg/m<sup>3</sup>, heraf 0,23 mg benzen/m<sup>3</sup> og med xylener som den mest dominerende enkeltkomponent. Under ca. 7 m u.t. er der ikke påvist indhold af BTEX. Det totale indhold af kulbrinter i det kraftigst forurenede dybdeinterval er ca. 1800 mg/m<sup>3</sup>, og heraf udgør BTEX således kun ca. 2 %, mens summen af C<sub>9</sub>- og C<sub>10</sub>-aromater udgør under 1 %. Den præcise sammensætning af de resterende ca. 97 % af kulbrinterne kendes således ikke. En del af disse kulbrinter vurderes ud fra den forventede sammensætning af fyringsolie, at være relativt flygtige og biologisk let nedbrydelige alifatiske kulbrinter med en lav vandopløselighed. Der påvises op til 25 mg/m<sup>3</sup> totalkulbrinter i ca. 8 m's dybde, mens der under 10 m u.t. ikke påvises totalkulbrinter.





FIGUR 10:  
VERTIKALE KONCENTRATIONSPROFILER FOR TOTALKULBRINTER OG SUMMEN AF BTEX I KILDEOMRÅDET. MED KURVER ER VIST BEREGNEDE PROFILER AF BTEX MED FORSKELLIGE 1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATER.

#### Data til beregning af 1.ordens nedbrydningsrate for BTEX

De målte koncentrationer af benzen alene er for lave til at de giver anledning til yderligere beregninger, og det vælges i stedet at regne videre på summen af BTEX-forbindelserne, der som gruppe udgør de mest vandopløselige stoffer og dermed er potentielt udvaskelige til grundvandet. For at kunne beregne en tilsyneladende 1. ordens nedbrydningsrate for BTEX som en samlet gruppe, antages en gennemsnitlig kildestyrkekoncentration i poreluften på 30 mg BTEX/m<sup>3</sup>. Konservativt tildeles gruppen samme egenskaber som m-xylen og ved fasefordelings fås en kildekonzentration i porevandet på 0,100 mg/l.

#### Beregningsmetode

Da målingerne er foretaget en del år efter spildet, antages det, at de målte profiler er stabile og en stationær situation er indtrådt. Det vælges derfor at anvende den stationære 1D-løsning, dvs. ligning 25. Den relative volumenandel af vand i sandjord i den umættede zone (sand) fra ca. 4-18 m u.t. varierer mellem 0,1 og 0,2, og der regnes med et gennemsnit på 0,15. Nettonedbøren vurderes at være 200 mm/år – dvs. også uændret i forhold til den indledende beregning.

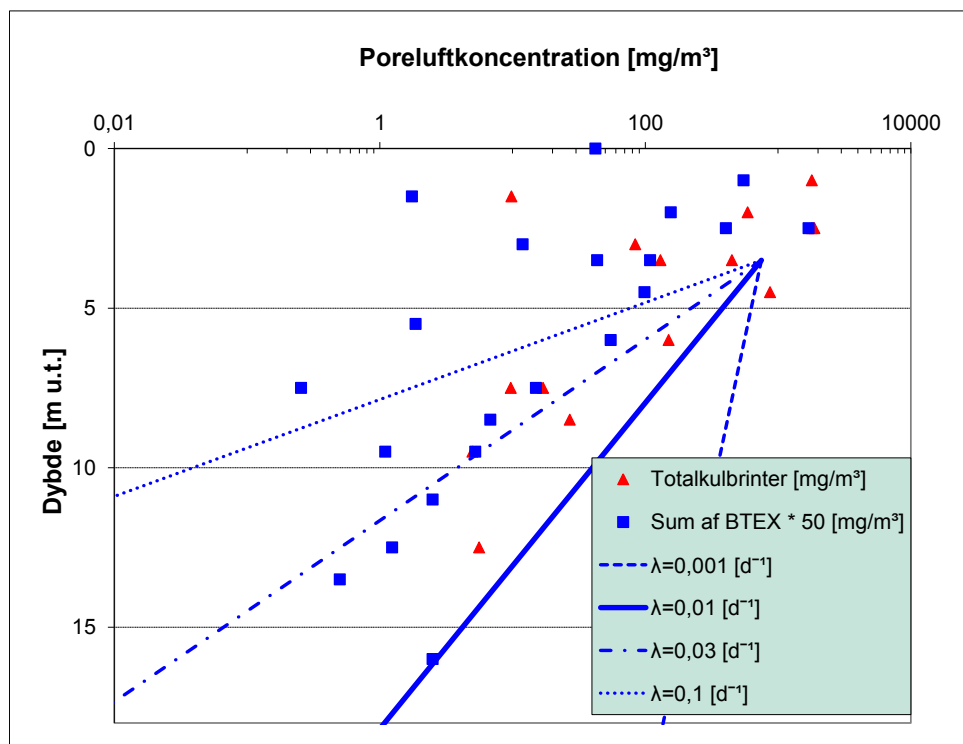
#### Resultat af beregning vurderet ud fra lineær afbildning af data

På figur 10 er sammen med de målte værdier vist de beregnede stationære poreluftkoncentrationsprofiler for summen af BTEX for forskellige 1. ordens nedbrydningsrater,  $\lambda$ , i intervallet 0,001-0,1 (d<sup>-1</sup>). Det kan umiddelbart ses, at raten må være væsentlig større end  $\lambda=0,001$  (d<sup>-1</sup>), svarende til hvad der kunne forventes under anaerobe forhold. Også med en rate på  $\lambda=0,01$  (d<sup>-1</sup>) vil de målte koncentrationer være lavere end de beregnede, men for at kunne vurdere dette nærmere er det nødvendigt at afbilde data logaritmisk, da hovedparten af målingerne er relativt lave i forhold til kildekonzentrationen.

#### Resultat af beregning vurderet ud fra logaritmisk afbildning af data

På figur 11 er de beregnede og målte data afbildet, men med en logaritmisk x-akse. Da der er nogen variation i de målte data, kan der ikke bestemmes en enkelt værdi, der matcher alle datapunkter. En

1. ordens aerob nedbrydningsrate,  $\lambda$ , i intervallet 0,01-0,03 ( $d^{-1}$ ) for summen af BTEX vurderes at beskrive de målte data tilfredsstillende. Det ses endvidere, at der er enkelte værdier, der ligger over linien, svarende til  $\lambda=0,1$  ( $d^{-1}$ ), og dette indikerer, at der lokalt kan være rater, der svarer til den øvre værdi for de forventelige aerobe nedbrydningsrater.



**FIGUR 11:**  
VERTIKALE KONCENTRATIONSPROFILER FOR TOTALKULBRINTER OG SUMMEN AF BTEX I KILDEOMRÅDET. MED KURVER ER VIST BEREGNEDE PROFILER AF BTEX MED FORSKELLIGE 1. ORDENS NEDBRYDNINGSRATER. (LOGARITMISK X-AKSE).

### Konklusion

Det beregnede interval for  $\lambda$  indikerer således en aerob nedbrydningsrate for benzen og BTEX i det forventede konservative interval på 0,1-0,01 ( $d^{-1}$ ). Med den laveste rate på  $\lambda=0,01$  ( $d^{-1}$ ), vil det beregnede indhold af BTEX i poreluften på maks. 1  $mg/m^3$  svare til et indhold af BTEX i porevand på ca. 3  $\mu g/l$  i en dybde på ca. 18 m u.t. – dvs. lige over grundvandet. Med en forventet yderligere fortynding i toppen af magasinet, forventes koncentrationen at blive yderligere reduceret. Det vurderes derfor, at både kriteriet for benzen (1  $\mu g/l$ ) alene og et samlet kriterie for indhold af BTEX på 5 - 9  $\mu g/l$  kan overholdes.

### Forsat monitoring

De gennemførte målinger af ilt og kuldioxid i den umættede zone indikerer, at der sker en aerob nedbrydning af kulbrinter. Målinger af både BTEX og totalkulbrinter igennem den umættede zone viser, at der sker en væsentlig reduktion over dybden. Der er ikke påvist kulbrinter i grundvandet under kildeområdet. Ved hjælp af den opstillede 1D stationære model vurderes denne reduktion i den umættede zone primært at kunne forklares ved nedbrydning. For at sikre, at nedbrydningen også på sigt vil være i stand til at hindre forureningskomponenter i at nå grundvandet, skal monitoringen gentages. Indholdet af ilt, kuldioxid og kulbrinter i poreluften bør måles, ligesom eventuelle filtersatte boringer i toppen af grundvandsmagasinet. Variationen i nettonedbøren i løbet af monitoringsperioden bør også inddrages i vurderingerne, idet den har betydning for udvaskningen og dermed den kildestyrke, der ligger til grund for beregningerne.

### **Moniteringsperiodens varighed for et friskt spild**

Formålet med monitoringen er at sandsynliggøre, at grundvandskvalitets-kriteriet på længere sigt kan overholdes – dvs. efter at monitoringen er indstillet. Moniteres der på et helt friskt spild, vil der, som vist i beregningerne for eksemplet, først efter en årrække indstille sig en stabil situation. Der findes meget få fuldskala-erfaringer med, hvad der sker med en olieforurening i den umættede zone i de første 0-10 år efter et spild. I praksis betyder dette, at monitoringen må fortsættes, indtil der ses tydelige tegn på, at stationære forhold er ved at indfinde sig.

### **Moniteringsperiodens varighed for et ældre spild**

Forurening med specielt olie, som har ligget i jorden 5-10 år eller mere, vil være påvirket af en lang række fysiske og kemiske processer – herunder biologisk nedbrydning. Under aerobe og umættede forhold indikerer de simple beregninger i eksemplet, at der efter 5-10 år kan opstå en vertikal forurenings-fordeling, der begynder at ligne den stationære - der dog først opnås efter 50 år eller mere. Denne situation vil derfor være karakteriseret ved relativt stabile koncentrationer af kulbrinter i den umættede zone.

### **Konkret forslag til varighed af moniteringsperioden**

Da forureningen i eksemplet har ligget i jorden i længere tid, bør der som udgangspunkt monitoreres mindst halvårligt i 3 år – førend der er indsamlet tilstrækkeligt med data til at afgøre, om der er opnået en stabil situation. Først herefter kan yderligere monitoring, såfremt kriterierne i grundvandet samtidig er overholdt, indstilles.

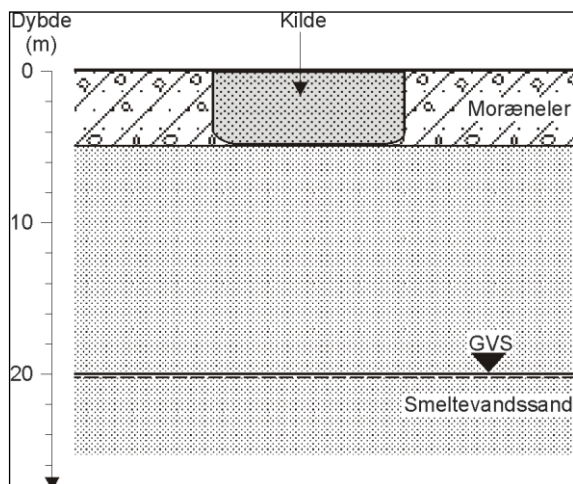
### Eksempel 3

#### Homogent dæklag af moræneler med underliggende umættet lag af sand

#### Forurening med tetrachlorethylen (PCE)

#### Geologi

Under et tyndt mulddække findes moræneler til 5 m u.t. Under moræneleret findes smeltevands-sand til mindst ca. 35 m u.t. Et simplificeret geologisk profil gennem området er vist på figur 12.



FIGUR 12:  
GEOLOGISK PROFIL.

#### Hydrogeologi

Sandlaget udgør det primære magasin i området, og magasinet er frit med et vandspejl beliggende 20 m u.t. Dæklaget af moræneler er næsten 100 % vandmættet. Fra beskrivelsen af jordprøver fra borerer i området er sandet beskrevet som tørt eller svagt fugtigt, fint og velsorteret. Standardværdier i JAGG2 for jordegenskaber foreslår en totalporøsitet for sand på  $V_t=0,45$  og den relative volumenandel af vand i jorden ved markkapacitet til  $V_v=0,15$ . Nettonedbøren,  $N$ , skønnes at være ca. 100 mm/år.

#### Forurening

Driften af et renseri over en længere årrække har medført en jord- og grundvandsforurening med tetrachlorethylen (PCE). Vandprøver fra moræneleret viser koncentrationer af PCE på op til 100 mg/l i en række prøver udtaget indenfor det formodede kildeområde. Enkelte jordprøver indikerer koncentrationer af PCE svarende til tilstedeværelse af fri fase PCE. Kildeområdet skønnes at have en arealmæssig udbredelse på ca. 5x5 m, og den kraftige jordforurening er påvist helt ned til bunden af moræneleret, 5 m u.t. Den gennemsnitlige koncentration af PCE i jorden er ud fra analyser skønnet til ca. 10 mg/kg TS, og det vurderes derfor, at det totale indhold af PCE i jorden er ca.  $5 \times 5 \times 5 \text{ m} \times 1800 \text{ kg/m}^3 \times 10 \text{ mg/kg TS} = 2,25 \text{ kg PCE}$ . Poreluftprøver udtaget fra borerer, filtersat i toppen af det underliggende umættede sand, viser et indhold af PCE på op til 100 mg/m<sup>3</sup>. Udbredelsen af det forurenede område fremgår af figur 12.

#### Massebalance

En simpel vurdering af udvaskningshastigheden kan fås ved at opstille en massebalance. Den effektive vandopløselighed af PCE i ligevægt med jordens porevand skønnes at svare til PCE's opløselighed i vand (206 mg/l, dvs. 206 g/m<sup>3</sup>). Fluxen kan herefter bestemmes ved  $J=A \times N \times C_0 = 25 \text{ m}^2 \times 0,1 \text{ m/år} \times 206 \text{ g/m}^3 = 515 \text{ g/år}$ . Såfremt der antages en kildestyrke på 100 mg/l er fluxen 250 g/år. Med en samlede masse på 2,25 kg PCE og en flux på enten 515 eller 250 g/år vil der teoretisk kun gå ca. 4,4 – 9 år, inden PCE'en er helt udvasket fra moræneleret til det underliggende sandmagasin. Det samlede skøn af massen af PCE kan være for lav, såfremt der i jorden findes

områder med fri fase PCE, der ikke er blevet påvist. Sådanne områder kan erfaringsmæssigt være meget vanskelige at påvise, og massebalancen – og dermed også udvaskningstiden er derfor behæftet med en væsentlig usikkerhed.

### **Spredningsveje og transportprocesser**

De relevante processer for vurderingen af risikoen i forhold til grundvandet er opløsning og transport af PCE med det infiltrerende porevand. Under den advektive transport igennem den vandmættede moræneler vil der ske en vis sorption og spredning/fortynding. Når opløst PCE med porevandet når ned i den umættede zone i sandet, vil sorption til jordens organiske fase, udveksling mellem porevand og poreluft, diffusion i gasfasen og advektion med porevandet være de væsentlige processer.

### **Risikovurdering**

I det følgende gennemgås en risikovurdering udført med henblik på at vurdere PCE-forureningens påvirkning af det underliggende grundvandsmagasin. Grundvandskriteriet for PCE, der skal overholdes i grundvandsmagasinet, er 1 µg/l.

I første fase antages konservativt, at porevandet spredes ned igennem den umættede zone, og at der ikke sker nogen nedbrydning. Herefter regnes der med en simpel opblanding i de øverste 0,25 m af grundvandsmagasinet. Da der ikke kan regnes med nedbrydning af PCE i den umættede zone, udføres der ikke beregninger svarende til fase 2 og 3.

### **Beregningsmetode**

Beregningen af den 1-dimensionale vertikale forureningsspredning igennem den umættede zone, under hensyntagen til de relevante processer nævnt ovenfor, kan udføres ved hjælp ligning 24 og 25. Med de opstillede udtryk kan både den transiente og stationære koncentrations-fordeling beregnes. Med de opstillede udtryk beregnes koncentrationen,  $C_u$ , lige over grundvandsspejlet samt fluxen ( $F$ ) til grundvandet, inden opblandingen i de øverste 0,25 m af magasinet. Koncentrationen,  $C_1$ , efter opblandingen i de øverste 0,25 m af magasinet, kan beregnes som angivet i ligning 30, svarende til Appendix 5.6 – ligning 6 i Miljøstyrelsen (1998b), og giver typisk anledning til en yderligere fortynding på op til 10 gange.

### **Fase 1**

#### **Kildestyrke**

I beregningen antages, at porevandet i bunden (5 m u.t.) af det forurenede område har en koncentration af PCE, som er lig med den maksimale koncentration på 100 mg/l målt i vandprøver fra moræneleret. Kildestyrken,  $C_0$ , antages således at være 100 mg/l, hvilket er noget lavere end PCE's opløselighed i vand, der er ca. 206 mg/l. Fra denne dybde og til grundvandsspejlet (20 m u.t.), beregnes herefter transporten igennem den umættede zone.

#### **Øvrige parametre**

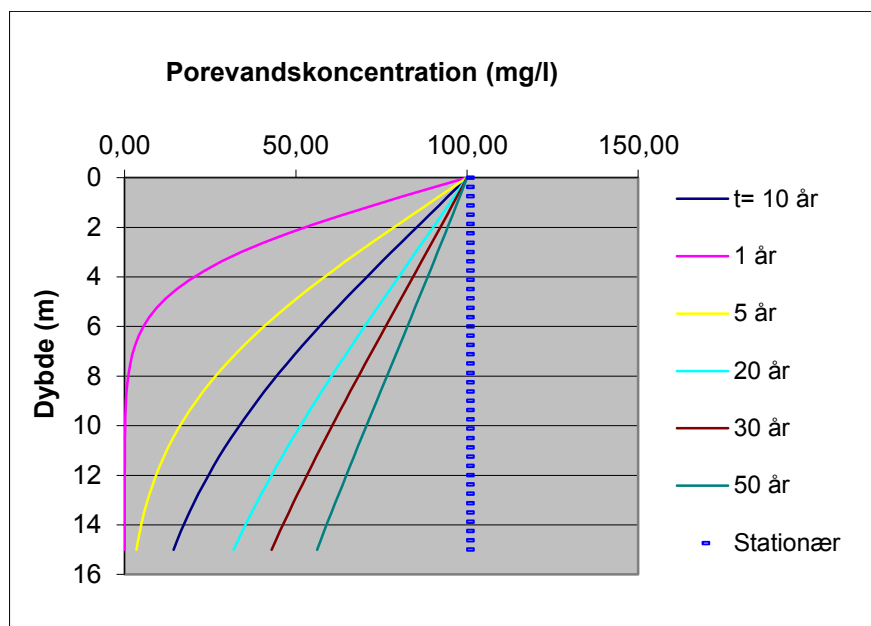
Beregningsformlerne medtager dispersion i vandfasen. I JAGG2 kan der anvendes en defaultværdi for dispersion (jf. figur 2 i Appendix 5.8 i Miljøstyrelsen (1998b)), svarende til en den aktuelle transportlængde på 15 m. JAGG2 har desuden standardværdier for de fysisk/kemiske data for PCE såvel som jordegenskaber, men brugeren kan vælge at anvende deres egne litteraturværdier, som dog skal dokumenteres. Blandt andet angives i JAGG2, at diffusionskoefficienten for PCE i luft er  $D_L = 6,38 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ , Henrys konstant,  $K_H = 0,8$  (dimensionsløs) og  $K_{oc} = 496$ , baseret på en  $\log K_{ow}$  på 3,4. Diffusionskoefficienten i vand,  $D_w$ , er beregnet efter definition i ligning 24 og bliver herefter  $D_w = D_L \cdot 10^{-5} = 6,4 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s} \cdot 10^{-5} = 6,4 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ .

Sandjordens relative vægtandel af organisk stof,  $f_{oc}$ , er 0,001 (0,1%), og volumenvægten af sand,  $\rho$ , er 1,46 (kg/l). Da der ikke regnes med nedbrydning, sættes  $\lambda = 0$ .

### Resulterende 1D vertikalt koncentrationsprofil som funktion af dybde og tid direkte under kilden

Med de givne parametre, er den beregnede porevandskoncentration som funktion af tiden og dybden under kilden vist på figur 13. Der ses en meget hurtig spredning til relativ stor dybde og gennembrud til grundvandszonen indenfor 5 år, hvilket skyldes, at diffusion i gasfasen er den dominerende proces i de første 5-10 år.

Porevandshastigheden er ca. 0,6 m/år, og spredningshastigheden i gasfasen er således i denne periode ca. 10 gange større end den tilsvarende advective spredningshastighed med porevandet.



FIGUR 13:  
VERTIKALT KONCENTRATIONSPROFIL FOR PCE I POREVANDET BEREGNET TIL FORSKELLIGE TIDSPUNKTER OG DYBDER UNDER KILDEOMRÅDET.

### Hurtig spredning på grund af diffusion

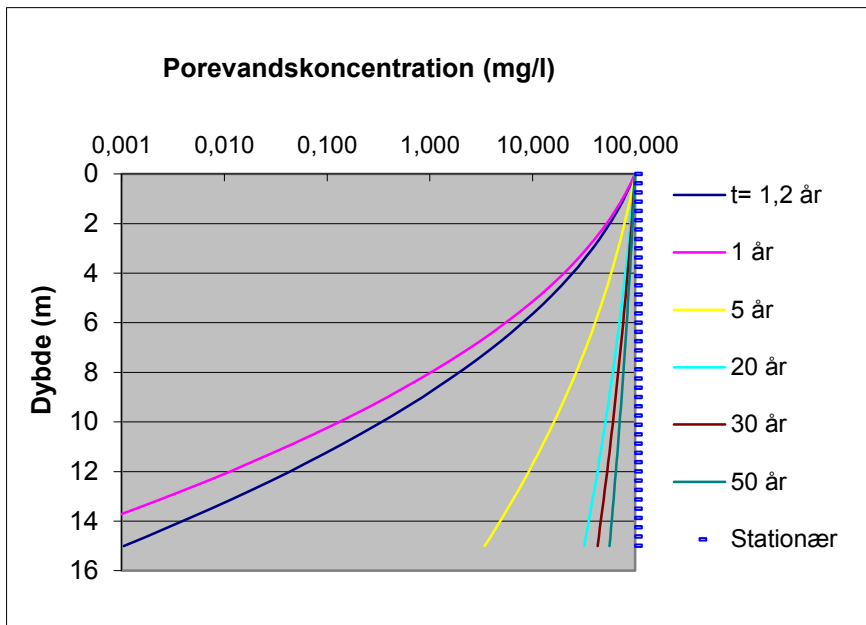
Den transiente udvikling i koncentrationerne ses tydeligere på figur 14, hvor de samme data er optegnet med en logaritmisk koncentrationsskala. Det bemærkes, at der allerede efter ca. 1,2 år vil være en porevandskoncentration på  $C_u=1$  µg/l i porevandet i en dybde af 15 m – dvs. lige over grundvandsspejlet. Dette understreger betydningen af at inkludere spredning ved diffusion i gasfasen i beregningerne.

### Tidslig variation i koncentrationen lige over grundvandsspejlet

Den beregnede koncentration af PCE i porevandet,  $C_u$ , umiddelbart over grundvandsspejlet bliver under stationære forhold 100 mg/l, og den tilhørende flux til grundvandet bliver 250 g/år, svarende til kildestyrken fra forureningen i moræneleret.

### Koncentrationen $C_1$ efter opblanding i de øverste 0,25 m af magasinet

Den resulterende teoretiske koncentration,  $C_1$ , i toppen af grundvands-magasinet, vil således også klart overskride grundvandskriteriet, idet den yderligere opblanding kun medfører en fortynding på maksimalt 10 gange. Der vil således i løbet af en kortere årrække forventes målbare indhold af PCE i grundvandet, og grundvandskriteriet kan derfor ikke kan overholdes. Der bør derfor gennemføres afværgeforanstaltninger, da forureningen udgør en risiko for grundvandsressourcen.



**FIGUR 14:**  
VERTIKALT KONCENTRATIONSPROFIL FOR PCE I POREVANDET BEREGNET TIL FORSKELLIGE TIDSPUNKTER OG DYBDER UNDER KILDEN (BEMÆRK LOGARITMISK X-AKSE).

### Tidslig variation i koncentrationen lige over grundvandsspejlet og fluxen til grundvandet

Da den transiente flux til grundvandet er proportional med den tidslige udvikling i koncentrationen i porevandet lige over grundvandsspejlet ( $C_w$ ), kan det beregnes, hvor hurtigt fluxen til grundvandet udvikler sig i forhold til tiden og den endelige stationære flux på 250 g/år.

Fluxen kan beregnes ved at  $J=A \times N \times Czt = 25 \text{ m}^2 \times 0,1 \text{ m/år} \times Czt \text{ g/m}^3 = 2,5 \times Czt \text{ g/år}$ .

Ved at beregne/ aflæse  $Czt$  efter forskellige tidspunkter i JAGG2 fås følgende værdier for fluxen:

**TABEL 1:**  
TIDSLIG UDVIKLING I FLUXEN TIL GRUNDVANDET OG KONCENTRATIONEN I POREVANDET LIGE OVER GRUNDVANDSSPEJLET

TID [ÅR]	CZT [MG/L]	FLUX [G/ÅR]	% AF DEN STATIONÆRE FLUX PÅ 250 G/ÅR
1	0,001	0,003	0,001
5	3,4	8,5	3,4
10	14	36	14
20	32	79	32
30	43	107	43
50	56	140	56
100	71	178	71
200	83	206	83
500	92	231	92

Som det ses af tabel 1, opnås efter ca. 10, 30 og 50 år hhv. 14, 43 og 56 % af den endelige flux under stationære forhold, mens en tilnærmelsesvis stationær situation først opnås efter mere end 200 år.

### **Konklusion**

Sammenlignes koncentrationen i kilden på 100 mg/l med den forventede koncentration lige over grundvandsspejlet, vil der allerede efter få år forventes en overskridelse af kriteriet på 1 µg/l. Fluxen til grundvandet vil efter 20 år være 32 % af fluxen ud af kildeområdet i det overliggende moræneler, og der vil over dybden forventes et næsten lineært koncentrationsprofil for PCE.

### **Monitering**

På baggrund af de gennemførte beregninger, må der i løbet af en kortere årrække, efter at PCE er spredt til den umættede zone, forventes målbare indhold af PCE i poreluften lige over grundvandsspejlet. En bestemmelse af den faktiske flux af PCE til grundvandet skal tage hensyn til spredningen i gasfasen, der også vil ske i horisontal retning. I det konkrete tilfælde kan der forventes en spredning ud til en afstand af ca. 50-100 m fra kildeområdet. Denne spredning kan kun kortlægges ved at placere filtre i den umættede zone og ved at analysere poreluftprøver.



#### Eksempel 4

#### Homogent umættet lag af sand indlejret i moræneler

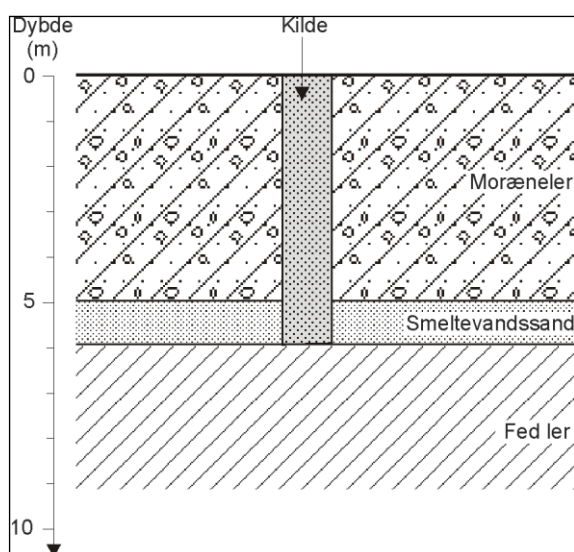
#### Horisontal spredning af PCE alene ved diffusion

#### Problemstilling

Som en hjælp ved risikovurdering på sager med flygtige stoffer som chlorerede opløsningsmidler og olieprodukter kan det være relevant at skønne, hvor hurtigt og hvor langt væk stofferne kan transporteres alene ved horisontal diffusion i gasfasen.

#### Geologi og hydrogeologi

Indlejret i et dæklag af moræneler findes et umættet lag af sand med en mægtighed på 1 m. Et simplificeret geologisk profil gennem området er vist på figur 15. Standardværdier i JAGG2 for jordegenskaber foreslår en totalporøsitet for sand på  $V_t=0,45$  og en relativ volumenandel af vand i jord ved markkapacitet på  $V_v=0,15$ . Nedsivning igennem sandlaget negligeres, idet vi ønsker en konservativ vurdering af den horisontale spredning.



FIGUR 15  
GEOLOGISK PROFIL.

#### Forurening

Vandprøver fra moræneleret over sandlaget viser koncentrationer af PCE på op til 100 mg/l i en række prøver udtaget indenfor det formodede kildeområde. Det antages nu, at der indenfor et cirkulært delområde med en diameter på 2 m er sket en momentan nedsivning af PCE-forurenet porevand til den umættede zone. I den umættede zone lige under dette nedsivningsområde er porevandskoncentrationen af PCE herefter konstant 100 mg/l over hele dybden.

#### Transportprocesser

Den relevante proces for vurdering af den horisontale spredning af flygtige stoffer er gasdiffusion. Der regnes konservativt ved ikke at medtage sorption, nedbrydning og stoftab ved nedsivning.

#### Beregningsmetode

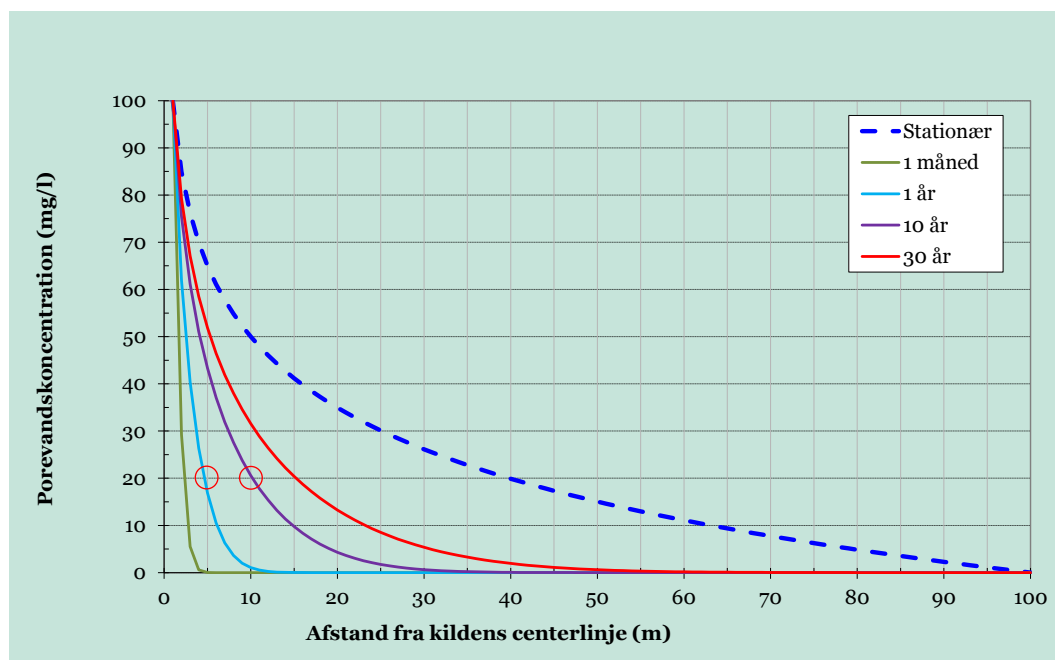
Beregningen af den 2-dimensionale horisontale forureningsspredning igennem den umættede zone, under hensyntagen til gasdiffusion, kan udføres ved hjælp af ligningerne 35, 36 og 37. Disse ligninger er ikke implementeret i JAGG2. Med de opstillede udtryk kan både den transiente og stationære koncentrationsfordeling i et rotationssymmetrisk system beregnes.

## Øvrige parametre

JAGG2 har standardværdier for de fysisk/kemiske data for PCE såvel som jordegenskaber, men brugeren kan vælge at anvende deres egne litteraturværdier, som dog skal dokumenteres. Blandt andet angives i JAGG2, at diffusionskoefficienten for PCE i luft er  $D_L=6,38 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ , Henrys konstant,  $K_H=0,8$  (dimensionsløs) og  $K_{oc}=496$ , baseret på en  $\log K_{ow}$  på 3,4. Diffusionskoefficienten i vand,  $D_w$ , er beregnet efter definitionen i ligning 24 og bliver herefter  $D_w=D_L \cdot 10^{-5} = 6,4 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s} \cdot 10^{-5} = 6,4 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ . Sandjordens relative vægtandel af organisk stof,  $f_{oc}$ , er 0,001 (0,1%), og volumenvægten af sand,  $\rho$ , er 1,46 (kg/l). Da der ikke regnes med nedbrydning, sættes  $\lambda=0$ . Den anvendte kildestyrkekoncentration i porevandet på 100 mg/l svarer til en ligevægtskoncentration i poreluften på 81.000 mg/m<sup>3</sup>.

## Beregnet spredning

Den beregnede radiære spredning fra kildeområdet er vist på figur 16. Ved hjælp af ligninger kan der både beregnes en stationær løsning samt spredningen til forskellige tider. De transiente beregninger viser, at der ca. 5 m fra kildeområdet allerede efter ca. 1 måned vil være koncentrationer af PCE i porevandet på niveau med drikkevandskriteriet på 1 µg/l. Efter hhv. 1 år og 10 år opnås koncentrationer på 20 mg/l hhv. 5 og 10 m fra kilden. Spredningen af PCE i poreluften sker således meget hurtigt og kan spredes i retninger, der ikke nødvendigvis er sammenfaldende med strømmingen af grundvand/porevand.



FIGUR 16:  
HORISONTALT KONCENTRATIONSPROFIL FOR PCE I POREVANDET BEREGNET TIL FORSKELLIGE TIDSPUNKTER OG FOR STATIONÆRE FORHOLD.

## Monitering

Den horisontale spredning af PCE i det indlejrede sandlag bør måles for at vurdere det faktiske omfang af spredning ved diffusion i gasfasen. Dette kan fx gøres ved placering af permanente eller midlertidige filtre placeret i sandlaget og udtagning og analyse af poreluftprøver

## **Bilag 2: 1. ordens nedbrydningsrater for den umættede zone**

Der er i litteraturen anvendt bl.a. batchforsøg, kolonneforsøg og feltforsøg til bestemmelse af nedbrydningsrater som blandt andet er gennemgået i Miljøstyrelsens rapport /1/ om litteraturgennemgang af strategier til dokumentation af nedbrydning af oliestoffer i den umættede zone.

Generelt er der afrapporteret meget få specifikke nedbrydningsrater for organiske stoffer under umættede forhold. For enkeltstoffer relateret til olieblandinger findes der et relativt stort datamateriale omkring nedbrydning under umættede forhold. Olieblandinger som fx benzin, diesel og fyringsolie indeholder et stort antal meget forskelligartede stoffer, og det er primært de monoaromatiske kulbrinter (BTEX) og nogle enkelte alifatiske kulbrinter (fx n-octan og n-hexan) samt PAH'er, der findes data for. Fra ganske få forsøg findes der data for tilsætningsstoffet MTBE.

### **Valg af nedbrydningskinetik til fastlæggelse af rater**

Sædvanligvis anvendes enten en 0-ordens (lineært henfald) eller 1.ordens nedbrydningskinetik (exponentielt henfald) til vurdering af observerede nedbrydningsforløb af opløste oliestoffer i enten porevandsfasen eller poreluftfasen. For 0-ordens kinetikken antages en konstant nedbrydningsrate og at enten iltindholdet og/eller antallet/aktiviteten af mikroorganismene er begrænsende for raten. For 1. ordens kinetikken antages, at hverken iltindholdet eller antallet/aktiviteten af mikroorganismene er begrænsende for nedbrydningen, men at det alene er indholdet af opløste oliestoffer (substratet), der er begrænsende for nedbrydningen. I litteraturen er aerob nedbrydning under feltforhold oftest beskrevet ved en 1.ordens nedbrydningskinetik.

### **Enheder for 1. ordens nedbrydningsrater**

I litteraturen er beregnede nedbrydningsrater under umættede forhold opgivet i forskellige enheder. Såfremt tilstrækkelige informationer om de fysiske, kemiske og biologiske parametre, der ligger til grund for forsøget, er opgivet, er det muligt at omregne mellem de forskellige enheder /2/. Den anvendte 1.ordens rate i beregningsformlerne i Appendix 5.6 er opgivet som en 1. ordens rate ( $\lambda$ ) relateret til vandfasen, idet nedbrydningen alene antages at ske i vandfasen.

### **Forudsætninger for aerob nedbrydning**

En lang række fysiske, kemiske og biologiske forhold er afgørende for, i hvilket omfang nedbrydning af det organiske stof vil ske. Mikroorganismer, der kan nedbryde oliekomponenter, findes naturligt i jorden /2/, og dette vurderes ikke at være nogen begrænsende faktor. Som udgangspunkt skal der være tilstrækkeligt af opløst kulstof (C) i form af fx oliekomponenter, så mikroorganismene har en energikilde til deres vækst. I /2/ er det vurderet, at aerob nedbrydning kan opretholdes så længe iltindholdet i poreluften er større end ca. 4 vol.%, hvilket svarer til en porevandskoncentration af ilt på ca. 2 mg/l. I /3/ anføres, at nedbrydning er observeret helt ned til et iltindhold på 0,1 mg/l i porevandet, hvilket svarer til et iltindhold i poreluften på ca. 0,2 vol %. Tilsvarende anføres i /2/, at porevandets indhold af N (nitrat-N) skal være større end 1-2 mg-N/l og det optimale vandindhold ca. 50-80% af markkapaciteten. Ifølge /4/ kan nedbrydningen dog opretholdes helt ned til et vandindhold svarende til visnegrænsen, og for danske forhold vil så lave vandindhold i praksis kun kunne opstå direkte under bygninger. Væksten af de nedbrydende mikroorganismer kræver også et vist indhold af fosfor (P) og at det optimale forhold mellem N og P er omkring 10:1 /5/. Der er således observeret eksempler på, at nedbrydningen af hydrocarboner i den umættede zone har været begrænset af indholdet af kvælstof /6, 7/. Udover tilstedeværelse af N og P kræves også tilstedeværelse af en række sporstoffer, bl.a. metaller.

### **Sammenstilling af nedbrydningsrater**

Der er i forbindelse med dette projekt ikke gennemført en systematisk litteratursøgning og bearbejdning af forsøgsdata og nedbrydningsrater for organiske stoffer under umættede forhold. Et sådant projekt ligger til grund for de 1.ordens rater, der i dag anvendes som standardværdier for

vurdering af nedbrydning i den mættede zone /8/. Der er taget udgangspunkt i en tidligere sammenstilling af rater /9/ for udvalgte oliestoffer samt to nyere sammenstillinger af data for oliestoffer /10/ og specifikt BTEX /11/.

### **Baggrund for valg af nedbrydningsrater**

Valg af standard 1.ordens rater til brug for risikovurderingen bør optimalt foretages på baggrund af en statistisk analyse af et tilstrækkeligt stort datamateriale. Herved kan en konservativ rate fastsættes ud fra et valgt konfidensniveau eller ved andre typer af statistiske analyser (fx Monte-Carlo simuleringer). Såfremt der ikke er tilstrækkelige data, kan det være nødvendigt at antage en meget lav nedbrydningsrate eller antage, at stoffet ikke nedbrydes. I tabel 2 er de foreliggende data sammenstillet.

### **1.ordens aerobe nedbrydningsrate for BTEX**

For gruppen af monaromater (BTEX) er der et relativt stort datamateriale, primært baseret på udenlandske data, og det har derfor været muligt at foretage en statistisk analyse /12/. Det mest omfattende danske datasæt fra GRACOS feltprojektet viser et spænd af værdier ( $1.7 - 9.4 \text{ d}^{-1}$ ), der ligger omkring medianværdien ( $6.8 \text{ d}^{-1}$ ) i det større udenlandske datasæt. En række batchforsøg med danske jorde /9/ viser rater, der er sammenlignelige med de målte danske feltrater fra GRACOS projektet. Der er således en relativt god overensstemmelse mellem de danske batch- og feltbaserede rater og de udenlandske værdier. For at tage højde for, at det sparsomme danske datasæt muligvis ikke afspejler den reelle variation under danske forhold, og at en del af de udenlandske værdier kan være bestemt ved højere jordtemperatur mv., foreslås det at anvende en 1. ordens rate ved beregninger i intervallet  $0,01-0,1$ . For de udenlandske datasæt vurderes det at svare til under  $0,1-1\%$  fraktilen.

### **1.ordens aerobe nedbrydningsrate for alifatiske kulbrinter**

For gruppen af alifatiske kulbrinter er der meget færre data til rådighed, og der er en større variationsbredde end for BTEX'er. Generelt ses større nedbrydningsrater for de lette alifatiske kulbrinter end for BTEX. Det mest omfattende danske datasæt fra GRACOS projektet viser et spænd af værdier (fra  $0,08 - 68 \text{ d}^{-1}$ ), og hele datasættet ligger således langt under medianværdien ( $1.700 \text{ d}^{-1}$ ) for det udenlandske datasæt. De målte rater ved batchforsøg med danske jorde /9/ ligger væsentligt højere end de danske feltrater fra GRACOS projektet, og ligger alle over gennemsnittet for de udenlandske rater. For igen at tage højde for, at det sparsomme danske datasæt muligvis ikke afspejler den reelle variation under danske forhold, og at en del af de udenlandske værdier kan være bestemt ved højere jordtemperatur mv., foreslås det at anvende en 1. ordens rate ved beregninger i intervallet  $0,1-1 \text{ (d}^{-1}\text{)}$ .

**TABEL 2**  
SAMMENSTILLING AF 1.-ORDENS POREVANDSBASEREDE NEDBRYDNINGSRATER FOR BTEX OG C6-C12 ALIFATISKE KULBRINTER. (D<sup>-1</sup>)

FORSLAG	FRAKTIL						REF	NOTE
	MIN	5%	10%	50%	95%	MAX		
<b>AROMATER:</b> 0,01-0,1								
<b>BTEX</b>	0,15	0,5	0,1	6,8	900	1.000	/12/	A
<b>BTEX</b>	1,7			3,8		9,4	/10/	B
<b>BTEX</b>	1,8			10,5		54	/9/	C
<b>ALIFATER:</b> 0,1-1								
<b>C6-C12</b>	48			1700		24.000	/11/	D
<b>C6-C7</b>	0,08			0,5		1,39	/10/	E
<b>C8-C10</b>	0,65			21		68	/10/	F
<b>C8-C10</b>	3.700			6.363		9.600	/9/	G

Note

- A: 84 datasæt fra batch, kolonne og feltforsøg. BTEX samt data for naphthalen og trimethylbenzen  
 B: 1 datasæt fra GRACOS feltprojektet. BTEX og data for 1,2,4-trimethylbenzen  
 C: 5 datasæt. 40 målinger af enkeltstoffer i batchforsøg. Fyringsolieforurennet jord. BTEX og 1,2,4-trimethylbenzen.  
 D: 17 datasæt fra batch, kolonne og feltforsøg. Lige-kædede - og forgrenede alifatiske kulbrinter  
 E: 1 data sæt fra GRACOS feltprojektet. Lige-kædede- og forgrenede alifatiske kulbrinter  
 F: 1 datasæt fra GRACOS feltprojektet. Lige-kædede- og forgrenede alifatiske kulbrinter.  
 G: 2 datasæt. 8 målinger af enkeltstoffer i batchforsøg, fyringsolieforurennet jord. n-octan og n-decan.

**Opdeling af rater på enkeltstoffer mv.**

Ved en nøjere gennemgang af baggrundsmaterialet vurderes det muligt at opdele BTEX-gruppen således, at fx rater for benzen kan estimeres separat og betydningen af geologi og andre faktorer ligeledes kan vurderes. Denne gennemgang er påbegyndt i samarbejde med forfatteren til den væsentligste kilde til rater /12/, og forventes at kunne gennemføres i 2007.

**Metoder til bestemmelse af 1.ordens nedbrydningsrater**

Hvis det ønskes at gennemføre en mere sikker risikovurdering, er det nødvendigt med bestemmelse af lokal-specifikke nedbrydningsrater. Som nævnt er der i litteraturen bl.a. anvendt batchforsøg, kolonneforsøg og feltforsøg til bestemmelse af nedbrydningsrater. Batchforsøg er en nem og relativt billig metode /7/, men kan især ved bestemmelse af lave nedbrydningsrater give problemer med sorption til materialer anvendt i udstyret /9/. Kolonneforsøg er tættere på de naturlige forhold i felten, men er til gengæld mere tidskrævende at udføre. Et kolonneforsøg baseret på diffusiv transport af hydrocarboner igennem en umættet jordkolonne gav nedbrydningsrater sammenlignelige med rater bestemt i felten, hvor kolonnesedimentet var udtaget /7/.

Der har også været anvendt forskellige former for feltmålinger og -forsøg. Kortlægning af ændringer i poreluftkoncentrationer væk fra en kilde har været anvendt til estimering af nedbrydningsrater ved såkaldt "invers modellering", hvor alle fysiske transportparametre skal bestemmes uafhængigt, og hvor sammenhængen mellem poreluftkoncentration og kilde-afstand tilpasses med en stoftransportmodel, hvor eneste ukendte parameter er nedbrydningsraten /7, 13-14/. Alternativt er der for nylig blevet forsket i at udnytte nedbrydningsrelaterede ændringer i sammensætningen af stabile kulstof-isotoper i hydrocarboner indeholdt i poreluft /15/. Metoden er uafhængig af fortynding, hvorfor nedbrydningsrater kan estimeres uden kendskab til fysiske transportforhold. Metoden er lovende, men kræver analyser, som på verdensplan kun kan udføres

på få laboratorier. Desuden har den kun været anvendt ved én lokalitet (GRACOS lokaliteten på Flyvestation Værløse).

Inden for de seneste år er diverse feltmetoder, der oprindeligt er udviklet for studier af nedbrydning i akviferer, forsøgt overført til den umættede zone. Metoderne benytter sig af et injiceret konservativt sporstof, hvis opførsel sammenlignes med nedbrydelige stoffers opførsel, og som enten medinjiceres eller er til stede som følge af en forurening. Forsøgene i form af såkaldte push-pull tests, hvor et gasvolumen indeholdende sporstof og nedbrydelige hydrocarboner injiceres ("push") ned i den umættede zone via en gasprobe. Efterfølgende prøvetages ("pull") poregassen omkring gasprobens filter og gassen analyseres. Ved sammenligning af koncentrationsudviklingen for sporstof og hydrocarbon kan nedbrydningsraten estimeres ved hjælp af en matematisk model /16/. Metoden har været benyttet til bestemmelse af methanoxidationsrater i den umættede zone /16/, men har ikke været forsøgt anvendt til kvantificering af nedbrydningsrater for hydrocarboner, såsom BTEX.

De er således et stykke vej, før der forefindes afprøvede in-situ metoder til bestemmelse af nedbrydningsrater i den umættede zone.

## Referencer

- /1/ Muchitsch, N., Christensen, A.G., Loll, P og Kristensen A.G. *Litteraturgennemgang af strategier til dokumentation af nedbrydning af oliestoffer i den umættede zone*. Miljøstyrelsen. Miljøprojekt nr. 1413, 2012.
- /2/ DeVaul, G., Ettinger, R., Salanitro, J.P., Gustafson, J. (1997). *Benzene, toluene, ethylbenzene, and xylenes [BTEX] degradation in vadose zone soil during vapor transport: First order rate constants*. In Proceedings of the Petroleum Hydrocarbons and Organic Chemicals in Ground Water – Prevention, Detection and Remediation Conference.
- /3/ Bordon, R. C.; Bedient, P. B. (1986). Transport of dissolved hydrocarbons influenced by oxygen-limited biodegradation, 1. theoretical development, Water Resources Research.
- /4/ Guymon, G. L. (1994). *Unsaturated Zone Hydrogeology*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.
- /5/ EPA (1995). *Bioventing Principles and Practice*. Volume I: Bioventing Principles. EPA/540/R-95/534a.
- /6/ Kaufmann, K., Christophersen, M., Buttler, A., Harms, H., Höhener, P., 2004. Microbial community response to petroleum hydrocarbon contamination in the unsaturated zone at the experimental field site Værløse, Denmark. *FEMS Microbiol. Ecol.* 48, 387–399.
- /7/ Höhener, P., Dakhel, N., Christophersen, M., Broholm, M. & Kjeldsen, P. (2006): Biodegradation of hydrocarbon vapors: comparison of laboratory and field investigations in the vadose zone at the emplaced fuel source experiment, Airbase Værløse, Denmark, *J. Cont. Hydrol.* 88, 337-358 .
- /8/ Kjærgaard, M., J.P. Ringsted, H.-J. Albrechtsen & P.L. Bjerg. (1998). Naturlig nedbrydning af miljøfremmede stoffer i jord og grundvand. Teknologi-udviklingsprogrammet for jord- og grundvandsforurening. Miljøprojekt nr. 408. Miljøstyrelsen.
- /9/ OM. (2006). Projekt om umættet zone. Undersøgelse af fyringsolies transport og nedbrydning i den umættede zone.

- /10/ New Jersey Department of Environmental Protection. (2006). Influence of bio-attenuation on vapour intrusion into buildings – model simulations using semi-analytical one-dimensional model.
- /11/ DeVaul, G. E. (2007). Indoor Vapor Intrusion with Oxygen-Limited Biodegradation for a Subsurface Gasoline Source, Environ. Sci. Technol.
- /12/ Evaluating Monitored Natural Attenuation of MTBE and TBA, workshop at: In-Situ and On-Site Bioremediation, The Ninth International Symposium, Baltimore Marriott Waterfront, Baltimore, MD, May 7-10, 2007. Todd Wiedemeier, George DeVaul, Xaiomin Yang.
- /13/ Maier, U., 2004. Modelling of Natural Attenuation in Soil and Groundwater. Ph D Thesis, University of Tuebingen, Tuebingen, Tübingen Geowissenschaftliche Arbeiten Nr. 73, pp. 81.
- /14/ Gaganis, P., Kjeldsen, P., Burganos, V.N., 2004. Modeling natural attenuation of multicomponent fuel mixtures in the vadose zone: use of field data and evaluation of biodegradation effects. Vadose Zone J. 3, 1262–1275.
- /15/ Bouchard, D., Hunkeler, D., Gaganis, P., Aravena, R., Höhener, P., Broholm, M.M. and Kjeldsen, P. (2007): Carbon isotope fractionation during migration of petroleum hydrocarbon vapors in the unsaturated zone: field experiment at Værløse Airbase, Denmark, and modeling. Accepted for publication in Environmental Science & Technology.
- /16/ Urmann, K., Gonzalez-Gil, G., Schroth, M.H., Hofer, M., Zeyer, J. (2005): New field method: Gas push-pull test for in-situ quantification of microbial activities in the vadose zone. Environmental Science & Technology, 39(1), 304-310.

## **JAGG 2 - Vertikal transport ned til førstkomende betydende magasin**

Denne rapport giver en gennemgang af de processer, der har væsentligst betydning for stoftransport under både mættede og umættede forhold. Eksisterende risikoværktøjer og programmer, der specifikt omhandler risikovurdering af den umættede zone, er gennemgået, og der er foretaget anbefalinger vedrørende beregningsudtryk for 4 konceptuelle modeller, A-D, der repræsenterer typiske forurenings-situationer. De opstillede beregningsudtryk for model A og C er indarbejdet i Miljøstyrelsens risikovurderingsværktøj JAGG2.



**Miljø- og  
Fødevareministeriet**  
Miljøstyrelsen

Strandgade 29  
DK - 1401 København K  
Tlf.: (+45) 72 54 40 00

**[www.mst.dk](http://www.mst.dk)**