



## Matematisk modellering - integration

Jensen, Karsten Høgh; Refsgaard, Anders; Refsgaard, Jens Christian

*Publication date:*  
1992

*Document Version*  
Også kaldet Forlagets PDF

[Link back to DTU Orbit](#)

*Citation (APA):*  
Jensen, K. H., Refsgaard, A., & Refsgaard, J. C. (1992). Matematisk modellering - integration. (Lossepladsprojektet. Rapport; Nr. M0).

## DTU Library

Technical Information Center of Denmark

---

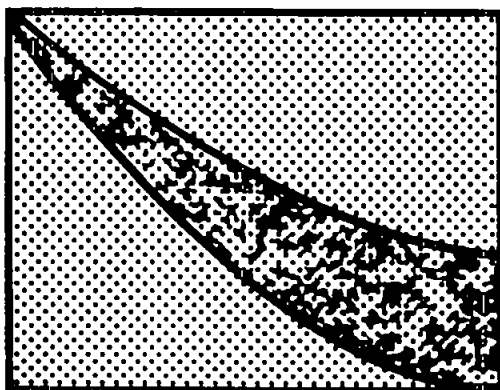
### General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

**Karsten Høgh Jensen,**  
**Institut for Strømningsmekanik og Vandbygning, DTH**  
**Anders Refsgaard,**  
**Dansk Hydraulisk Institut, ATV**  
**Jens Christian Refsgaard,**  
**Dansk Hydraulisk Institut, ATV**



**MATEMATISK MODELLERING -  
INTEGRATION**

**RAPPORT M0      DECEMBER 1992**

**LOSSEPLADSPROJEKTET**

## FORORD

Denne rapport sammenfatter resultaterne og erfaringerne fra Lossepladsprojektets aktiviteter indenfor området matematisk modellering.

Rapporten giver et resume af de udførte modelundersøgelser og indeholder endvidere en summarisk oversigt over de tilgrundliggende principper herunder hvilke ligninger og løsningsmetoder, der ligger til grund for modellerne.

Endelig indeholder rapporten en diskussion af forskellige forhold og processer af betydning for modellering af strømnings- og transportprocesser i grundvandszonen. Formålet hermed er at give vejledning med hensyn til hvilke modelbeskrivelser og metodikker, som skal anvendes i en bestemt forureningssituation, dvs.

- \* To- eller tre-dimensional beskrivelse.
- \* Fysisk beskrivelse (stationær/ikke-stationær, dispersivitet, sprækker, densitet, data for indgående parametre).
- \* Kemisk beskrivelse.
- \* Kalibrering af komplekse, numeriske modeller.
- \* Input/output håndtering af store datamængder.
- \* Krav til modeller og model-brugere i forbindelse med anvendelse af komplekse numeriske modeller til løsning af praktiske opgaver.

Grundlaget for disse diskussioner/vejledninger er dels erfaringer opnået i forbindelse med Lossepladsprojektet og dels resultater fra udenlandske undersøgelser samt erfaringer fra andre sideløbende ISVA og DHI forskningsundersøgelser og rådgivningsopgaver.

**SAMMENFATNING**

Lossepladsprojekterne M, R og P har indeholdt videreudvikling, testning og anvendelser af matematiske modeller til beskrivelse af strømningsforhold, stoftransport og geokemiske processer under forskellige forhold.

Videreudviklingen af DHI's hydrologiske modelsystem SHE har bl.a. omfattet udviklingen af omfattende pre- og postprocesseringsværktøjer, stoftransportprogrammel til samtidig beregning af transporten af flere stoffer samt kobling med et geokemisk modul og programmel til beregning af stoftransport i dobbeltporøse medier.

Under modelleringen af Vejen Losseplads blev der således bl.a. opstillet en 3-dimensionel model med ca. 60.000 beregnings-elementer, og kalibreringen af strømningssdelen gav gode erfaringer med direkte brug af geologisk viden i en modelopstilling. Modelberegningerne gav tilfredsstillende resultater, selvom sammenligningen med den observerede forureningsfane var usikker, bl.a. på grund af ufuldstændig viden om kilden.

Under modelleringen af tracerudbredelserne i Vejen Injektionsfelt var der selvsagt mere styr på kildeplaceringen og -styrken og modelleringen af transporten af et konservativt stof viste, at modellen kunne beskrive de observerede koncentrationer meget præcist, selv under anvendelse af dispersionsparametre bestemt ved geostatistiske metoder.

Ved anvendelse af geokemiske parameterverdier bestemt ved laboratorieanalyser viste det sig, at transporten af geokemisk reaktive stoffer injiceret i samme område ligeledes kunne beskrives meget præcist ved kobling af den geokemiske model og stoftransportmodellen, idet der uden egentlig kalibrering opnåedes god overensstemmelse mellem observerede og beregnede koncentrationer af flere reaktive stoffer.

I et kalkmagasin ved Karlstrup blev der ligeledes modelleret på transporten af injiceret stof. Stoftransporten var her domineret af den dobbeltporøse struktur, som findes i kalken. Modelleringen gav god overensstemmelse mellem observerede og simulerede koncentrationer og viste klart forskellen mellem enkeltporøsitet- og dobbeltporøsitetssantagelserne.

Under modelleringen af afværgeforanstaltninger blev fem alternativer undersøgt ud fra et effektivitetsindeks. Det viste sig, at den traditionelle løsning med oppumpning langt fra lossepladsen er mindst effektiv (men sandsynligvis mest sikker), mens andre afværgeforanstaltninger såsom oppumpning tæt ved en losseplads, hydraulisk fiksering af forureningskilden, fysisk afskærmning af lossepladsen og separationspumpning giver væsentlig mere effektiv udnyttelse af ressourcerne.

Projekternes resultater har, sammenholdt med relevante erfaringer fra andre sideløbende danske undersøgelser samt publicerede udenlandske resultater, givet anledning til yderligere diskussioner bl.a. omkring dispersivitetsværdier anvendt i stoftransportmodeller under danske forhold. Det har vist sig, at dispersionen i alluviale sandmagasiner er væsentligt mindre end hidtil antaget. Den langsgående horisontale dispersivitet er således bestemt til kun 0.5 m over en transportafstand på 200 m. Samtidig er det blevet understreget, at dispersionen i opsprækkede kalkmagasiner er væsentlig større end i alluviale sandmagasiner. Den langsgående horisontale dispersivitet blev således i kalkmagasinet ved Karlstrup betemt til 8 m over en transportafstand på 25 m.

I Lossepladsprojektet er der udelukkende anvendt 3-dimensionale modelopstillinger, og disse har vist, at dispersiviteter er en funktion af såvel de fysiske forhold som af detaljeringsgraden af den benyttede modellering. Under anvendelse af en 3-dimensional modelopstilling foretaget på baggrund af en detaljeret geologisk og hydrogeologisk model skal der anvendes dispersiviteter, som er

størrelsesordener mindre end dispersiviteterne i en traditionel 2-dimensional modelopstilling for det samme område.

Selvom der er anvendt en relativt fintmasket 3-dimensional model ved modelleringen af forureningsfanen fra Vejen Losseplads med netdimensioner på 25 x 25 x 2 m, er dette i overkanten af det optimale. For fremtidige undersøgelser må det således forventes, at der skal anvendes finere diskretisering i takt med muligheden for forøgede computerressourcer. Lossepladsmodeller med op imod 1 mill. beregningspunkter må fx. ikke anses for urealistisk om få år.

Under danske forhold forekommer beskedne geologiske variationer i form af fx. en lagdeling af magasinet hyppigt, hvilket vil bevirke, at en perkolatfane ikke spredes væsentligt over dybden. Til beskrivelse af en sådan forureningsspredning vil en 2-dimensional modellering give alt for optimistiske resultater, og der kræves som regel en 3-dimensional modellering, som klart bør baseres på en 3-dimensional geologisk model.

Med de rigtige hjælperedskaber i form af pre- og postprocesseringsprogrammer har det vist sig, at opstilling af en 3-dimensional model ikke er væsentligt mere ressourcekrævende end opstillingen af en tilsvarende 2-dimensional model. Komplexiteten i resultaterne giver derimod mulighed for en langt mere detaljeret kalibrering, og afhængig af antallet af målte parametre vil kalibreringen af den 3-dimensionale model være mere tidskrævende, ligesom det i mange tilfælde stiller større krav til brugererfaring for at kunne opnå troværdige resultater.

For at kunne arbejde med komplekse modelsystemer i praksis bør de "rigtige" hjælperedskaber omfatte en række faciliteter i en brugervenlig form. Fx. er redskaber til digitalisering, grafisk editering, kobling til standard GIS'ere, kobling til geologiske databaser (bl.a. DGU's), procedurer til automatisk modelopstilling ud fra rådata, grafisk præsentation af inputdata og beregningsresultater samt moduler til beregning af vand- og

stofbalancer uundværlige, hvis modelsystemerne skal kunne udnyttes effektivt. Samtidig kræver kalibreringen af en 3-dimensional model med 10.000-vis af beregningspunkter ikke blot hjælperedskaber og brugererfaring, men også en systematisk og stringent metodik. I Lossepladsprojektet er en metodik, som baseres direkte på anvendelse af geologiske informationer i form af en geologisk model, blevet anvendt, og erfaringerne herfra synes at være opmuntrende for det fremtidige samarbejde mellem traditionelle geologer og ingeniører, som anvender numeriske modeller i opgaveløsningerne.

Inddragelsen af geokemiske processer i beskrivelsen af forureningsspredning er i mange situationer nødvendigt, og geokemisk modellering er i dag praktisk muligt omend under forskellige simplificerende antagelser. Usikkerheden og erfaringerne omkring indsamling og estimering af geokemiske parameterverdier er dog stadig stor, og rutinemæssig anvendelse af geokemiske modeller til praktisk ingeniørmæssig brug ligger således et par år ud i fremtiden.

Densitetsforskelle mellem perkolat og grundvand er i mange situationer (udokumenteret) blevet angivet som forklaring på usædvanlige forureningsspredninger. En række modelsimuleringer har vist, at effekten af densitetsforskelle i de fleste situationer er neglignabel, hvis der sker en opblanding mellem perkolat og grundvand.

**ENGLISH SUMMARY**

Jensen, K. H., Refsgaard, A., Refsgaard, J. C. (1992): Mathematical modelling, integration of results. Lossepladsprojektet. Report M0, 105 pages, December 1992.

Mathematical models for groundwater flow, transport and geochemical processes under different conditions have been developed, tested and applied under the M, R and P projects of the "Lossepladsprojekt".

Both public domain software models (MOC and HST3D) and Danish developed models (UZ and SHE) were applied during the projects. In particular, the SHE has been further developed during the project, mainly by the Danish Hydraulic Institute. The development included pre- and postprocessing tools, a solute transport module for three-dimensional, multi-species transport calculations in both porous and fractured media and a geo-chemical add-on module.

Groundwater flow and solute transport processes at the Vejen Landfill were described by a very detailed three-dimensional model which used the geological interpretation directly in the establishment of the model. The simulations of the pollution plume gave satisfactory results although comparisons with the observed concentrations were disturbed amongst others by an uncertain source description. Application of the model for simulation of five alternative remedial actions for the groundwater showed that an optimal location of remediation wells and an optimal pumping strategy on these wells will increase the efficiency of a remedial action several times.

At the nearby Field Injection Site where both conservative and reactive species were injected under controlled conditions a much better agreement between model simulations and measured concentrations were obtained. Especially the modelling of species which were subject to geochemical reactions showed encouraging



results. Thus, parameters for the geo-chemical model were obtained from laboratory analyses and field test and without any calibration the model was able to reproduce the measured concentrations of several species.

During the other field injection test in a fractured limestone aquifer near Karlstrup the model also showed good agreement between measured simulated concentrations. The solute transport was here dominated by the double porosity structure of the limestone which for transport certainly cannot be modelled as a traditional porous medium.

The projects have emphasized the importance of a satisfactory description of the dispersion process and mainly the magnitude of the dispersivity parameters used in solute transport models. Together with other Danish and international findings it is now evident that the dispersivity values are one or two orders of magnitude smaller than previously assumed. Hence the longitudinal horizontal dispersivity was found to be of the order of 0.5 metres during a travel distance of 200 metres in the sandy aquifer at Vejen. Simultaneously, the results showed that the dispersion in a fractured medium is much larger than in alluvial deposits since the longitudinal horizontal dispersivity was found to be of the order of 8 metres during a travel distance of only 25 meters in the limestone aquifer at Karlstrup.

A number of three-dimensional models with different horizontal and vertical discretization have been applied during the projects and the results from these have shown that the magnitude of the dispersivity parameters is both dependent on the physical conditions (larger geological variability => larger dispersivity parameters) and of the numerical discretization of the problem (coarser discretization => larger numerical dispersion => need for smaller dispersivities). The results from Vejen Landfill also showed that even a three-dimensional model with grid sizes of 25m x 25m x 2m was almost too coarse to describe the solute plume satisfactorily.

The work with three-dimensional models has shown that pre- and post-processing tools as digitizers, coupling to geological databases, procedures for establishment of a model setup from "raw" data, graphical presentation of data and results in one, two and three dimensions as well as modules for calculation of mass balances are necessary to utilize the large amount of information involved efficiently. On the other hand if these tools are available a three-dimensional application will not be more time-consuming than a similar two-dimensional application. However, it requires a larger experience of the user to produce reliable results and it certainly requires a systematic and cogent way of setting up and calibrate the model.

Incorporation of geochemical processes in the description of transport of dissolved species is in many cases necessary and it is also possible under different simplifying assumptions.

## INDHOLDSFORTEGNELSE

<b>1.</b>	<b>INDLEDNING</b>	<b>1</b>
<b>2.</b>	<b>MATEMATISK GRUNDLAG FOR NUMERISKE MODELLER</b>	<b>3</b>
2.1	Vandstrømning	3
2.1.1	Grundvandsstrømning i løse aflejringer	3
2.1.2	Grundvandsstrømning med variabel densitet	4
2.1.3	Grundvandsstrømning i opsprækkede bjergarter	5
2.1.4	Umættet strømning	6
2.2	Transport af opløste stoffer	7
2.2.1	Transport i enkeltporøsitetssystemer	7
2.2.2	Transport i dobbeltporøsitetssystemer	10
2.3	Geokemiske processer	11
<b>3.</b>	<b>NUMERISKE METODER</b>	<b>17</b>
3.1	Finite difference	17
3.2	Finite element metoden	21
3.3	Karakteristikmetoden	22
3.4	Valg af numerisk løsningsmetode	23
<b>4.</b>	<b>ANVENDTE MODELLER I LOSSEPLADSPROJEKTET</b>	<b>25</b>
4.1	SHE	25
4.2	HST3D	26
4.3	MOC	26
4.4	UZ	27
<b>5.</b>	<b>RESUMÉ AF DE UDFØRTE MODELUNDERSØGELSER</b>	<b>29</b>
5.1	Modellering af forureningsspredning fra Vejen losseplads (M1), Jensen et al. (1991)	29
5.2	Modellering af tracerudbredelse i Vejen injektionsfelt (M5), Bitsch et al. (1991)	37
5.3	Modellering af uorganisk transport i Vejen injektionsfelt (P4), Bjerg et al. (1992)	45

5.4	Modellering af tracerudbredelse i kalkmagasin ved Karlstrup (M3), Brettmann og Jensen (1992) . . . . .	50
5.5	Modellering af afværgeforanstaltninger (R4), Refsgaard og Sørensen (1991) . . . . .	55
6.	2- ELLER 3-DIMENSIONAL MODELLERING . . . . .	59
7.	GEOLOGISKE OG HYDRAULISKE PARAMETRE . . . . .	63
8.	NUMERISK DISKRETISERING . . . . .	67
9.	PERKOLATSPREDNING UNDER STATIONÆRE/IKKE-STATIONÆRE STRØMNINGSFORHOLD . . . . .	69
10.	DISPERSION . . . . .	73
11.	SPRÆKKETRANSPORT . . . . .	79
12.	DENSITETSEFFEKT . . . . .	81
13.	KEMISKE PARAMETRE . . . . .	83
14.	KALIBRERING . . . . .	85
15.	PRE- OG POSTPROCESSERING AF DATA OG RESULTATER . . . . .	89
16.	KONKLUSIONER . . . . .	93
17.	REFERENCER . . . . .	99

## 1. INDLEDNING

Lossepladsprojektet har omfattet i alt 7 delprojekter (M1-M7) indenfor området matematisk modellering (M). Resultaterne er sammenfattet i 4 rapporter under overskrifterne:

1. Undersøgelser ved Vejen Losseplads:  
Matematisk modellering (M1/2)
2. Vejen Injektionsfelt: Dispersion (M5/6)
3. Modellering af stoftransport i opsprækkede formationer (M3)
4. Operationalisering af en 3-dimensional grundvandsmodel (M4/7)

Herudover foreligger to rapporter indenfor områderne afværgeforanstaltninger (R) og forureningskemi (P), som helt eller delvist omhandler matematisk modellering:

5. 3-dimensional modellering af alternative afværgeforanstaltninger (R4)
6. Vejen Injektionsfelt: Uorganisk stoftransport (P4)

For samtlige projekters vedkommende har grundvandsmodellen i SHE-systemet omfattende vandstrømning, stoftransport og kemi udgjort det centrale modelværktøj, suppleret med andre modeller i forbindelse med beregninger af specielle strømnings- og transportforhold. Modelberegningerne har været centreret omkring tre feltlokaliteter: Vejen Losseplads, Vejen Injektionsfelt og en lokalitet ved Karlstrup.

Modelberegningerne har omfattet vandstrømning i umættet zone; regional strømning og stoftransport i et sandmagasin; lokal vandstrømning samt ikke-reaktiv og reaktiv stoftransport i et forsøgsfelt; og lokal vandstrømning og stoftransport i et opsprækket kalkmagasin. De udførte modelberegninger er generelt karakteriseret ved at være baseret på et meget detaljeret geologisk og hydrogeologisk grundlag, som er etableret som led i

Lossepladsprojektets øvrige delprojekter, og ligeledes er der i forbindelse med projekt P4 indsamlet et omfattende kemisk datamateriale vedrørende transport af uorganiske stoffer. Dette har åbnet mulighed for en mere tilbunds gående validering af de numeriske modeller end tidligere set i Danmark.

De konklusioner, som drages i nærværende rapport, er i overvejende grad baseret på aktiviteter udført indenfor rammerne af Lossepladsprojektet, men både indenlandske erfaringer opnået i anden sammenhæng under projektforsløbet og udenlandske resultater er tillige inddraget.

I rapporten resumeres det matematiske grundlag for de involverede processer samt de mest anvendte numeriske metoder, og videre gives en kort beskrivelse af de modeller, der er anvendt i de forskellige delprojekter, og de opnåede resultater. Herefter diskuteres forskellige forhold og problemer i relation til matematisk modellering af strømnings- og transportprocesser i undergrunden, herunder antallet af dimensioner, som bør indtages, densitetseffekt, betydningen af sprækker m.v., og specielt behandles de geologiske, hydrauliske og kemiske parametre, som indgår i modellerne. Endelig diskuteres kalibrering af komplekse numeriske modeller, og betydningen af software til håndtering og præsentation af input/output data.

## 2. MATEMATISK GRUNDLAG FOR NUMERISKE MODELLER

### 2.1 Vandstrømning

#### 2.1.1 Grundvandsstrømning i løse aflejringer

Den styrende partielle differentiaalligning for 3-dimensional grundvandsstrømning under isoterme forhold og med konstant densitet lyder:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) - W_s \quad i, j=1, 2, 3 \quad (2.1)$$

hvor

h	- hydraulisk trykniveau
$K_{ij}$	- hydraulisk ledningsevne
$S_s$	- specifikt magasintal
$W_s$	- drænled (oppumpning)
x	- stedkoordinater
t	- tid

Denne ligning, som er udledt ved at kombinere Darcy's lov med kontinuitetsligningen, giver en rumlig beskrivelse af vandstrømning og trykniveauforhold i et grundvandsreservoir. I praksis er det nødvendigt at løse ligningen ved hjælp af numeriske metoder, og ved at variere de indgående parametre er det muligt at tage den geologiske opbygning og variabilitet i regning.

Under antagelse af, at de vertikale strømningskomponenter er meget mindre end de horisontale hastigheder kan ovenstående ligning simplificeres ved at foretage en integration over den mættede lagtykkelse. Herved degenererer ligningen til en 2-dimensional fladebeskrivelse, og i stedet for hydraulisk ledningsevne indgår som parameter transmissiviteten repræsenterende grundvandsmagasinet samlede vandledende evne. I relation til vandressourceberegninger er dette ofte en acceptabel forenkling, og de fleste grundvandsmodeller herunder bl.a. MOC

(Konikow og Bredehoeft, 1978) er derfor baseret på den 2-dimensionale strømningss ligning, som lyder:

$$S \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (T_x \frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (T_y \frac{\partial h}{\partial y}) - W \quad (2.2)$$

hvor

- S - magasinital ( $S=S_b$ )
- T - transmissivitet ( $T=Kb$ )
- W - drænled ( $W=W_b$ )
- b - mættet lagtykkelse
- x,y - horisontale koordinater

Drænledet repræsenterer oppumpning og udveksling med omgivelserne, herunder over- og underliggende magasiner og vandløb.

### 2.1.2 Grundvandsstrømning med variabel densitet

Hvis der optræder forskelle i densitet i det strømmende grundvand hidrørende fra enten perkolat med højt indhold af opløste stoffer eller indtrængende havvand kan ligning 2.1 ikke anvendes. Under sådanne forhold skal strømningss ligningen formuleres i absolut tryk frem for det normale hydrauliske trykniveau:

$$\frac{\partial(\rho n)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\rho k_{ij}}{\mu} \left( \frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g_j \right) \right) + q \rho^* \quad (2.3)$$

hvor

- n - porøsitet
- $\rho$  - densitet
- k - permeabilitet
- $\mu$  - viskositet
- p - tryk
- g - gravitation
- q - nedpumpning



$\rho$	- densitet af nedpumpet vand
$x$	- stedkoordinat
$t$	- tid

### 2.1.3 Grundvandsstrømning i opsprækkede bjergarter

Ler- og kalkaflejringer er meget finkornet og dermed meget tætte, hvilket betyder, at selve matrix (primær porøsitet) har en lille hydraulisk ledningsevne. Da disse bjergarter ofte er karakteriseret ved en stor grad af opsprækkethed, er strømmingen imidlertid primært knyttet til sprækkerne (sekundær porøsitet).

Beskrivelsen af vandstrømningen i opsprækkede bjergarter kan tage udgangspunkt i enten en kontinuumsbetragtning eller en diskret fremgangsmåde. Ved kontinuumsbeskrivelsen opfattes bjergarten som et ækvivalent porøst medium karakteriseret ved en effektiv hydraulisk ledningsevne, hvorved de sædvanlige differentiaalligninger og modeller kan anvendes. Denne beskrivelse forudsætter, at der foretages en midling over et volumen, som er mange gange større end sprækkediameter og afstanden mellem de enkelte sprækker.

I den diskrete beskrivelse defineres den geometriske udformning af sprækkesystemet, og der opstilles strømningsligninger for både sprækkesystem og det porøse system (matrix). For strømmingen i matrix antages Darcy's lov at være gældende, og sædvanligvis antages ligeledes, at strømmingen i sprækkerne er laminar, og at der gælder en lineær sammenhæng mellem vandflux og gradient i hydraulisk trykniveau. Antages at strømmingen i sprækkerne er ækvivalent til en laminar strømning mellem to hydraulisk glatte planparallelle plader kan følgende relationer opstilles, Sudicky og McLaren (1992):

$$K_f = b^2 \frac{\rho g}{12\mu} \quad (2.4)$$

$$q_i = -K_f J_i \quad (2.5)$$

hvor

q	- flux
$K_f$	- hydraulisk ledningsevne for sprække
$J_i$	- hydraulisk gradient
b	- sprække bredde
$\rho$	- densitet
$\mu$	- viskositet
g	- tyngdeacceleration

Herudover sker der en samtidig strømning mellem sprækkesystem og matrix, som ligeledes ofte formuleres som en potentialstrømning.

#### 2.1.4 Umættet strømning

Under antagelse af at vandstrømningen i de øvre umættede jordlag i overvejende grad er lodret gælder følgende én-dimensionale partielle differentiaalligning (Richards' ligning):

$$C \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) - \frac{\partial K}{\partial z} - S \quad (2.6)$$

hvor

C	- vandkapacitet
$\Psi$	- kapillartryk (tension)
K	- umættet hydraulisk ledningsevne
S	- drænled
z	- vertikal koordinat
t	- tid

To parametre eller funktioner indgår i ligningen: a) retentionskurven, som beskriver sammenhængen mellem vandindhold og tension og b) hydraulisk ledningsevnefunktion, som beskriver sammenhængen mellem umættet hydraulisk ledningsevne og vandindhold.

Hvis jorden er plantedækket, fjernes der vand fra profilet som evapotranspiration. Dette tab inkorporeres i strømningsligningen som drænleddet  $S$ . Drænleddets variation i tid og over dybden beregnes som funktion af potentiel fordampning og vandindholdet i rodzonen.

## 2.2 Transport af opløste stoffer

### 2.2.1 Transport i enkeltporøsitetssystemer

Transport af ikke-reaktive opløste stoffer i porøse medier beskrives traditionelt ved advektions-dispersionsligningen:

$$\frac{\partial(\epsilon c)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\epsilon D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j}) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\epsilon c u_i) - c^* W_s \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (2.7)$$

hvor

- $c$  - koncentration af opløst stof
- $u_i$  - porevandshastighed
- $D$  - dispersionskoefficient
- $\epsilon$  - porøsitet/vandindhold
- $x$  - stedkoordinater
- $t$  - tid
- $c^*$  - koncentration i injekteret vand
- $W_s$  - kildeled

Ligningen er her angivet i dens helt generelle form i 3 dimensioner og gældende for transport under både mættede forhold ( $\epsilon$ =porøsitet) og umættede forhold ( $\epsilon$ =vandindhold).

Dispersionskoefficienten relateres sædvanligvis til porevandshastigheden, Scheidegger (1961):

$$D_{ij} = \alpha_{ijmn} \frac{u_m u_n}{|u|} \quad i, j, m, n = 1, 2, 3 \quad (2.8)$$

hvor

- $\alpha$  - dispersivitet  
 $|u|$  - numerisk værdi af porevandshastighed

I det helt generelle tilfælde af 3-dimensional strømning i vilkårlig retning i et anisotropt medium indeholder dispersions-tensoren 9 elementer, som afhænger af en dispersivitetstensor med i alt 81 elementer. Ud fra en symmetribetragtning er det dog muligt at reducere antallet af elementer til 36, men stadigvæk er det et meget stort antal parametre, som det vil være umuligt at kvantificere i praksis. Yderligere symmetribetragtninger muliggør imidlertid en reduktion til 12 elementer (Scheidegger, 1961), og hermed er det muligt at angive følgende eksplicitte relationer for komponenterne i dispersionstensoren (Konikow og Grove, 1977):

$$\begin{aligned}
 D_{11} &= \alpha_{1111} \frac{u_1 u_1}{|u|} + \alpha_{1122} \frac{u_2 u_2}{|u|} + \alpha_{1133} \frac{u_3 u_3}{|u|} \\
 D_{22} &= \alpha_{2211} \frac{u_1 u_1}{|u|} + \alpha_{2222} \frac{u_2 u_2}{|u|} + \alpha_{2233} \frac{u_3 u_3}{|u|} \\
 D_{33} &= \alpha_{3311} \frac{u_1 u_1}{|u|} + \alpha_{3322} \frac{u_2 u_2}{|u|} + \alpha_{3333} \frac{u_3 u_3}{|u|} \\
 D_{12} &= D_{21} = \alpha_{1212} \frac{u_1 u_2}{|u|} + \alpha_{1221} \frac{u_2 u_1}{|u|} \\
 D_{13} &= D_{31} = \alpha_{1313} \frac{u_1 u_3}{|u|} + \alpha_{1331} \frac{u_3 u_1}{|u|} \\
 D_{23} &= D_{32} = \alpha_{2323} \frac{u_2 u_3}{|u|} + \alpha_{2332} \frac{u_3 u_2}{|u|}
 \end{aligned}
 \tag{2.9}$$

De 12 dispersivitetskomponenter fremkommer ved, at følgende ligheder vides at være opfyldt:  $\alpha_{1212} = \alpha_{1221}$ ,  $\alpha_{1313} = \alpha_{1331}$  og  $\alpha_{2323} = \alpha_{2332}$ . De i ligning 2.9 indgående komponenter kan grupperes i 4 fysisk identificerbare dispersiviteter:

$\alpha_{LH}$ (langsgående horisontal dispersivitet):	$\alpha_{1111}, \alpha_{2222}$
$\alpha_{TH}$ (transversal horisontal dispersivitet):	$\alpha_{1122}, \alpha_{2211}, \alpha_{1212}$ $\alpha_{1221}, \alpha_{2323}, \alpha_{2332}$
$\alpha_{LV}$ (langsgående vertikal dispersivitet):	$\alpha_{3333}$
$\alpha_{TV}$ (transversal vertikal dispersivitet):	$\alpha_{1133}, \alpha_{2233}, \alpha_{3311}$ $\alpha_{3322}, \alpha_{1313}, \alpha_{1331}$

Hvis x-aksen er orienteret langs med hovedstrømningsretningen er det muligt at se bort fra krydsleddene i dispersionstensoren og kun medtage de tre første led:

$$\begin{aligned}
 D_{11} &= \alpha_{LH} \frac{u_1 u_1}{|u|} + \alpha_{TH} \frac{u_2 u_2}{|u|} + \alpha_{TV} \frac{u_3 u_3}{|u|} \\
 D_{22} &= \alpha_{TH} \frac{u_1 u_1}{|u|} + \alpha_{LH} \frac{u_2 u_2}{|u|} + \alpha_{TV} \frac{u_3 u_3}{|u|} \\
 D_{33} &= \alpha_{TV} \frac{u_1 u_1}{|u|} + \alpha_{TV} \frac{u_2 u_2}{|u|} + \alpha_{LV} \frac{u_3 u_3}{|u|}
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

Ved at negligere krydsleddene i dispersionstensoren forenkles den numeriske løsning af advektion-dispersionsligningen, og det er derved muligt at opnå betydelige reduktioner i computerregnetiden. Denne forenkede beskrivelse er anvendt ved modelleringen af både forureningsspredningen fra Vejen losseplads og dispersionsforholdene i injektionsfeltet.

Modellering af forureningstransport i grundvand har ofte involveret en integration over den mættede lagtykkelse, hvorved transportberegningerne reduceres til et 2-dimensionalt problem. Herved matcher beskrivelsen den 2-dimensionale strømningss ligning (2.2), som sædvanligvis anvendes til løsning af strømningssproblemer. Anvendelse af en 2-dimensional transportmodel implicerer, at forureningen midles over den mættede lagtykkelse, hvilket

bl.a. betyder, at der sker en momentan vertikal spredning af forureningen ved kilden, og at koncentrationen altid beskrives som gennemsnit over den vertikale udstrækning af grundvandsmagasinet. Hvorvidt denne antagelse er acceptabel i en konkret forureningssituation afhænger af de givne hydrogeologiske forhold og transportafstande. Dette diskuteres nærmere i kapitel 6.

Advektion-dispersionsligningen for 2-dimensional strømning kan opskrives som:

$$\epsilon \frac{\partial}{\partial t} (cb) = - \frac{\partial}{\partial x_i} (\epsilon b c u_i) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\epsilon b D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j}) - c \cdot W \quad (2.11)$$

hvor

- b - mættet lagtykkelse
- W - nedpumpning

### 2.2.2 Transport i dobbeltporøsitetssystemer

I dobbeltporøse systemer med både sprække- og matrixstruktur sker der transport og dispersion i begge domæner samtidig med, at der foregår en udveksling af vand og stof de to domæner imellem. Hvis det er den diskrete fremgangsmåde, som er anvendt til beskrivelse af vandstrømningen i det dobbeltporøse system, er det strømningsmæssige grundlag til stede for at anvende advektion-dispersionsligningen (ligning 2.7) i begge domæner.

Alternativt kan antages, at der kun sker vandstrømning i sprækkesystemet, og at vandet i matrix til alle praktiske formål er stillestående (det mobile/ikke-mobile vand koncept). Under denne forudsætning antages sædvanligvis, at stoftransporten i sprækkesystemet kan beskrives ved advektion-dispersionsligningen, mens stofudvekslingen mellem den mobile og ikke-mobile fase sker som diffusion, således at stoftransport i et sådant system beskrives ved følgende koblede differentiaalligninger:

$$\theta_m \frac{\partial c_m}{\partial t} + \theta_{im} \frac{\partial c_{im}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta_m D_{ij} \frac{\partial c_m}{\partial x_j}) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta_m u_i c_m) \quad (2.12)$$

$$\theta_{im} \frac{\partial c_{im}}{\partial t} = \beta (c_m - c_{im})$$

hvor

- $c_m$  - koncentration i sprækker (mobil fase)
- $c_{im}$  - koncentration i matrix (ikke mobil fase)
- $\theta_m$  - sprækkeporøsitet
- $\theta_{im}$  - matrixporøsitet
- $u_i$  - porevandshastighed i sprækker
- $D_{ij}$  - dispersionskoefficient for sprækker
- $\beta$  - diffusionskoefficient

Som ligningen er formuleret her forudsættes, at forholdet mellem sprække- og matrixporøsiteter ikke ændrer sig i tiden.

### 2.3 Geokemiske processer

Hvis forureningen indeholder kemisk reaktive stoffer, kan transporten af de enkelte stoffer ikke beskrives af den sædvanlige advektions-dispersionsligning alene. Stofferne reagerer dels indbyrdes med hinanden dels med sedimentet i det porøse medium, hvori transporten foregår, og følger dermed ikke vandstrømningen. Samtidig kan forureningen give anledning til en frigivelse af andre stoffer end de oprindeligt tilstedeværende med tilsvarende komplicering af problemet til følge. De styrende differentiaalligninger får i dette tilfælde følgende udseende:

$$\frac{\partial (\epsilon c_n)}{\partial t} + \rho \frac{\partial S_n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\epsilon D_{ij} \frac{\partial c_n}{\partial x_j}) \quad (2.13)$$

$$- \frac{\partial}{\partial x_i} (\epsilon c_n u_i) - W_s (c_n^* + S_n^*) \quad i, j = 1, 2, 3; n = 1, \dots, N$$

hvor

$c_n$	- koncentration af opløst stof
$U_i$	- porevandshastighed
$D$	- dispersionkoefficienter
$\epsilon$	- porøsitet/vandindhold
$x$	- stedkoordinater
$t$	- tid
$S_n$	- koncentration af ikke opløst stof
$\rho$	- bulk densitet af det porøse medium
$c^*, S^*$	- koncentration i injiceret vand
$W_s$	- nedpumpning

Samtidig med transportligningen skal der yderligere defineres og løses et sæt af ligninger, som beskriver sammenhængen mellem de enkelte stoffer og deres fase:

$$S_i = f(c, S, x, t, \frac{\partial c}{\partial t}, \dots) \quad (2.14)$$

Der er således tale om et system af ulineære differentiaalligninger, som i det generelle tilfælde må opfattes som et kinetisk system, hvor de fysiske og kemiske reaktioner foregår samtidig. Ligningerne må som sådan løses samtidig, hvilket i tilfælde af flere komplicerede kemiske reaktionsmønstre kan vise sig endog særdeles vanskeligt.

De geokemiske processer falder inden for to grupper, som modelleringsmæssigt kan behandles forskelligt. Den ene gruppe af processer er fuldt reversible og "tilstrækkelig hurtige" til at processerne kan beskrives ved den termodynamiske ligevægtsteori. Udtrykket "tilstrækkelig hurtigt" skal opfattes relativt sammenlignet med fx. strømningshastigheder. Denne gruppe processer omfatter typisk reaktioner mellem uorganiske stoffer, fx. ionbytning, kompleksdannelser, udfældning/opløsning og redoxprocesser. Den anden gruppe processer er irreversible og "ikke tilstrækkelig hurtige" og skal beskrives ved hjælp af reaktionshastigheder. Denne gruppe omfatter udover "langsomme"



uorganiske reaktioner typisk mikrobiologisk betinget nedbrydning af organiske stoffer.

Inden for Lossepladsprojektets rammer er der kun foretaget modellering af "hurtige" processer, hvortil en kemisk ligevægtsforudsætning har været anvendt. Procesbeskrivelserne i det følgende er begrænset til ligevægtsprocesserne.

Ligning 2.13 kan løses på to principielt forskellige metoder, nemlig et-trins- og to-trinsmetoden.

Ved et-trinsmetoden løses ligning 2.13 og advektions-dispersionsligningen (2.7) samtidig. Dette er principielt det mest korrekte, idet stoftransport og geokemiske processer foregår samtidigt. Denne fremgangsmåde er imidlertid temmelig besværlig for komplicerede problemer med flere stoffer og reaktionstyper, og den har vist sig at kræve store computerressourcer (Engesgaard, 1991).

Ved to-trinsmetoden løses ligningerne 2.13 og 2.7 hver for sig. Transporten (2.7) løses for hvert stof under antagelsen af konservative forhold, hvorefter koncentrationsændringer som følge af kemiske reaktioner (2.13) beregnes under antagelsen om kemisk ligevægt. Metodens anvendelighed afhænger af om fejlen forårsaget af opsplittningen af ligningssystemet har en acceptabel lille størrelse. En hovedfordel ved denne metode er dens fleksibilitet, idet man kan skifte fra et kemisk system til et andet ved blot at ændre eller supplere de kemiske subrutiner. Således kan den samme transportdel bruges i alle situationer, og der er mulighed for at anvende forskellige programmer til kemiberegningerne afhængig af hvilke stoffer og kemiske miljøer, der skal behandles.

En måde at forbedre beregningsnøjagtigheden for to-trinsmetoden er at foretage iterationer mellem de to ligninger. Generelt vil et-trins- eller den iterative to-trinsmetode give mest nøjagtige resultater, med mindre der i to-trinsmetoden uden iterationer benyttes mindre tidsskridt. I praksis vil andre faktorer

imidlertid også have betydning. Traberg (1992) fandt fx. ved sammenligning mellem to modeller, hvor den ene var baseret på simpel finite difference løsning af ligning 2.7 og iteration mellem 2.7 og 2.13, mens den anden var baseret på karakteristiskmetoden til løsning af 2.7 men ingen iteration mellem de to ligninger, at for den undersøgte lokalitet gav den numeriske dispersion i løsningen af 2.7 anledning til langt større unøjagtigheder end manglende iterationer mellem de to ligninger. I den model, der er benyttet under Lossepladsprojektet (Ammentorp og Refsgaard, 1991), er der anvendt to-step løsningsmetoden, mens Engesgaard and Kipp (1991) har benyttet den iterative metode bl.a. i forbindelse med NPO projektet.

De uorganiske kemiske processer, der i grundvandsmiljøet har særlig interesse omfatter ionbytning, kompleksering, udfældning/opløsning samt redoxprocesser og syre-basereaktioner. Det kemiske udtryk for kationbytning kan beskrives ved:



hvor

- A, B - opløste ioner
- $\bar{A}, \bar{B}$  - bundne ioner
- z - valens

Adskillige algebraiske udtryk for denne reaktion er i tidens løb blevet udviklet byggende på forskellige forudsætninger. Et af de mere almindeligt anvendte er det såkaldte Gaines-Thomas udtryk:

$$K_{B/A} = \left[ \frac{\bar{N}_B}{f_B} \right]^{z_A} \left[ \frac{f_A}{\bar{N}_A} \right]^{z_B} \quad (2.16)$$

hvor

- $K_{B/A}$  - selektivitetskoefficient

$\bar{N}$  - ækvivalensfraktion  
 $f$  - aktivitetskoefficient

Ækvivalensfraktionen udtrykker aktiviteten af stoffet i den faste fase:

$$\bar{N}_A = \frac{\bar{A}}{CEC} \quad (2.17)$$

hvor

CEC - ionbytningskapaciteten

Det skal bemærkes, at summen af de i ligning 2.16 indgående ækvivalensfraktioner er lig med 1.

Det kemiske udtryk for kompleksering mellem 2 ioner kan beskrives ved:



hvor

$i, j$  - mol-antal

Under antagelse af  $i=j=1$  simplificeres problemet, og det algebraiske udtryk for masseaktionen får følgende udseende:

$$K_{AB}^C = \frac{f_{AB} C_{AB}}{f_A C_A * f_B C_B} \quad (2.19)$$

hvor

$K_{AB}$  - stabilitetskonstant

For udfældning/opløsning af stoffer kan der opstilles et lignende udtryk. Ved den kemiske reaktion, hvori der maksimalt indgår 3 stoffer, får det kemiske udtryk følgende udseende:

$$A_i B_j C_k = iA^{z_A} + jB^{z_B} + kC^{z_C} \quad (2.20)$$

Det algebraiske udtryk for ligevægt fremkommer igen ved hjælp af masseaktionsligningen:

$$(f_A C_A)^i (f_B C_B)^j (f_C C_C)^k = K_{ABC} \quad (2.21)$$

hvor

$K_{ABC}$  - opløselighedsprodukt

I de fleste naturlige miljøer har pH og karbonatsystemets komponenter ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{HCO}_3^-$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$ ) væsentlig betydning for udfældningsprocesser og kompleksering. En kemisk model, som inkluderer disse processer, bør derfor holde styr på pH og tage karbonatsystemet i regning.

De anførte ligevægtsligninger indgår sammen med ligningen for ladningsbalance i det algebraiske system, som danner grundlaget for beregningen af den kemiske ligevægt.

### 3. NUMERISKE METODER

Adskillige numeriske metoder har i tidens løb været anvendt til løsning af de i Kapitel 2 omtalte differentiaalligninger. I det følgende vil de mest almindelige metoder for grundvandsstrømning og stoftransport i grundvand blive diskuteret, nemlig finite difference metoder, finite element metoder og karakteristikmetoden. Behandlingen af finite difference er mest omfattende, ligesom nogle generelle numeriske problemstillinger diskuteres i dette afsnit.

#### 3.1 Finite difference

Finite difference metoden er den "ældste" og nemmest gennemskuelige metode til løsning af partielle differentiaalligninger. Det foregår ved at approksimere differentiaalligningerne til aritmetiske udtryk, som herefter kan løses numerisk på en computer.

I praksis sker det ved at definere et fast beregningsnet, hvori ligningen løses, Fig. 3.1, samt knudepunkter, som kan placeres enten midt i nettet eller i hjørnepunkterne, hvori løsningen beregnes.

Til illustration af forskellige finite difference løsningsmetoder betragtes advektions-dispersionsligningen (2.7) opskrevet uden kildeled i én dimension:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + v \frac{\partial c}{\partial x} \quad (3.1)$$

De partielle differentiaalligninger kan omskrives til aritmetiske differensudtryk ved approksimationer, som kan centreres på forskellig måde som fx.:

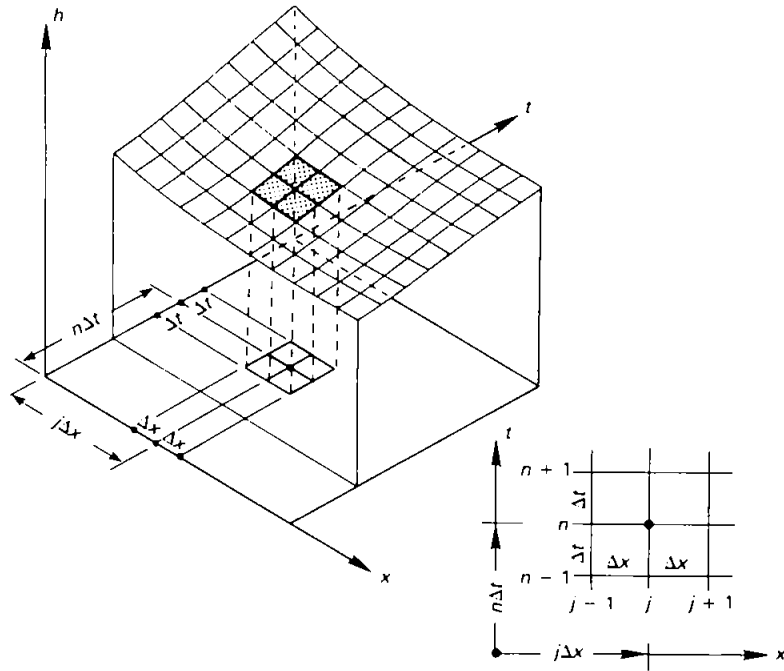


Fig. 3.1 Diskretiseringen af løsningsområdet til et beregningsnet. Fra Abbott and Basco (1989).

- (a) Koncentrationen  $c$  som funktion af længderetningen  $x$  og tiden  $t$ .  
 (b) Et delområde projiceret på  $x$ - $t$  planet.

$$\frac{\partial c}{\partial t} \approx \frac{1}{\Delta t} \begin{cases} c_j^{n+1} - c_j^n & \text{fremad i tid} \\ \frac{1}{2}(c_j^{n+1} - c_j^{n-1}) & \text{centreret i tid} \\ c_j^n - c_j^{n-1} & \text{bagud i tid} \end{cases} \quad (3.2)$$

Hvis der fx. benyttes en fremad centreret for den tidsafledede og centrale differencer for advektions- og dispersionsleddet, fås følgende finite differensskema for ligning 3.1:

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} = D \frac{c_{j+1}^n - 2c_j^n + c_{j-1}^n}{\Delta x^2} + v \frac{c_{j+1}^n - c_{j-1}^n}{2\Delta x} \quad (3.3)$$

Ligning 3.3 kan omskrives til:

$$c_j^{n+1} = \alpha c_{j+1}^n + \beta c_j^n + \gamma c_{j-1}^n \quad (3.4)$$

hvor koncentrationen i punkt  $j$  til det nye tidsskridt  $n+1$ ,  $c_j^{n+1}$ , kan udtrykkes **eksplicit** som funktion af koncentrationer fra det forrige tidsskridt.

Såfremt der i stedet benyttes en fremad centrering for koncentrationerne også for advektions- og dispersionsleddet fås følgende approksimation:

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} = D \frac{c_{j+1}^{n+1} - 2c_j^{n+1} + c_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + v \frac{c_{j+1}^{n+1} - c_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x} \quad (3.5)$$

hvor koncentrationen  $c_j^{n+1}$  ikke kan udregnes direkte, men også er en funktion af (ukendte) koncentrationer i andre punkter til tiden  $n+1$ . Et sådant skema kaldes **implicit**. Ved at opskrive ligning 3.5 for samtlige knudepunkter i modelområdet fremkommer et system af  $m$  lineære ligninger med  $m$  ubekendte, hvilket kan løses ved kendte matrix løsningsteknikker, hvoraf to principielt forskellige grupper er:

- \* **Direkte løsning**, hvorved den nøjagtige løsning, bortset fra afrundingsfejl, findes. Eksempler herpå er løsninger med determinantmetoden, Gauss elimination og løsninger ved hjælp af matrixinversion. Disse metoder stiller store krav til hukommelse (RAM) og giver lange beregningstider, hvorfor de primært er fordelagtige at benytte til små modelopstillinger.
- \* **Iterativ løsning**. Ved anvendelse af iterative metoder er det ikke nødvendigt at gemme store matricer, og kravet til beregningstider og hukommelse (RAM) er mindre end ved en direkte løsning, i hvert fald for

store modelopstillinger. Af de mere almindelige iterative metoder kan nævnes "successiv overrelaxation method" og "iterative alternating direction implicit procedure".

En speciel variant er den såkaldte **integrated finite difference method**, hvor området inddeles i polygoner i stedet for et regulært rektangulært net. Denne metode blev oprindeligt udviklet af Tyson and Weber (1964) og er i Danmark blevet anvendt i Suså modellen (Stang, 1981).

Ovenstående tjener kun til illustration af nogle grundbegreber, idet der i praksis anvendes mere komplicerede formuleringer. I det følgende knyttes nogle kommentarer til generelle problemer i forbindelse med numeriske løsningsmetoder:

**Stabilitet.** Et numerisk skema kan blive ustabil, og løsningen kan eksplodere ("blow up") og blive fysisk set meningsløs. Forskellige skemaer har forskellige begrænsninger i længden af et beregningstidsskridt. For nogle skemaer, heriblandt de eksplícitte, kan den maksimale tidsskridtslængde formuleres præcist, mens denne for mange skemaer i høj grad må baseres på erfaringer. Specielt for eksplícitte skemaer skal der benyttes små tidskridt, mens der ved implicítte skemaer generelt kan benyttes langt større tidsskridt i beregningerne.

**Svingninger** (oscillations, wiggles). Beskrivelsen af skarpe koncentrationsfronter er vanskelig med mindre en sådan front kan opløses over adskillige beregningselementer, hvilket i praksis ofte ikke er muligt. Herved kan den numeriske løsning give anledning til svingninger på fx. en gennembrudskurve, hvilket bl.a. kan resultere i negative koncentrationer. Sådanne svingninger udgør, hvis de er små, primært et æstetisk problem, mens større svingninger kan resultere i fysisk set urealistiske løsninger og numeriske stabilitetsproblemer.



**Numerisk dispersion.** Numeriske løsninger af advektions-dispersionsligningen resulterer ofte i en mere udglattet gennembrudskurve end analytiske løsninger, svarende til at der ved den numerisk løsning er tilføjet ekstra dispersion i forhold til den teoretisk korrekte løsning. Numerisk dispersion er specielt et problem i simple numeriske skemaer, hvor koncentrationen forudsættes konstant over et beregningsnet (første ordens approksimation). Alle implicitte skemaer indeholder en betydelig numerisk dispersion. De mest nøjagtige finite difference skemaer med hensyn til at undgå numerisk dispersion er eksplicitte skemaer af højere orden.

**Beregningseffektivitet** er udtryk for hvor mange computerressourcer, der medgår til løsning af de nødvendige beregninger. Der kan være store forskelle på, hvor effektivt forskellige modeller er optimeret med hensyn til beregningstid. Beregningseffektivitet er i dag ikke af megen praktisk interesse for 2-dimensionale deterministiske modeller, hvorimod den stadig kan være et problem ved store 3-dimensionale modelopstillinger samt ved anvendelse af stokastiske modeller.

### 3.2 Finite element metoden

Finite element metoden adskiller sig principielt fra finite difference metoden ved den måde, hvorpå variablerne er defineret. I finite difference modeller er gennemsnitsværdien for en variabel (trykniveau eller koncentration) lig værdien i knudepunktet. I finite element modeller derimod er værdien af en variabel defineret over hele beregningselementet ved hjælp af interpolationsfunktioner (basisfunktioner). Basisfunktioner kan foreskrive fx. lineære, kvadratiske eller kubiske variationer.

I finite element metoden benyttes fleksible beregningselementer til beskrivelsen af modelområdet - i det to-dimensionale tilfælde oftest bestående af trekantede eller firesidede elementer med vilkårlige vinkler. Herved kan inhomogeniteter, randbetingelser o.l. beskrives geometrisk mere korrekt end tilfældet er ved

finite difference metoden. Dette indebærer, at finite element modeller ofte kan klare sig med færre beregningspunkter end finite difference modeller.

Ved hjælp af finite element metoden kan de partielle differentiaalligninger formuleres som et sæt algebraiske ligninger, som herefter kan løses på samme måde som finite difference ligningerne. Finite element metoden er matematisk mere avanceret end finite difference metoden og kræver generelt større computerressourcer for samme antal beregningspunkter.

### 3.3 Karakteristikmetoden

En hyppigt anvendt metode til løsning af advektions-dispersionsligningen er den såkaldte karakteristikmetode, også kaldet "particle tracking" eller Lagrange's metode.

Den grundliggende idé er at adskille det advektive og det dispersive led i transportligningen og herefter løse dem hver for sig. Den mest almindelige metode består i at introducere et stort antal partikler med hver sin koncentration. Advektionsleddet løses ved at flytte partiklerne uden at ændre koncentrationerne. Herefter løses dispersionsleddet, enten ved en finite difference formulering eller ved at lade partiklerne foretage en "random walk".

Den store fordel ved karakteristikmetoden er, at den kan beskrive en skarp koncentrationsfront næsten uden numerisk dispersion. Dette er fx. ved finite difference metoder kun muligt ved anvendelse af avancerede, højere (tredje) ordens approksimationer. Ulemperne ved metoden knytter sig til at holde styr på de mange (tusindvis) partikler, hvoraf nogle forlader modelområdet (oppumpning, ud over randen), mens nye kommer til. Løsningen er afhængig af antallet af partikler pr. celle, og der er ofte problemer med massebevarelse.

Beregningsmæssigt bruger metoden væsentligt flere computerressourcer end fx. finite difference metoden. MOC modellen (Konikow and Bredehoeft, 1978) baserer sin løsning af advektions-dispersionsligningen på denne metode.

En speciel undergruppe udgøres af particle tracking metoder, som blot følger strømlinier og beregner, hvor lang tid det tager for partikler at tilbagelægge bestemte strækninger. Disse metoder ser bort fra dispersion og beregner som hovedregel ikke koncentrationer. Mange af disse metoder er til gengæld udviklet til at kunne spore strømlinier bagud, således at fx. oplandet til en indvindingsboring kan beregnes.

### **3.4 Valg af numerisk løsningsmetode**

Det skal indledningsvis fastslås, at en passende anvendelse af modeller med forskellige numeriske løsningsmetoder i praksis giver identiske løsninger af det samme problem.

Finite difference metoder er generelt de mest anvendte til grundvandsmodellering, især til praktisk/professionel brug, mens finite element metoden primært finder anvendelse på universiteter og højere læreanstalter til forskningsformål. Karakteristikmetoden benyttes i nogen omfang til løsning af advektions-dispersionsligningen både til praktiske og forskningsmæssige formål.

Det er en ofte forekommende misforståelse, at finite element modeller skulle være mere nøjagtige end finite difference modeller. Ved at benytte paraboliske eller kubiske basisfunktioner kan der opnås nøjagtige løsninger med finite element metoden, og udviklingen af højere ordens approksimationer er relativt nem i denne metode. Højere ordens finite difference approksimationer kan imidlertid også udledes, selv om det kan være besværligt, hvorfor mange finite difference modeller, selv om det ikke var nødvendigt, vil benytte lavere ordens approksimationer. Sagt på en anden måde vil en godt opstillet finite element model kunne

give den samme nøjagtighed som en finite difference model med væsentlig flere beregningspunkter. Dette modsvares imidlertid af, at finite element modeller kræver væsentlig større computerressourcer pr. beregningspunkt end finite difference modeller.

Der er således ingen afgørende forskel på nøjagtighed og effektivitet for de forskellige metoder, og der er fx. langt større variation i numerisk nøjagtighed/effektivitet inden for gruppen af finite difference modeller, end der er mellem de bedste finite difference og de bedste finite element modeller. Valget af numerisk metode er derfor først og fremmest vigtigt for modeludviklere, mens det har mindre betydning for brugere. En bruger skal derimod være klar over en given models evne til at løse forskellige typer af problemer, herunder dens nøjagtighed og beregningseffektivitet, hvorefter det ofte vil være andre faktorer, bl.a. professionaliteten af tilhørende pre- og postprocessorer, der vil afgøre det endelige modelvalg.

#### 4. ANVENDTE MODELLER I LOSSEPLADSPROJEKTET

##### 4.1 SHE

SHE, som oprindeligt er udviklet af DHI, SOGREAH (Frankrig) og Institute of Hydrology (England), (Abbott et al., 1986), simulerer strømninger og stoftransport i forskellige dele af det landbaserede hydrologiske kredsløb. Modellen indeholder bl.a. moduler til beregning af fordampning og infiltration, overfladisk afstrømning, vandløbsafstrømning, strømning i den umættede zone og i grundvandszonen. DHI's nuværende version af SHE er udvidet til at omfatte en tre-dimensional grundvandsbeskrivelse med tilhørende stoftransport og geokemiske reaktioner for flere stoffer. Endvidere kan transporten også beskrive forholdene i dobbeltporøse medier. Til løsning af differentiallyigningerne for strømning (2.1) og transport (2.7) anvendes finite difference metoder, idet de to differentiallyigninger sammenkobles via porevandshastigheden. Strømningsligningen løses i en iterativ, implicit procedure, mens transportligningen løses i en eksplicit procedure. Ved at Taylor-udvikle ligning (2.7) til 3. orden, idet der anvendes opstrøms differencer for den advektive transport og centrale differencer for den dispersive transport, kan massefluksen beregnes som funktion af den aktuelle koncentrationsfordeling og porevandshastighederne. Ved at udvikle (2.7) helt til 3. orden opnås en massebevarende løsningsprocedure, som endvidere er karakteriseret ved en meget lille numerisk dispersion. Der er knyttet flere stabilitetskrav til løsningsmetoden, som er bestemmende for modellens beregningstidsskridt. Videreudviklingen af SHE indenfor Lossepladsprojektets rammer er beskrevet i Ammentorp og Refsgaard (1991). De numeriske metoder til løsning af strømnings- og stoftransportligningerne er beskrevet nærmere i Refsgaard et al. (1992), mens det geokemiske grundlag er beskrevet i Engesgaard et al. (1992). SHE er velegnet til løsning af praktiske opgaver på grund af en tilhørende programpakke med omfattende pre- og postprocesseringsfaciliteter.

#### 4.2 HST3D

HST3D, som er udviklet af Kipp (1987), simulerer grundvandsstrømning og stoftransport i 3 dimensioner under hensyntagen til densitetsforskelle i grundvandet. Der anvendes finite difference metoder til løsning af differentiaalligningerne, hvilket specielt for transportligningen kan give anledning til numerisk dispersion. De to ligninger for strømning (2.3) og transport (2.7) er koblet sammen via porevandshastigheden og densitetens afhængighed af koncentrationen, således at strømningsligningen beregner porevandshastigheden, som danner grundlag for transportberegningerne, og stoftransportligningen beregner koncentrationsfordelingen, som bestemmer densitetsfordelingen og dermed etablerer grundlaget for strømningsberegningerne. De to differentiaalligninger er således tæt koblet, og der kræves iteration mellem ligningerne for at opnå en løsning. Modellen er meget beregningstung, specielt når alle 3 dimensioner og densitetsvariationer tages i regning.

#### 4.3 MOC

MOC-modellen, som er udviklet af Konikow og Bredehoeft (1978), beskriver 2-dimensional grundvandsstrømning og stoftransport. Modelbeskrivelsen er baseret på numeriske løsninger til differentiaalligningen for 2-dimensional strømning (2.2) og differentiaalligningen for 2-dimensional advektion-dispersion (2.11). De to differentiaalligninger kobles sammen via porevandshastigheden. Strømningsligningen approksimeres ved hjælp af finite difference metoder og løses i en iterativ alternating-direction implicit procedure. Transportligningen løses i to trin. Først beregnes den advective udbredelse ved hjælp af karakteristikmetoden ved løbende at følge et antal partiklers bevægelse langs strømlinierne. Herefter beregnes den dispersive transport ved at foretage en justering af partiklernes koncentration. Denne beregning foretages i en eksPLICIT finite difference procedure. Der er knyttet stabilitetskrav til de to numeriske løsningsprocedurer, hvilket er bestemmende for de tidsskridt, som anvendes

i modellen. Den numeriske løsningsmetode for stoftransportligninger giver anledning til en meget lille numerisk dispersion.

#### 4.4 UZ

UZ modellen, som er udviklet af Jensen (1983), er baseret på den én-dimensionale Richards' ligning og beskriver således den vertikale umættede strømning gennem de øvre jordlag. Ligningen diskretiseres ved hjælp af finite difference metoder, og løsningen fremskrives i et iterativt implicit skema. Modellen beregner den tidsmæssige variation i vandfluxen fra jordoverfladen til grundvandsspejlet som funktion af nedbør og potentiel evapotranspiration og dermed den sæsonmæssige variation i nedsivningen til grundvandsmagasinet. Ved hjælp af modellen er det derfor muligt at generere den øvre randbetingelse til en grundvandsmodel. Denne UZ model er i øvrigt stort set identisk med SHE's modul for umættet zone strømninger.

## 5. RESUMÉ AF DE UDFØRTE MODELUNDERSØGELSER

### 5.1 Modellering af forureningsspredning fra Vejen losseplads (M1), Jensen et al. (1991)

Med henblik på at beskrive strømningsforholdene omkring og forureningstransporten fra Vejen losseplads er alle ovenfor beskrevne modeller taget i anvendelse. Til beregning af ned-sivning af vand og lossepladsperkolat til grundvandsspejlet er anvendt UZ, MOC er anvendt til beregning af de regionale strømningsforhold, og ved hjælp af SHE er beregnet de lokale strømningsforhold i et mindre område omkring og nedstrøms lossepladsen på grundlag af randbetingelser genereret ved hjælp af MOC. Forureningstransporten fra lossepladsen er beregnet ved hjælp af SHE på grundlag af detaljerede 3-dimensionale strøm-ningsberegninger. HST3D er anvendt til at simulere effekten af forhøjede værdier af perkolatdensiteten på opblandingen med grundvandet.

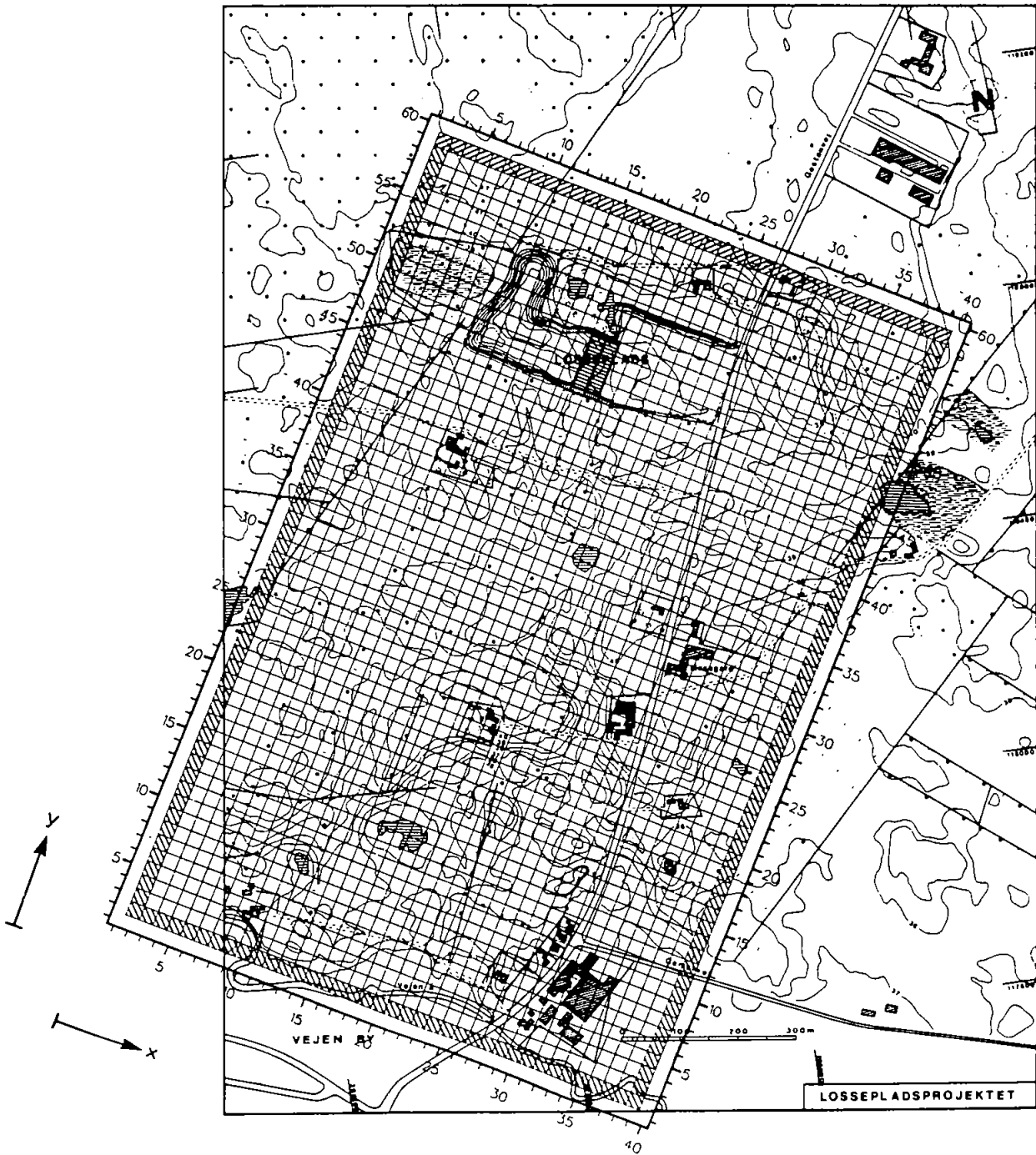
Beregningerne af strømnings- og transportforhold i det lokale område nedstrøms lossepladsen er baseret på en 3-dimensional kvantitativ sammenstilling af de geologiske data. Ud fra boredata og geofysiske sonderinger er der opstillet 13 geologiske profiler med forskellig orientering, Gravesen (1989), hvoraf det fremgår, at den øvre kvartære lagserie kan betragtes som et sandmagasin med indslag af ler- og siltlinser af lokal udstrækning. Indenfor det betragtede område er der i alt identificeret otte forskellige typer af indskudte lag, hvis vertikale udstrækning er digitaliseret ud fra de geologiske profiler. Den horisontale udstrækning af hvert lag er herefter estimeret ved en sammenstilling af profilerne samt det af Gravesen (1989) opstillede fence-diagram. Den horisontale udstrækning er ligeledes digitaliseret, hvorefter en digital 3-dimensional geologisk model er etableret ved interpolation af de diskrete data. Til hver lagtype er estimeret værdier for hydraulisk ledningsevne og magasintal ud fra tilgængelige data. Som udgangspunkt er det antaget, at de hydrauliske parametre er konstante indenfor de enkelte lag.



Den lokale numeriske model dækker et område på 1.5 km<sup>2</sup> omkring lossepladsen. Et 40 x 60 x 10 numerisk net (24.000 beregningspunkter) med netstørrelser på 25 m x 25 m x 2 m er anvendt til at diskretisere området, Figur 5.1 og Figur 5.2. Den vertikale diskretisering er valgt således, at de numeriske elementer følger grundvandspejlets hældning, og af numeriske hensyn har den øverste kasse en tykkelse på 4.5 m.

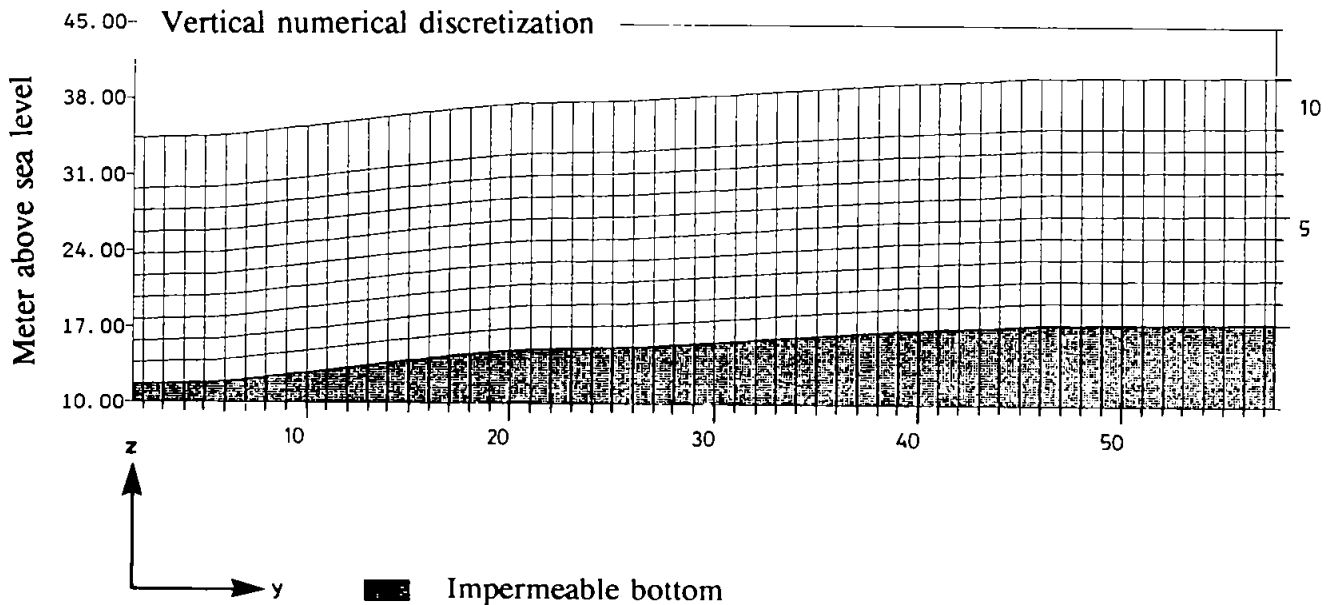
Nedsivningen til grundvandsmagasinet er simuleret ved hjælp af UZ, og grundvandsmodellen er herefter kalibreret mod målinger af hydraulisk trykniveau indenfor området. I denne kalibreringsproces er i overvejende grad justeret på de hydrauliske parametre for sandmagasinet indtil en acceptabel beskrivelse er opnået. Som et resultat af denne kalibrering er der bestemt et anisotropiforhold på 50 mellem horisontal og vertikal hydraulisk ledningsevne. I Figur 5.3 og Figur 5.4 er målte og simulerede hydrauliske trykniveauer sammenlignet som isokurver og tidsserier, og som det fremgår af figurerne er der god overensstemmelse mellem beregninger og målinger.

Under antagelse af stationære strømningsforhold er der foretaget simulering af spredningen af nedsivende forurening fra lossepladsen. Som indikatorparameter er anvendt klorid, idet der kun betragtes spredningen forårsaget af fysiske processer. Kloridkoncentrationen i perkolatet er sat til 900 mg/l (jfr. Kjeldsen, 1990), og det er endvidere antaget, at kun en mindre del af lossepladsen giver anledning til perkolatdannelse. I overensstemmelse med resultatet fra feltdispersionsforsøget (Bitsch et al., 1991) er der angivet meget små værdier for dispersivitetparametrene: langsgående horisontal dispersivitet  $\alpha_{LH}=0.46$  m, tværgående horisontal dispersivitet  $\alpha_{TH}=0.02$  m, langsgående vertikal dispersivitet  $\alpha_{LV}=0.05$  m og tværgående vertikal dispersivitet  $\alpha_{TV}=0.001$  m. I Figur 5.5 er den simulerede kloridfane vist sammen med de boringer, der i Kristiansen og Laier (1990) er tolket som perkolatpåvirkede. Det bemærkes, at der kun er delvis overensstemmelse mellem disse boringers placering og perkolatfanens forløb. Dette skyldes bl.a., at der optræder sekundære



Figur 5.1 Horizontal placering og diskretisering af den lokale numeriske model.

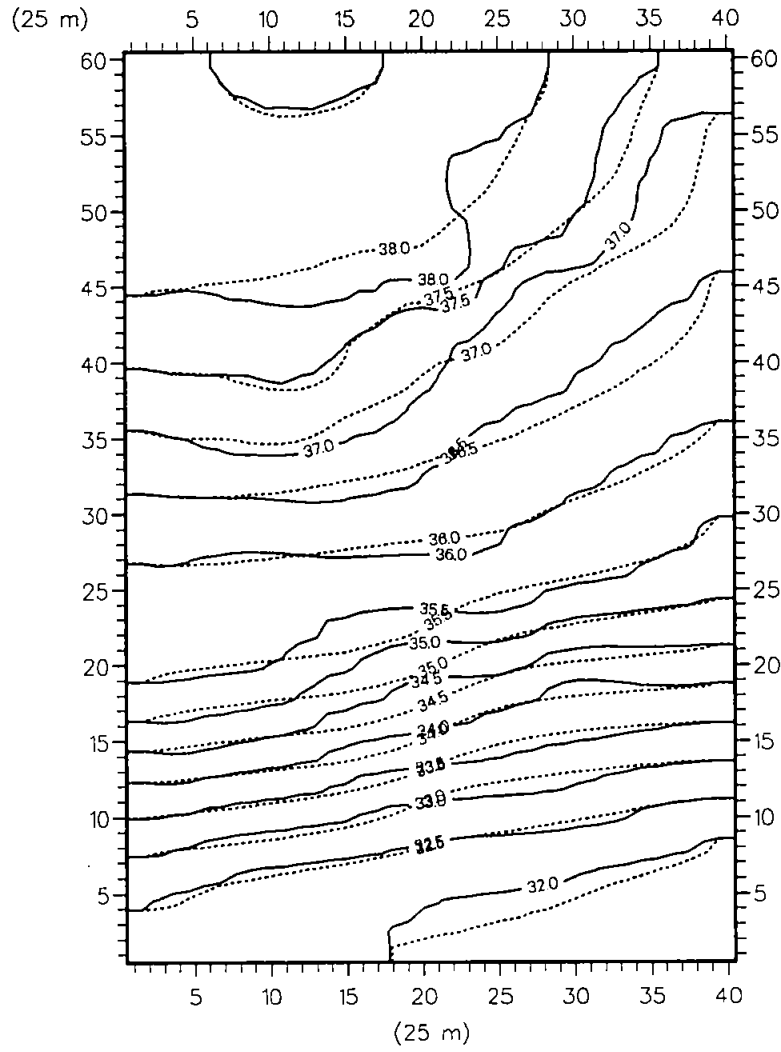
forureningskilder i områder, som ikke er medtaget i modelberegningerne. Som et væsentligt træk ved faneudbredelsen bemærkes den meget lille horisontale udbredelse.



Figur 5.2 Vertikal diskretisering af 3-dimensional model.

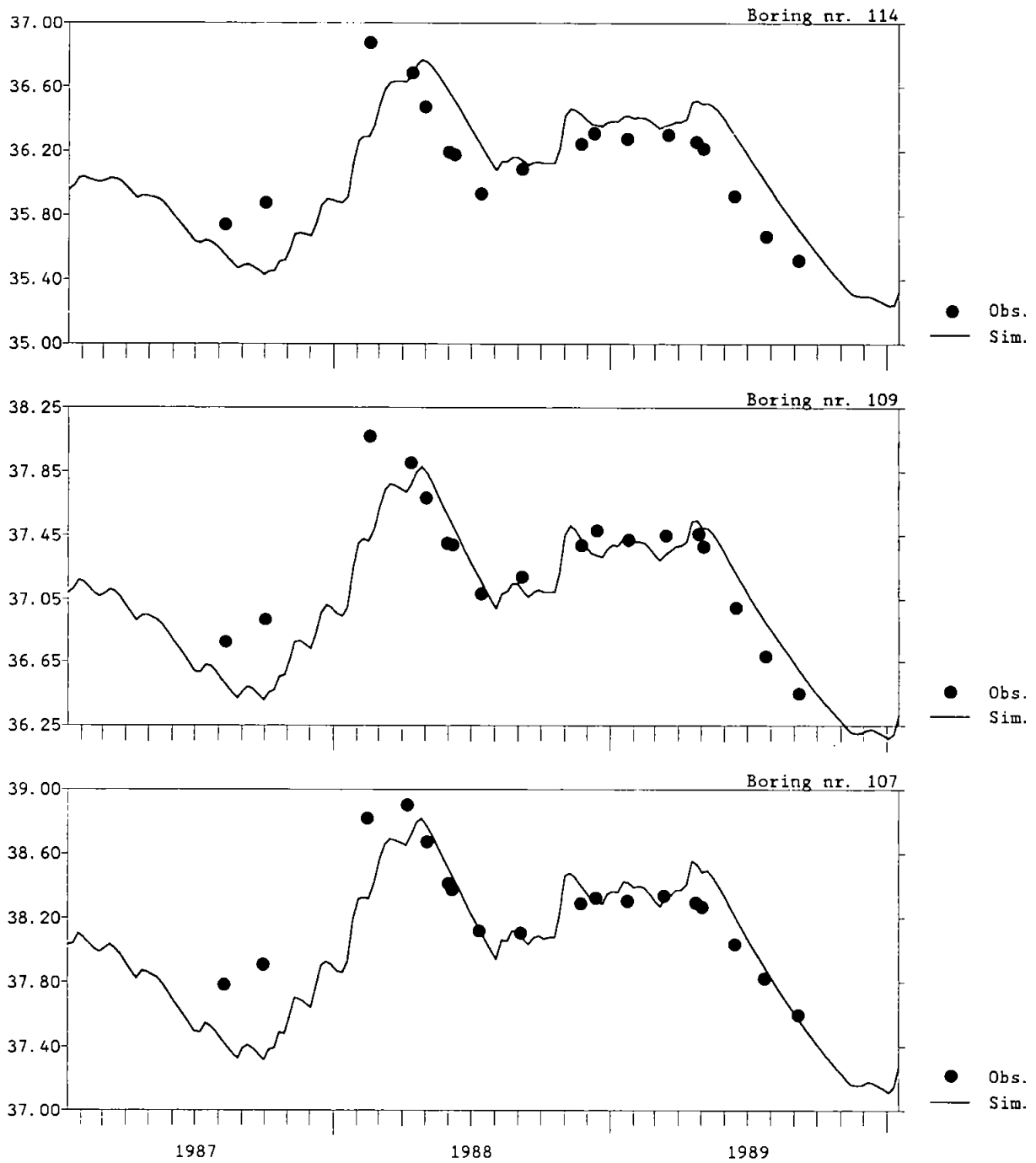
I Figur 5.6 er der vist sammenligninger mellem de observerede og simulerede koncentrationsfordelinger over dybden. Da observationsmaterialet ikke er særligt detaljeret, er sammenligningsgrundlaget spinkelt, men både observationer og simuleringer viser, at forureningsfanen er afgrænset over et forholdsvis snævert dybdeinterval.

Modelanalysen af forureningsspredningen fra lossepladsen har som det væsentligste resultat vist, at fanen er udsat for en meget lille dispersion både i horisontal og vertikal retning.

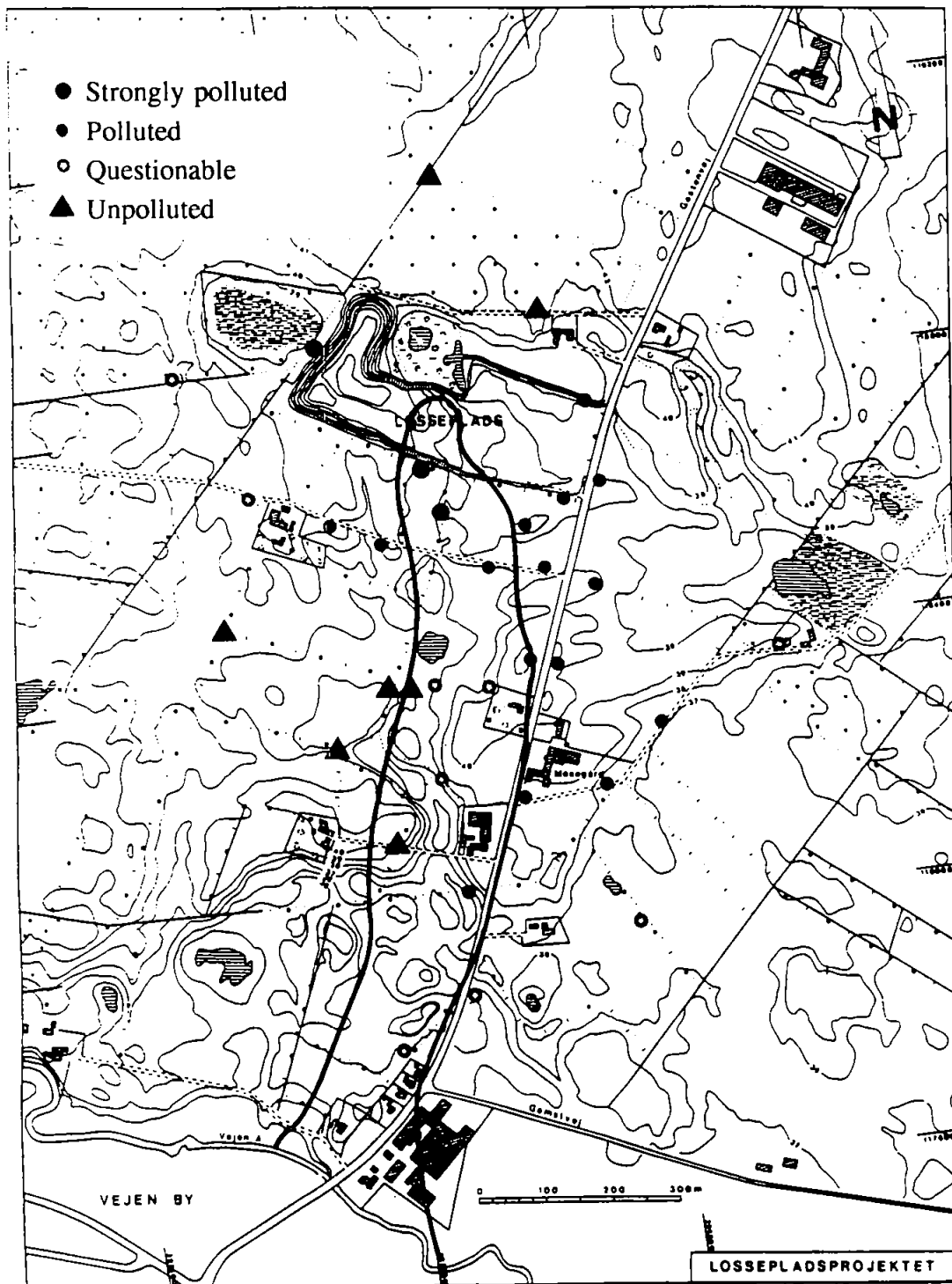


Figur 5.3 Observeret (—) og simuleret (----) hydraulisk trykniveau.

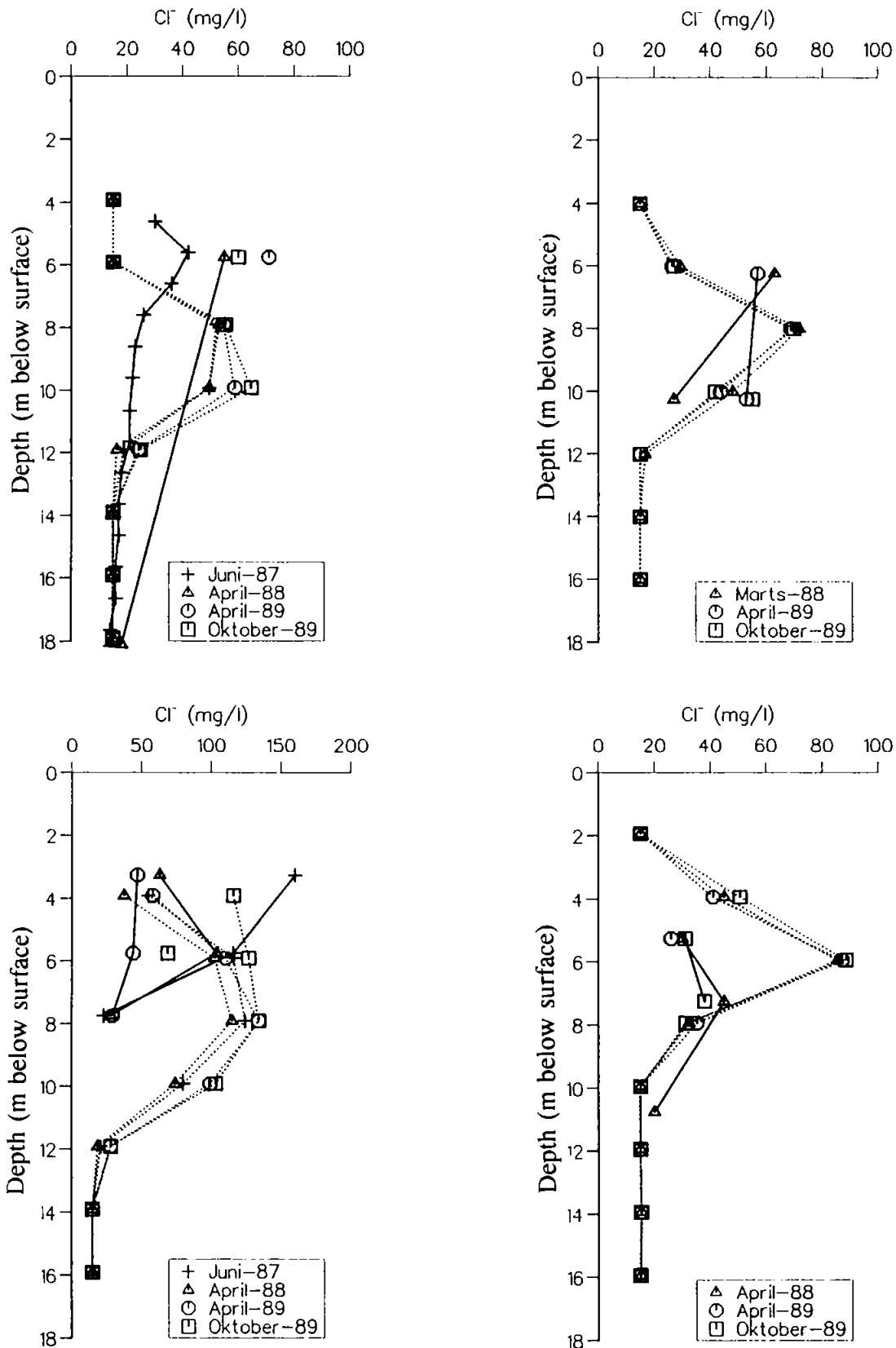
Hydraulic potential head  
(meter above sea level)



Figur 5.4 Observerede og simulerede fluktuationer i hydraulisk trykniveau.



Figur 5.5 Simuleret horisontal udbredelse af kloridfane (25 mg/l Cl<sup>-</sup>) og perkolatpåvirkede boringer.



Figur 5.6 Målte (—) og simulerede (---) koncentrationsprofiler.

## 5.2 Modellering af tracerudbredelse i Vejen injektionsfelt (M5), Bitsch et al. (1991)

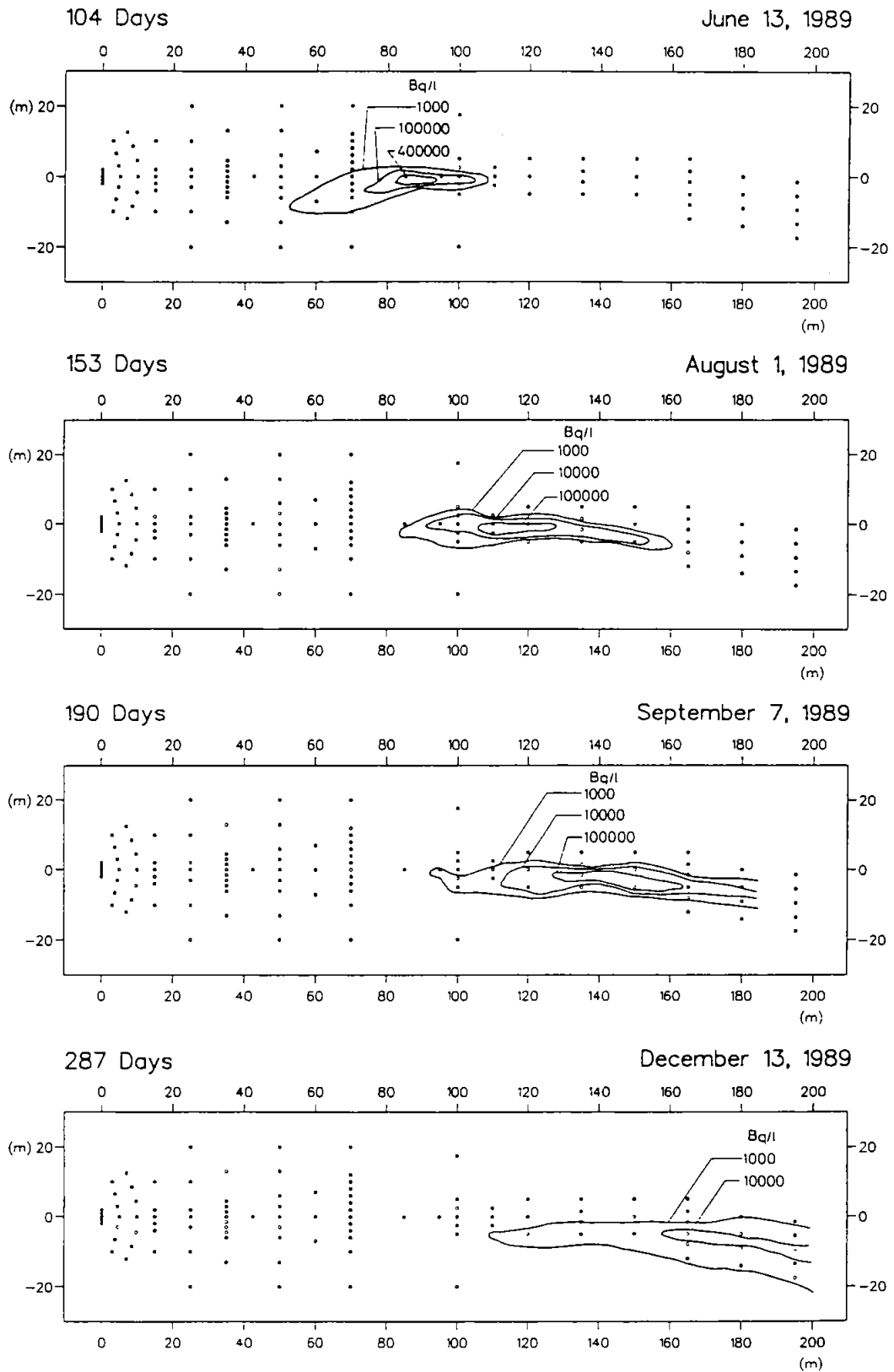
Ved Vejen injektionsfelt er der foretaget injektion af tritium og klorid med henblik på at undersøge transport- og dispersionsmekanismer i samme type grundvandsmagasin, som i området omkring Vejen losseplads. På grundlag af koncentrationsmålinger udført på et stort antal vandprøver, som er indsamlet fra et tæt net af observationsboringer, er der foretaget en kortlægning af de to tracerskyers vandring gennem tracerfeltet, Bitsch et al. 1991.

I Figur 5.7 og 5.8 er vist henholdsvis den horisontale og vertikale udbredelse af tritium til udvalgte tidspunkter. Som det fremgår af figurerne sker der en tydelig spredning af tracer i langsgående retning, som resulterer i en gradvis udstrækning af skyen med en heraf følgende formindskelse i maksimalkoncentrationer. Spredningen på tværs af hovedstrømningsretningen både i horisontal og vertikal retninger er derimod meget lille. Spredningen af kloridskyen udviser de samme karakteristika relativt set, men som følge af densitetseffekter er der sket en nedsynkning af skyen, således at massemidtpunktet er placeret dybere i grundvandsmagasinet end tilfældet er for tritiumskyen.

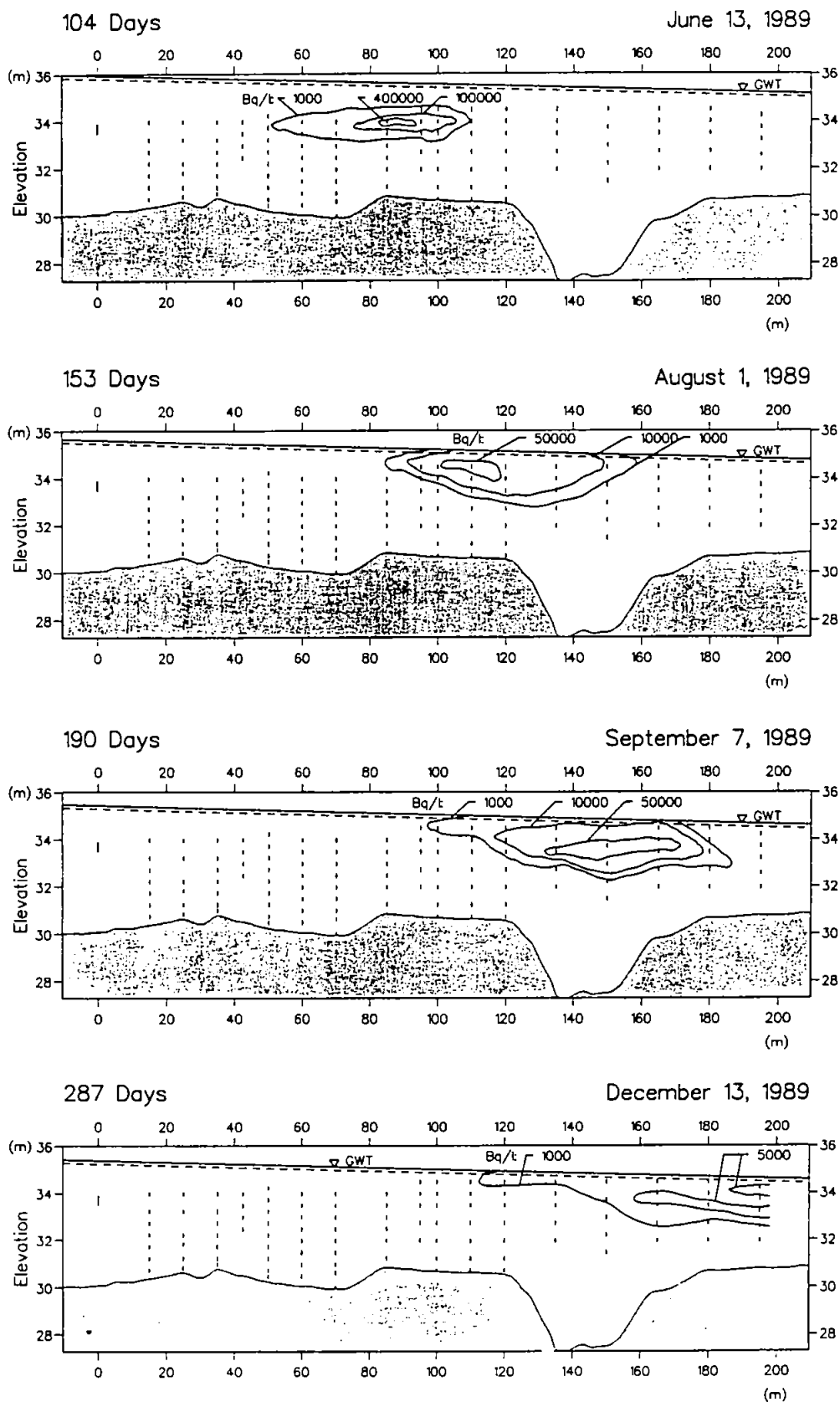
Der er foretaget en række geologiske og hydrogeologiske undersøgelser i tracerfeltet, Bjerg et al. (1991), som har dannet grundlag for opstilling af en 3-dimensional grundvandsmodel med henblik på at tolke de observerede tracerbevægelser. Forsøgsfeltet er inddelt i 220 x 30 beregningspunkter i horisontal planet og 9 beregningspunkter i vertikal retning med netstørrelser på henholdsvis 1.0 m og 0.5 m. I alt opereres med 59400 numeriske beregningspunkter, Figur 5.9.

Den øvre randbetingelse i form af nedsivning af nedbør er beregnet ved hjælp af UZ på grundlag af daglige observationer af nedbør og potentiel fordampning, og den nedre randbetingelse udgøres af et lerlag, som regnes impermeabelt. Langs de lodrette

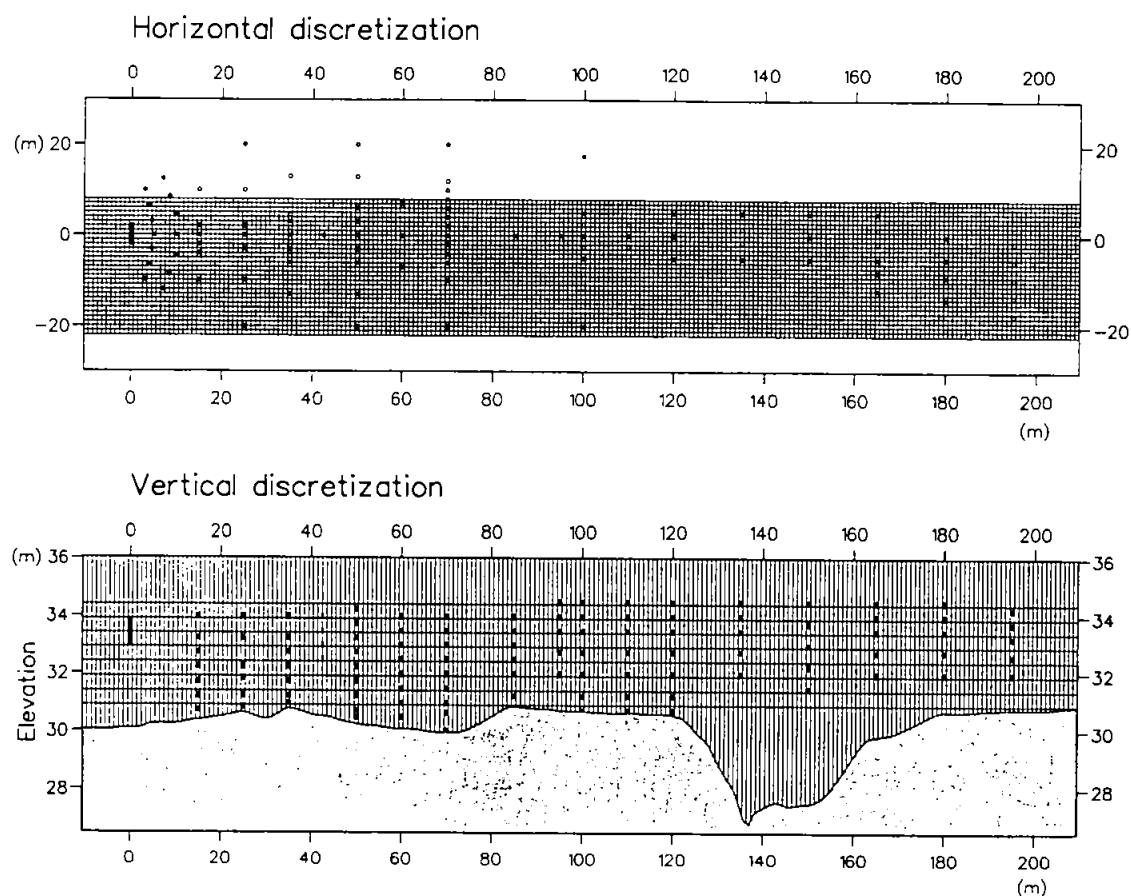




Figur 5.7 Horizontal udbredelse af tritium til udvalgte tidspunkter.



Figur 5.8 Vertikal udbredelse af tritium til udvalgte tidspunkter.

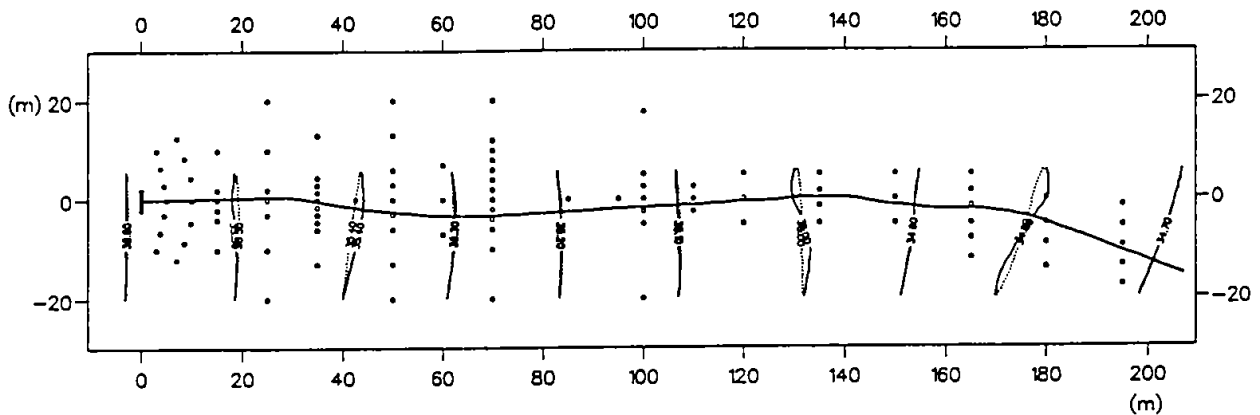


Figur 5.9 Horizontal og vertikal diskretisering.

rande angives det hydrauliske trykniveau under antagelse af hydrostatisk trykfordeling.

I området er identificeret 3 horisontale lagfølger af sandaflejringer, og i modellen forudsættes, at de hydrauliske parametre er konstante indenfor de enkelte lag. Disse værdier er bestemt som gennemsnit af en række punktmålinger i området. Trods denne forenkling af de hydrogeologiske forhold, er der opnået en meget fin overensstemmelse mellem observerede og simulerede hydrauliske trykniveauer, Figur 5.10 og 5.11.

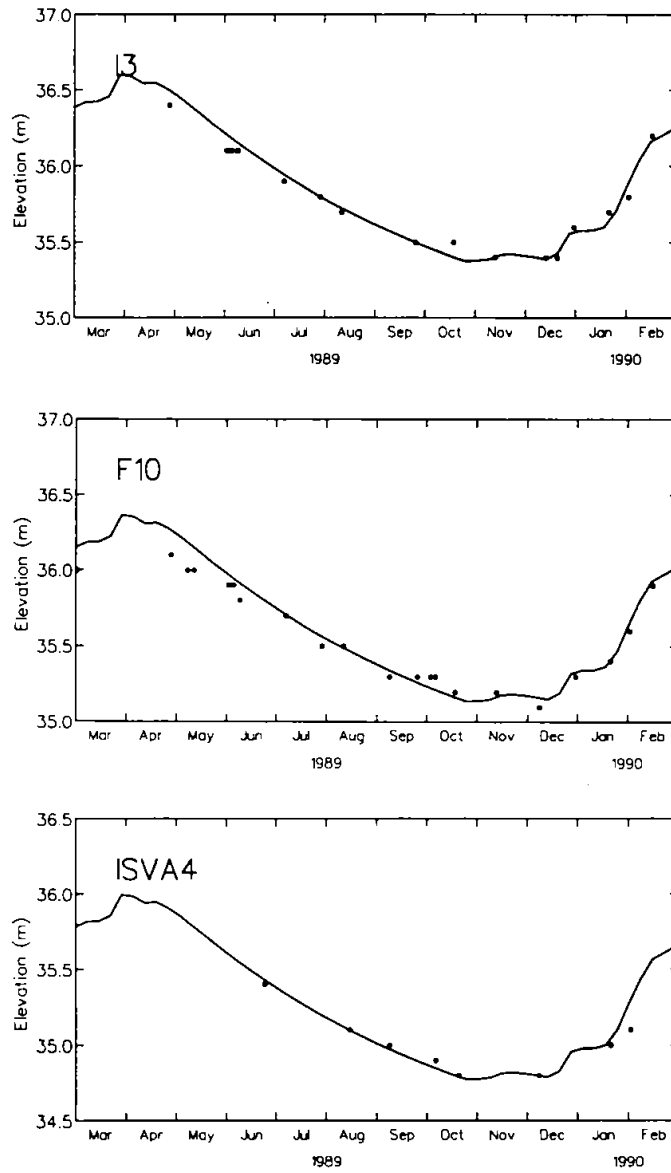
September 7, 1989



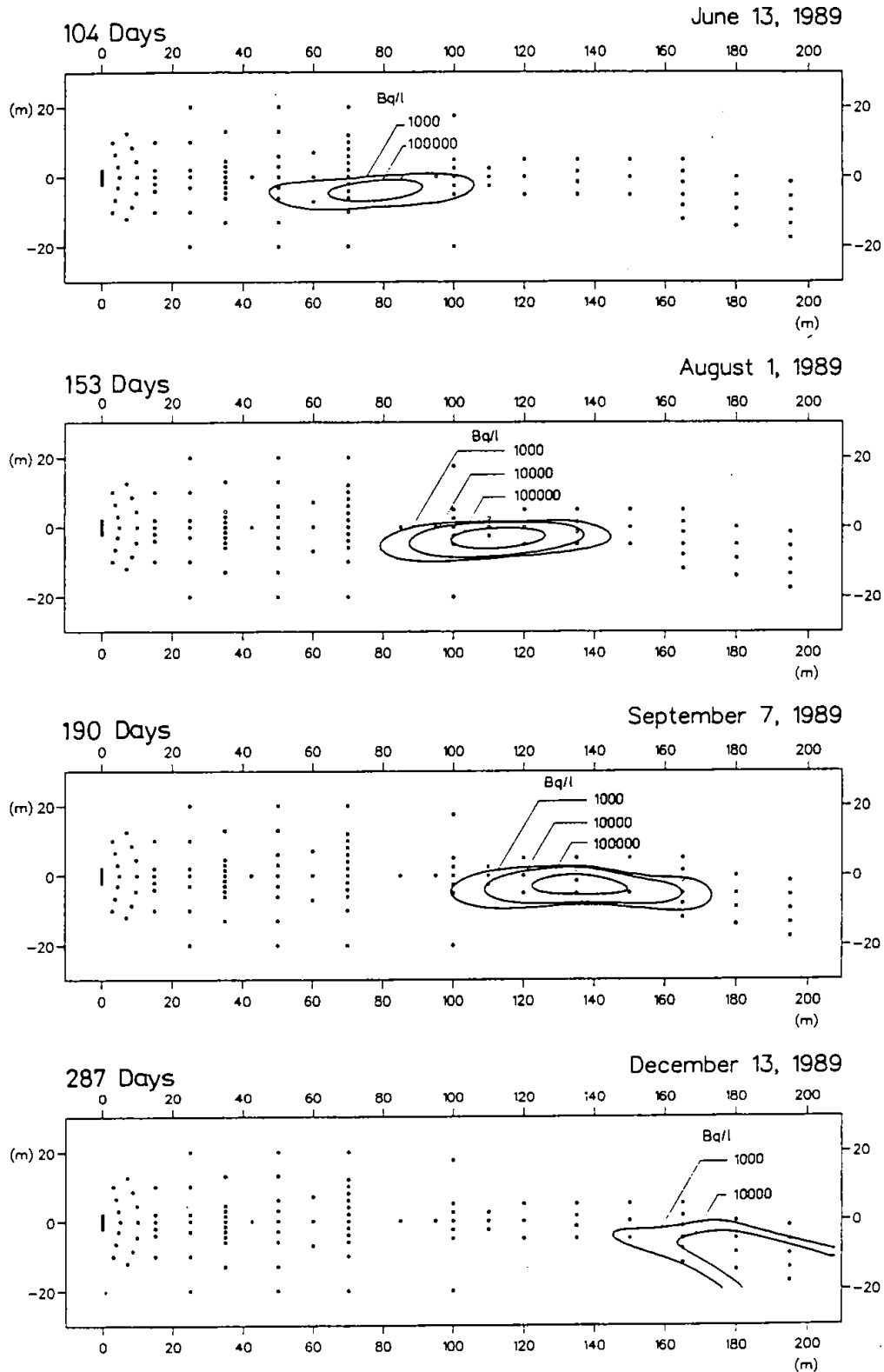
Figur 5.10 Observeret og simuleret grundvandsstand.

Herefter er der foretaget en kalibrering af dispersiviteterne, indtil der er opnået overensstemmelse mellem det observerede og simulerede transportforløb af tritium, Figur 5.12 og 5.13. Kalibreringen resulterede i følgende værdier for dispersiviteterne:  $\alpha_{LH}=0.45$  m,  $\alpha_{TH}=0.001$  m,  $\alpha_{LV}=0.05$  m og  $\alpha_{TV}=0.0005$  m. Det andet eksperiment, som involverede injektion af uorganiske kloridsalte, var udsat for en initial vertikal fortrængning som følge af densitetskontrast mellem tracer og grundvand. Kompenseres for dette problem ved at fordele traceren over dybden i selve injektionspunktet er det imidlertid muligt at opnå en god beskrivelse af det observerede udbredelsesforløb under anvendelse af samme værdier for dispersiviteterne som ovenfor.

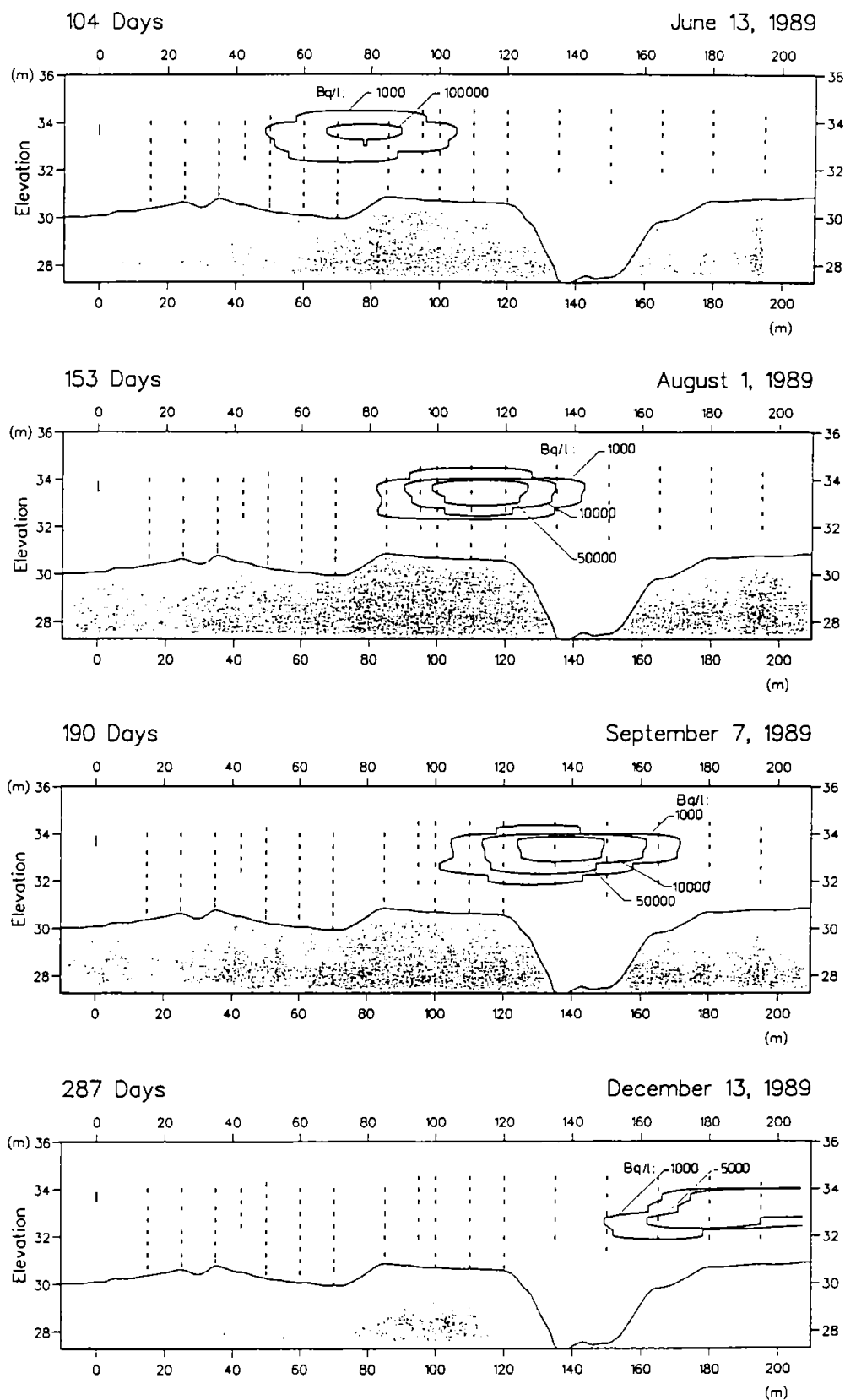
De parameterværdier for dispersiviteterne, som er bestemt i forbindelse med de to tracerforsøg er væsentligt lavere end de, som hidtil har været anvendt i ingeniørmæssig praksis. Imidlertid er de i overensstemmelse med resultater fra udenlandske tracerforsøg, og der er derfor stærke indicier for, at en forureningsfane opblandes i mindre grad end tidligere antaget, i hvert fald når der er tale om relativt homogene alluviale aflejringer.



Figur 5.11 Observeret og simuleret variation i grundvandsstand.



Figur 5.12 Simuleret horisontal udbredelse af tritium til udvalgte tidspunkter.



Figur 5.13 Simuleret vertikal udbredelse af tritium til udvalgte tidspunkter.

### 5.3 Modellering af uorganisk transport i Vejen injektionsfelt (P4), Bjerg et al. (1992)

Med henblik på at undersøge spredningen af uorganiske stoffer og ionbytningsprocesser under naturlige grundvandsstrømningsforhold samt at evaluere en 3-dimensional geokemisk transportmodel blev der gennemført et injektionsforsøg ved Vejen injektionsfelt. På baggrund af et omfattende måleprogram, som inkluderede hyppig udtagning af vandprøver fra en stort antal boringer samt analyser for forskellige kemiske parametre, er der foretaget en kortlægning af transport- og spredningsforholdene af de forskellige stoffer.

Injektionsvandets sammensætning af uorganiske ioner, som er vist i Tabel 5.1, er valgt, så det ligner perkolat fra en typisk dansk losseplads. Det fremgår af tabellen, at de dominerende ioner er klorid, natrium og kalium. I Figur 5.14 er udbredelse af de 3 injicerede stoffer vist, og som det fremgår af figuren, er udbredelsesmønstret forskelligt, idet kloridfanen tydeligvis spredes hurtigst. Natrium følger i starten klorid, men senere spredes det noget langsommere, mens kalium udviser en kraftig tilbageholdelse i hele perioden.

Tabel 5.1 *Injektionsvandets og det naturlige grundvands kemiske sammensætning*

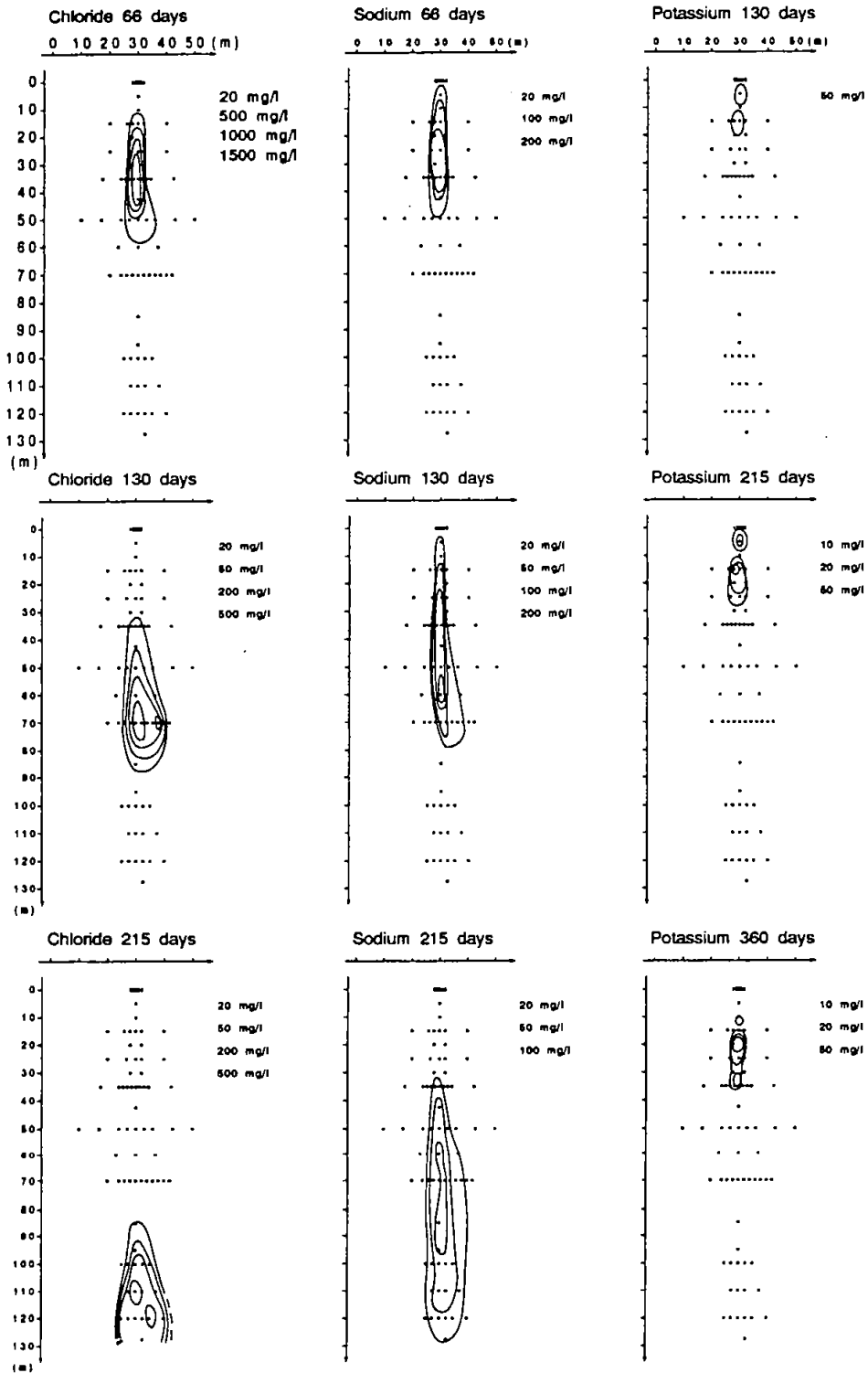
Parameter	Enhed	Injektionsvand	Grundvand
pH		6,9-7,2	5,5-7,5
Alkalinitet	mekv/l	1,6	0-4
Klorid	mg/l	6000	20-30
Calcium	mg/l	70	30-75
Magnesium	mg/l	3	30-50
Natrium	mg/l	2600	15-20
Kalium	mg/l	2000	15-65



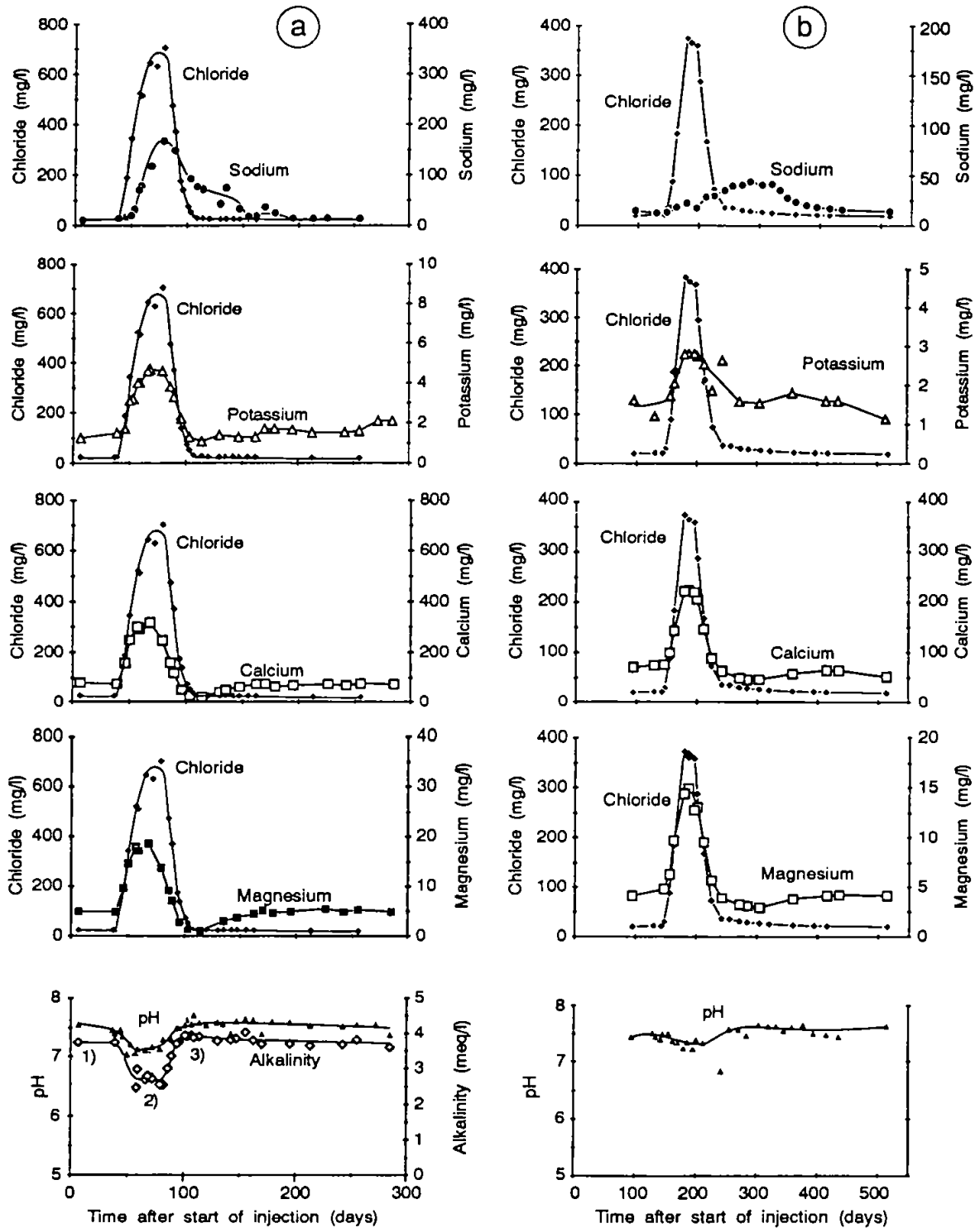
Tilbageholdelsen af natrium og kalium skyldes ionbytning, som er den dominerende geokemiske proces. Natrium og kalium ionbytter med calcium og magnesium, som initielt er bundet til sedimentet, og der dannes derefter både en calcium- og en magnesiumfane, som følger kloridfanens udstrækning. Dette forhold er illustreret i Figur 5.15, som viser gennembrudskurver for forskellige komponenter. Som det fremgår af figuren, bevæger det frigivne calcium og magnesium sig med samme hastighed som klorid. Samtidig bemærkes, at der sker et fald i koncentrationen til under baggrundskoncentrationen af disse to komponenter umiddelbart efter passagen af toppen, hvilket forklares med, at calcium og magnesium i det bagfra kommende grundvand bytter tilbage på sedimentet og dermed fragår vandfasen.

Gennem batchforsøg samt analyser af naturligt grundvand og sediment fra området er der foretaget en bestemmelse af forskellige kemiske karakteristika for de uorganiske stoffer, se Tabel 5.2. Disse kemiske karakteristika har derefter sammen med de målte udbredelsesmønstre været anvendt til evaluering af en 3-dimensionel geokemisk transportmodel. De fysiske og strømningsmæssige forhold er ikke ændret i modelsimuleringerne i forhold til det modelkoncept, der er anvendt under tolkningen af dispersionsforsøget med en konservative tracer (Bitsch et al., 1991).

Den opstillede 3-dimensionale strømnings- og transportmodel, som danner grundlag for den geokemiske model, er således identisk med den tidligere anvendte. Samtidig anvendes dispersiviteterne i de tre hovedretninger, som de er bestemt i dispersionsforsøget.



Figur 5.14 Den arealmæssige udbredelse af klorid, natrium og kalium vist ved integrerede koncentrationer over dybden til forskellige tidspunkter efter injektionsperiodens start.



Figur 5.15 Gennembrudskurver for klorid, natrium, kalium, calcium, magnesium og pH i to filtre 35 m (a) og 100 m (b) nedstrøms injektionsboringerne.

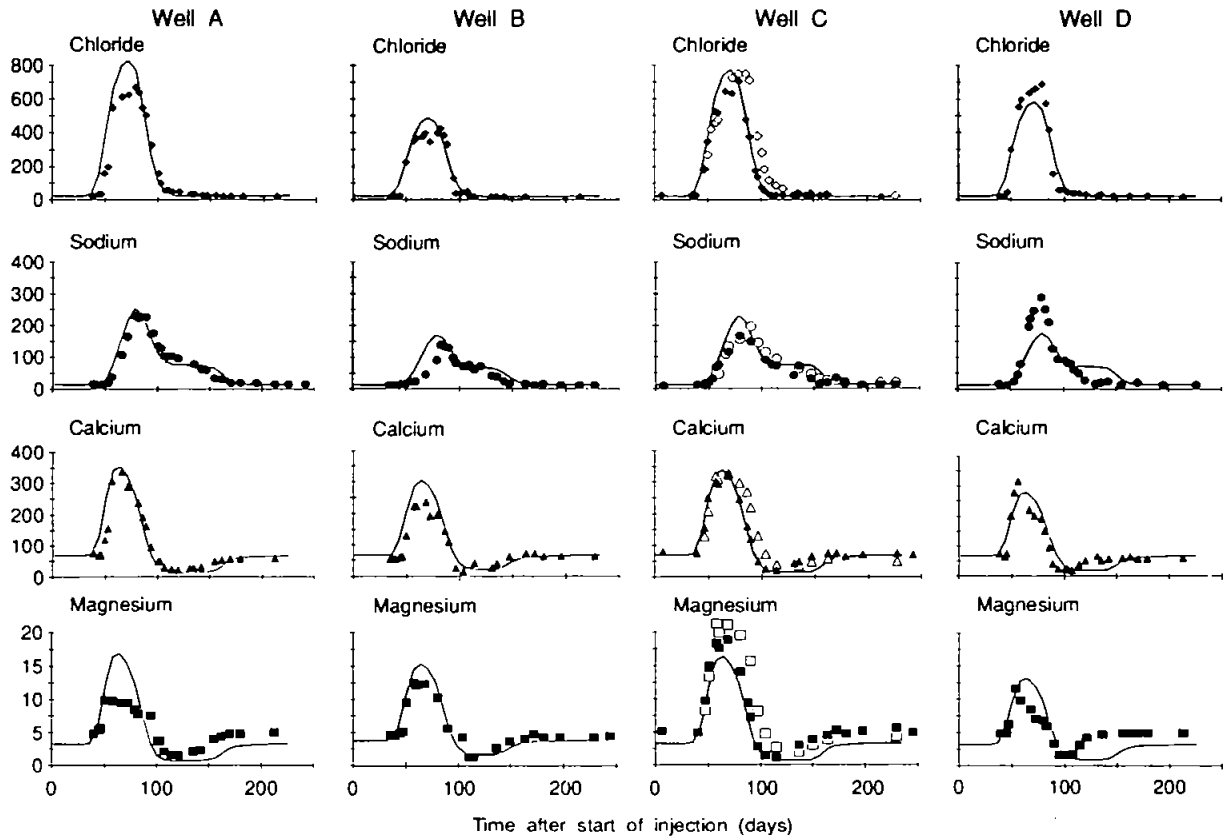
Tabel 5.2 Selektivitetskoefficienter bestemt på akvifer materialet fra Vejen injektionsfelt.

Enhed	CEC meq/100 g	$K_{Ca/Mg}$	$K_{Ca/Na}$ mol/l	$K_{Ca/K}$ mol/l
Baggrundsværdier	0.2-2.5	0.7-1	0.1-1	$1.0 \cdot 10^{-6}$ - $1.0 \cdot 10^{-3}$
Batchforsøg	-	-	0.1-31	0.001-0.1
Inputparametre i modellen	1	0.7-1	5	0.03

Den geokemiske model er opbygget som en ligevægtsmodel, der er i stand til at transportere flere stoffer under hensyntagen til forskellige kemiske reaktioner, f.eks. kationbytning, kompleksering samt opløsning/udfældning. Modellen er udviklet som et "add-on" modul til SHE-modellen, og systemet virker som et to-trins system, hvor transporten af stofferne findes ved løsning af advektions-dispersionsligningen uden hensyntagen til de geokemiske reaktioner, hvorefter den nye ligevægt findes ved iteration i det algebraiske ligningssystem, der beskriver de geokemiske processer.

Modelberegningerne, der som nævnt udelukkende er gennemført ved anvendelse af de målte geokemiske parametre, viser, som det fremgår af Figur 5.16, generelt god overensstemmelse mellem simulerede og observerede koncentrationer af både de injicerede og de fra sedimentet ionbyttede stoffer.

Samlet har undersøgelserne vist, at ionbytning er den dominerende geokemiske proces, som nødvendigvis må tages i regning ved analyse af forureningsspredning af uorganiske stoffer. Samtidig viser det sig, at den geokemiske model er i stand til at beskrive de væsentligste processer ved udelukkende at anvende målte fysiske og kemiske parametre som grundlag.



Figur 5.16 Gennembrudskurver for klorid, kalium, calcium og magnesium i 4 filtre placeret 35 m nedstrøms injektionsboringerne. Den fuldt optrukne linje angiver modelsimuleringen, mens symbolerne angiver feltobservationerne.

#### 5.4 Modellering af tracerudbredelse i kalkmagasin ved Karlstrup (M3), Brettmann og Jensen (1992)

Med henblik på at undersøge de hydrauliske og transportmæssige forhold i et kalkmagasin er der foretaget feltundersøgelser omfattende hydrauliske test og tracerforsøg ved en lokalitet nær Karlstrup. Kalkbjergarter er karakteriseret ved en dobbeltporøs struktur med et sprækkedomæne, som har en porøsitet af størrelsesordenen 0.1-2.0% af bjergartsvoluminet, og et matrixdomæne med en porøsitet af størrelsesordenen 20-40%.

Da den hydrauliske ledningsevne i sprækkerne er flere størrelsesordener større end i den omgivende matrix, er vandtransporten i hovedsagen knyttet til sprækkedomænet. Opløste forurenende stoffer, som følger med grundvandet, føres med stor hastighed gennem sprækkesystemet som følge af den meget lille porøsitet. Samtidig hermed sker der en udveksling af stof ved diffusion mellem sprækker og matrix i samme øjeblik, der optræder koncentrationsforskelle mellem de to domæner, se f.eks. Freeze og Cherry (1979). Transport og spredning af opløste forureningsstoffer er derfor meget anderledes i opsprækkede formationer end i alluviale aflejringer.

Feltundersøgelserne er gennemført indenfor rammerne af projekt H9 (Jacobsen, 1991), hvorimod tolkningen af transport- og spredningsmekanismerne i det undersøgte grundvandsmagasin er foretaget som led i projekt M3, (Brettmann og Jensen, 1992).

Undersøgelsesområdet har en udstrækning på 80 x 120 m indenfor hvilket, der er etableret 10 boringer. I disse er der udført Separations-Injektions-Test med henblik på at bestemme fordelingen af hydraulisk ledningsevne, og der er foretaget målinger af trykniveauet. Videre er der foretaget to kortvarige prøvepumpninger og udtaget uforstyrrede sedimentprøver, som tilsammen muliggør bestemmelse af sprække- og matrixporøsitet.

Der er udført to sporstofforsøg i området ved at separationsinjektore sporstof i form af lithium (LiCl) over et dybdeinterval i en boring og efterfølgende observere koncentrationsforløbet i fem niveauer i en nedstrømsbeliggende boring, hvor der er installeret fem pumper. Gennembrudskurverne har alle et asymmetrisk forløb karakteriseret ved et hurtigt gennembrud og langsom aftagen, hvilket er indicier på, at transporten foregår i et opsprækket system.

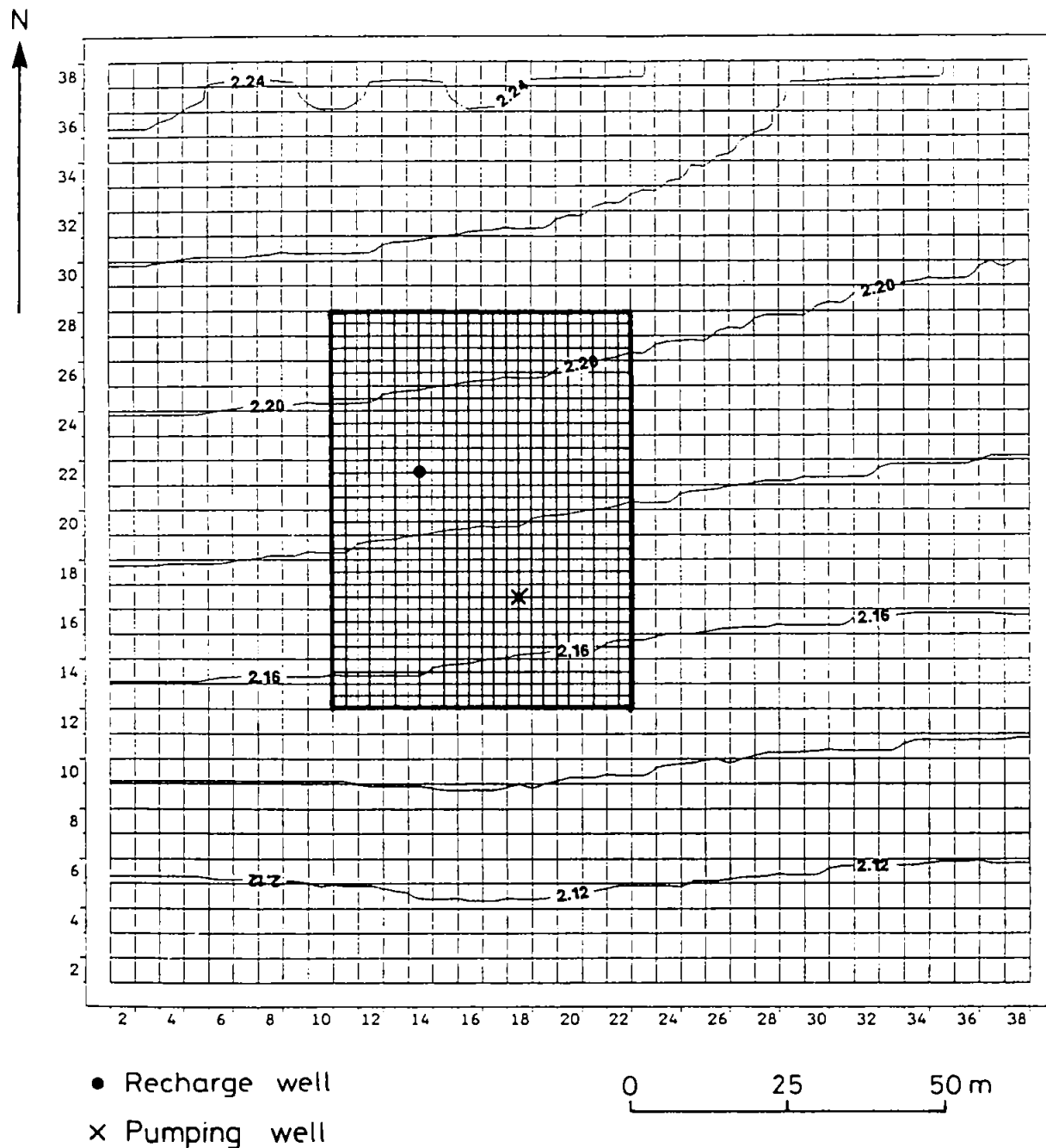
Med henblik på at etablere en sammenhængende beskrivelse af strømnings- og transportforholdene i det undersøgte område er der opstillet en 3-dimensional grundvandsmodel. Der er taget

udgangspunkt i SHE-systemets grundvandsmodel, men for at kunne beskrive stofudbredelsen i en opsprækket bjergart er modellen udbygget, således at vandfasen opdeles i en mobil og ikke-mobil komponent, ligning 2.12.

Strømningen beskrives i et modelnet, som dækker et område på ca. 150 x 150 m omkring forsøgsfeltet, hvorimod stoftransporten kun simuleres i et mindre område af hensyn til computertiden, Figur 5.17. Strømningsmodellen indeholder 38 x 38 x 9 numeriske elementer, som har en størrelse på 4 x 4 x 2.2 m, Figur 5.17 og 5.18. I modelområdet for stoftransport anvendes en horisontal diskretisering på 2 x 2 m.

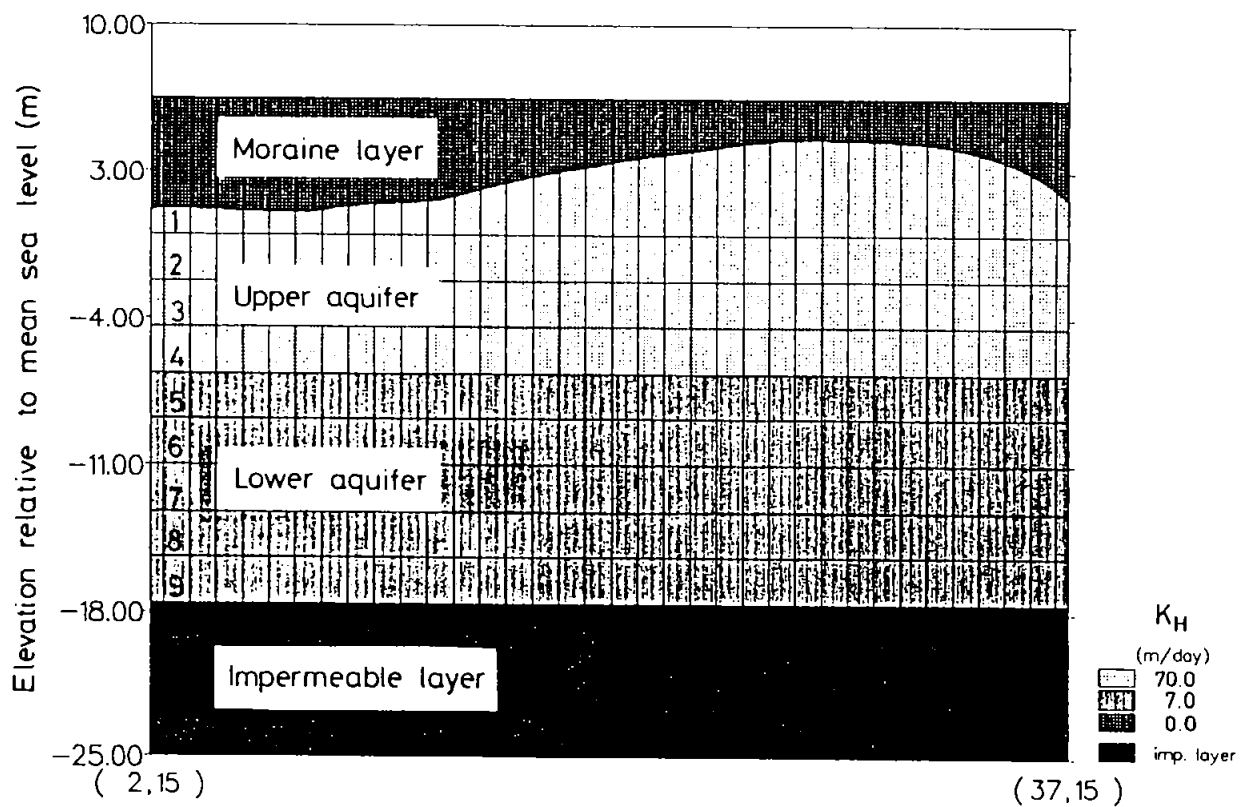
De geologiske forhold i området er i modellen repræsenteret ved en øvre 10 m dyb mere permeabel zone og en nedre mindre permeabel zone af ca. 9 m's dybde. Som udgangspunkt er der antaget en forskel i hydrauliske ledningsevne mellem de to horisonter på en faktor 10, hvorefter der er foretaget mindre justeringer ved at kalibrere mod målte trykniveauer i borerne indenfor området.

Transportparametrene er kalibreret mod de gennembrudskurver, som er opnået i tracerforsøgene. I første omgang blev der forsøgt anvendt en traditionel enkeltporøsitetsmodel, hvor stoftransporten udelukkende foregik i sprækkesystemet. Som det fremgår af Figur 5.19 resulterede det i for hurtige transporttider og for høje koncentrationer. Introduceres en dobbeltporøsitetsbeskrivelse i modellen, er det derimod muligt at opnå en god beskrivelse af de observerede koncentrationer. I den forbindelse har det været nødvendigt at introducere en værdi for matrixporøsiteten, som er mindre end den målte, for at kunne beskrive de målte gennembrudskurver. Den fysiske forklaring på dette forhold er, at kun en mindre del af matrixporøsiteten deltager aktivt i diffusionsudvekslingen mellem de to domæner.

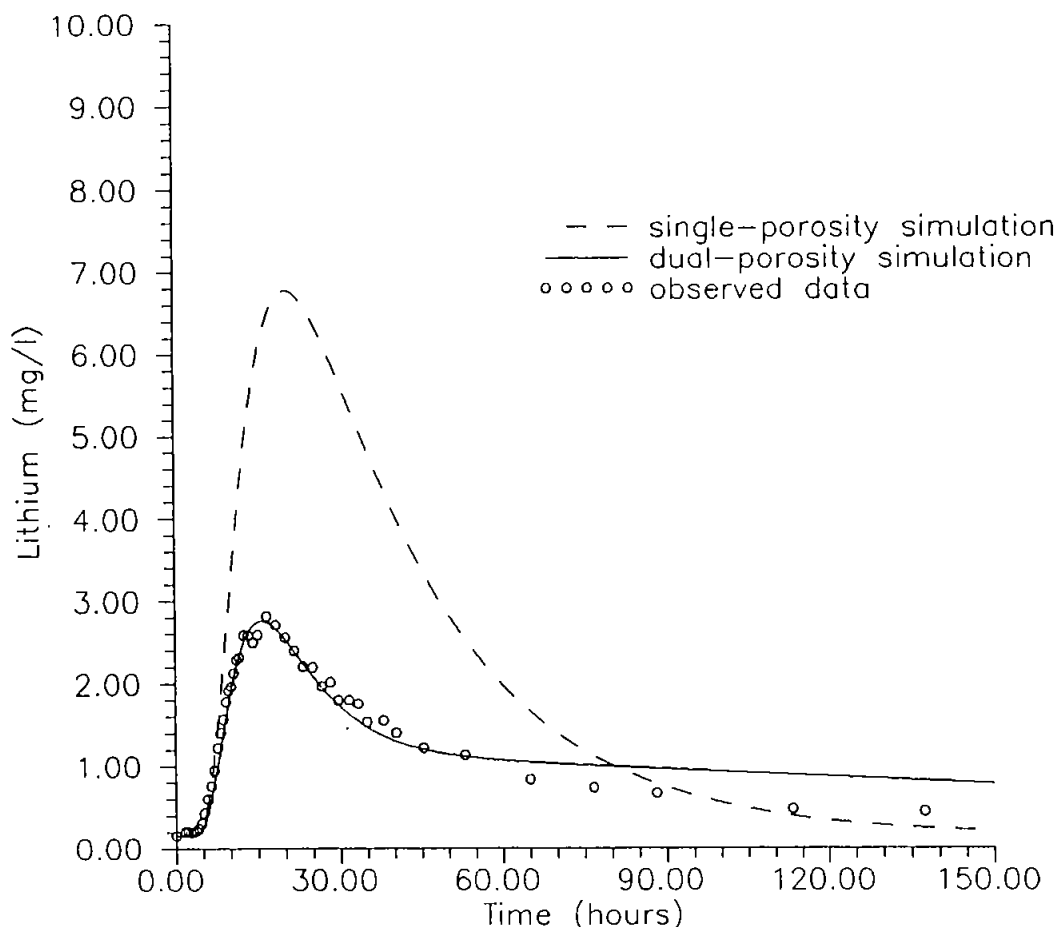


Figur 5.17 Modelområde med horisontal diskretisering for vandstrømning (groft net) og stoftransport (fint net) samt simuleret trykniveaubillede forud for sporstof-forsøget.





Figur 5.18 Vertikal diskretisering og overordnet fordeling af hydraulisk ledningsevne.



Figur 5.19 Observerede og simulerede gennembrudskurver (enkelt- og dobbeltporositetsmodeller).

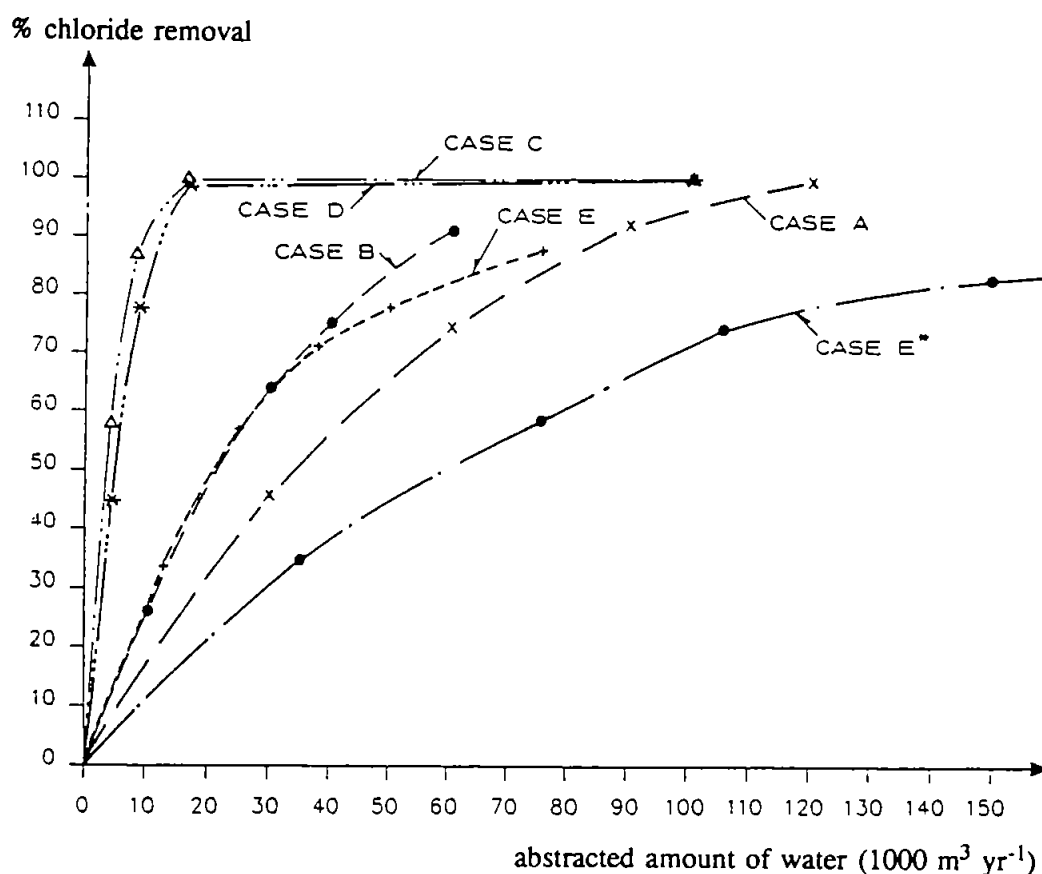
### 5.5 Modellering af afværgeforanstaltninger (R4), Refsgaard og Sørensen (1991)

Med henblik på at undersøge effektiviteten af forskellige hydrauliske afværgeforanstaltninger på forureningsudbredelsen fra Vejen losseplads er den opstillede og kalibrerede strømnings- og stoftransportmodel taget i anvendelse. De fysiske (geologiske) samt strømnings- og transportmæssige forhold er således anvendt uændrede i forhold til modelleringen af forureningsudbredelsen (Jensen et al., 1991). Der er dog her anvendt en lidt grovere modelopstilling med et 20 x 30 x 10 numerisk net med netstørrelser på 50 m x 50 m x 2 m til at diskretisere området.

Under antagelse af stationære strømningsforhold og med den i 1990 simulerede forureningsudbredelse som udgangspunkt er der foretaget simuleringer af perkolatspredningen under 5 alternative afværgeforanstaltninger. De 5 afværgeforanstaltninger har inkluderet:

- A - oppumpning langt fra lossepladsen
- B - oppumpning tæt ved lossepladsen
- C - hydraulisk fiksering af forureningskilden
- D - fysisk afskærmning af lossepladsen
- E - separationspumpning

For hver af afværgeforanstaltningerne er der foretaget beregninger af stoffjernelsen som funktion af ydelsen på afværgeboringerne, hvilket har resulteret i de i Figur 5.20 viste "effektivitetskurver".



Figur 5.20 Effektivitetskurver for de forskellige afværgeforanstaltninger.

Den traditionelle afværgeforanstaltning med placering af afværgeboringer relativt langt fra forureningskilden med efterfølgende oppumpning af store vandmængder med små koncentrationer viser sig i dette tilfælde at være den mindst effektive foranstaltning. En placering af boringer tæt på kilden eller anvendelse af separationspumpningsteknikken kræver flere forundersøgelser, men til gengæld skal der efterfølgende pumpes op til 50% mindre vand bort fra reservoiret for at opretholde samme rensningsgrad som ved oppumpning langt fra kilden. Samtidig vurderes det dog, at oppumpning langt fra kilden er den mest "sikre" metode, hvis forureningsudbredelsen er usikkert bestemt, idet risikoen for, at forureningsfanen bevæger sig forbi afværgeboringerne, er mindre end hvis disse er placeret tæt på forureningskilden.

Hvis forureningsfanen har en begrænset udstrækning i vertikal retning kan separationspumpning komme på tale som afværgeteknik. Ved denne metode filtersættes over hele det forurenede magasins tykkelse, hvorefter der placeres flere pumper i filtret. Pumpernes ydelser tilpasses, så der opstår et eller flere vertikale vandskel, som afgrænser fanen, hvorefter en del af det oppumpede vand er uforurenat, mens resten har en højere forureningsgrad end ved oppumpning med kun en pumpe.

Under visse geologiske og strømningmæssige omstændigheder kan mere avancerede afværgeteknikker vise sig at være særdeles effektive sammenlignet med mere traditionelle metoder. En styring af grundvandsspejlet under forureningskilden v.h.j.a. afværgeboringer opstrøms kilden, hvorfra der oppumpes rent grundvand, som efterfølgende injiceres nedstrøms kilden, kombineret med en oppumpning af det nedsivende perkolat viser sig at være op til 10 gange så effektiv som en afværgepumpning langt fra kilden. Ligeledes vil en nedramning opstrøms kilden af en fysisk barriere ned til en eventuel lavpermeabel horisont kombineret med en mindre oppumpning af det nedsivende perkolat være en ganske effektiv afværgeforanstaltning. Som nævnt kræver disse metoder

dog specielle gunstige geologiske forhold, ligesom forundersøgelsesarbejdet vil være relativt stort.

Modelanalysen har således som det væsentligste resultat vist, at effektiviteten af forskellige afværgeforanstaltninger i form af renselsesgrad som funktion af nødvendig afværgeoppumpning kan udvise stor variation. Valget af afværgemetode beror primært på områdets geologiske og hydrogeologiske struktur, forureningskildens karakteristika, forureningsudbredelsen samt detaljeringsgraden i de udførte forundersøgelser.

## 6. 2- ELLER 3-DIMENSIONAL MODELLERING

Feltundersøgelserne omkring Vejen losseplads har klart dokumenteret, at forureningsfanens udbredelse i det underliggende grundvandsmagasin foregik indenfor snævre områder både i horisontal og vertikal retning. I forhold til lossepladsens arealmæssige udstrækning og længden af transportvejen er der tale om en meget lille spredning, hvilket er overraskende i relation til den gængse opfattelse af transport- og dispersionsforhold. Lossepladsens længde på tværs af strømningsretningen er ca. 450 m, mens fanens bredde er ca. 200 m. Tilsvarende er tykkelsen af de øvre kvartære aflejringer af størrelsesordenen 20 m, hvoraf kun et interval af ca. 5 m's tykkelse er påvirket af forurening. Lignende forhold blev observeret ved det nærtliggende tracerfelt, hvor der ligeledes blev konstateret en meget lille spredning i transversale retninger.

Indenfor rammerne af Miljøstyrelsens NPO projekt blev foretaget feltundersøgelser af spredningen af nitrat og tritium i grundvandsoplandet hørende til Rabis bæk. I den forbindelse blev ligeledes konstateret, at forureningsfanerne er afgrænset indenfor relativt korte vertikale intervaller som følge af en ikke særlig effektiv vertikal opblanding.

Den meget beskedne spredning i specielt den vertikale retning, som blev dokumenteret i disse undersøgelser, er dog ikke enkeltstående tilfælde, idet en række udenlandske forsøg og observationer har dokumenteret samme fænomen (se f.eks. Mackay et al., 1986; Garabedian et al., 1991; Friend et al., 1989). De fleste undersøgelser og observationer har været foretaget i alluviale og relativt homogene sandede aflejringer, men meget tyder dog på, at den ofte benyttede approksimation, at forureningen kan regnes jævnt fordelt over dybden efter en transportafstand på ca. 10 gange den mættede lagtykkelse (jfr. Bear, 1979), forekommer at være stærkt overdreven.

De fleste modelundersøgelser til dato har behandlet grundvandsforurening som et 2-dimensionalt horisontalt problem, hvor forureningen regnes jævnt fordelt over den mættede lagtykkelse. Udgangspunktet for transportberegningerne er hermed de velkendte 2-dimensionale numeriske strømningssmodeller, som beskriver grundvandsstrømninger på grundlag af oplysninger om transmisivitetsfordelingen. Denne type af modeller har traditionelt været anvendt til vandressourceopgørelser og herunder konsekvensvurderinger af grundvandsindvindinger, og det har derved været naturligt at basere transport- og spredningsberegningerne på dette grundlag. Den mest anvendte model af denne type er MOC-modellen udviklet af U.S. Geological Survey (Konikow og Bredehoeft, 1978).

For så vidt angår vandstrømningssberegninger og herunder konsekvensvurderinger af forøget grundvandsindvinding er 2-dimensionale numeriske modeller i mange situationer velegnede værktøjer, når der er tale om forholdsvis ensartede geologiske forhold som tilfældet er i Vejen området. Derimod vil en meget kompliceret geologisk opbygning, hvor der optræder flere forskellige typer af reservoirer, og hvor der sker vandudveksling mellem de enkelte reservoirer og vandløb kræve anvendelse af enten en flerlags- eller 3-dimensional model og ofte endog en integreret overfladevands-grundvandsmodel, for at tilvejebringe pålidelige forudsigelser af indgreb i systemet. Eksempler på sådanne modelbeskrivelser er Suså undersøgelsen (Refsgaard og Stang, 1981) og modelundersøgelsen i Århus amt (DHI, 1989).

I konsekvens af at en forureningsfane normalt er udsat for en meget beskeden vertikal opblanding, vil 2-dimensionale modeller i de fleste tilfælde ikke give et realistisk billede af koncentrationsfordelingen i grundvandet, og 3-dimensionale modeller er derfor påkrævet. I litteraturen skelnes mellem begreberne "resident" og "flux" koncentrationer (Parker og van Genuchten, 1984), som repræsenterer henholdsvis den koncentration, som kan måles i en mindre vandprøve udtaget i et givet punkt i reservoir, og koncentrationen i en indvindingsboring, hvor der er

sket en fluxmidling over det filtersatte interval. Hvis der ønskes foretaget vurderinger af "resident" koncentration er en 3-dimensional modelbeskrivelse som tidligere beskrevet påkrævet, hvorimod "flux" koncentration i indvindingsboringer i nogle tilfælde kan beregnes ved hjælp af en 2-dimensionale model, idet denne modeltype foretager en fluxmidling over den mættede lagtykkelse. En 2-dimensional model kan dog kun retfærdiggøres i det tilfælde, hvor der ikke forekommer markante forskelle i de hydrauliske forhold over dybden, og hvor boringen er filtersat over hele dybden.

Ved kemisk modellering vil det i realiteten altid være nødvendigt at tage hensyn til koncentrationsvariationer over dybden, fordi de kemiske ligninger er stærkt ikke-lineære og derfor ikke blot kan bruges på gennemsnitskoncentrationer. Det må derfor forventes at praktisk anvendelighed af kemisk modellering vil være betinget af 3-dimensional modellering.

Et vigtigt aspekt i spørgsmålet om 2- eller 3-dimensional modellering er gennemskueligheden af modelforudsætninger og -resultater for personer uden detailkendskab til matematiske modeller. Det er en helt klar generel erfaring, at det tværfaglige samspil mellem bl.a. "feltfolk" og "modelfolk" (læs: geologer og ingeniører) er meget mere frugtbar, når der arbejdes med 3-dimensionale modeller. Det skyldes utvivlsomt, at 3-dimensionale modeller kan benytte eksisterende geologiske informationer som direkte inputdata. Det er dermed muligt, at udnytte den væsentligste styrke ved en model, nemlig at den på kvantitativ form kan bruges til at teste, hvordan alternative geologiske hypoteser er i overensstemmelse med eksisterende hydrogeologiske data, og hvilken effekt usikkerhed om geologiske forhold får på usikkerheder for f.eks. forureningsspredning.

Det tilgrundliggende datagrundlag for stoftransportmodellering er geologiske informationer, som i mere eller mindre fuldstændig form findes som 3-dimensionale data. Eftersom sådanne data altid bør inddrages som grundlag for en modelopstilling, vil det i



praksis ikke være væsentligt mere ressourcekrævende at opstille og anvende en fuld 3-dimensional model sammenlignet med en 2-dimensional model. Dette kræver dog, at det nødvendige støtteprogram er til stede, jfr. Kapitel 15.

Det kan derfor konkluderes, at beskrivelse af forurenings-spredning som hovedregel altid bør ske i form af en 3-dimensional model. Muligheden for at anvende 3-dimensionale modeller i praksis diskuteres nærmere i de efterfølgende kapitler.

## 7. GEOLOGISKE OG HYDRAULISKE PARAMETRE

En af hovedkonklusionerne, som er fremkommet som resultat af modelaktiviteterne indenfor Lossepladsprojektet, har været, at 3-dimensionale numeriske modeller vil være påkrævet i langt de fleste forureningstilfælde for at kunne udføre pålidelige simuleringer af forureningsspredningen og effekten af afværgetiltag. For de lidt større problemer vil anvendelse af en 3-dimensional model ofte involvere flere end 100.000 beregningspunkter, og da der skal angives værdier for de hydrauliske parametre (hydraulisk ledningsevne i x, y og z retninger, magasintal, porøsitet) i samtlige beregningspunkter, er man dermed konfronteret med et meget alvorligt dataproblem. Det er selvsagt urealistisk at forestille sig indsamlet geologisk og hydrogeologisk information for alle aktuelle beregningspunkter, og det er derfor vigtigt at udnytte og kombinere de forskellige informationer og data om det undersøgte områdes opbygning, således at der kan foretages en kvalificeret interpolation og ekstrapolation.

Erfaringerne fra lossepladsundersøgelsen og de øvrige 3-dimensionale modelopstillinger har været, at det er af afgørende betydning at etablere en god beskrivelse af den overordnede geologiske opbygning og herunder specielt den rumlige udbredelse af de enkelte lagfølger. Denne information kan tilvejebringes ved at kombinere geologiske, hydrologiske og geofysiske undersøgelsesmetoder, således at både punkt- og fladeinformationer udnyttes, og at disse kombineres ud fra en geologisk forståelse for området.

En hensigtsmæssig måde hvorpå den geologiske information kan indbygges i den numeriske model er først at definere den geologiske opbygning i en række profilsnit gennem området, og derefter sammenstille disse snit i et fence-diagram for at danne sig et indtryk af de overordnede geologiske forhold. De geologiske profiler digitaliseres herefter, idet der samtidig defineres en række forskellige lagforekomster, som karakteriserer den

geologiske opbygning. Endelig kan den horisontale udstrækning af disse lagforekomster vurderes og digitaliseres, hvorefter den komplette geologiske model er kvantificeret. Hele denne proces kan forenkles betydeligt under anvendelse af databehandlings- og grafisk programmel.

Efter at have kvantificeret den geologiske opbygning ved at definere den horisontale og vertikale udbredelse af de lagserier, som karakteriserer området, skal fordelingen af de hydrauliske parametre specificeres for hvert enkelt lag. Den væsentligste parameter både i relation til vandstrømning og forureningstransport er hydraulisk ledningsevne. Denne parameter vides at udvise en betydelig rumlig variation selv indenfor den samme geologiske lagserie. Både ved modelleringen af forureningsspredningen fra lossepladsen og udbredelsen af tracerskyen i tracerfeltet er der som udgangspunkt antaget, at den hydrauliske ledningsevne er konstant indenfor de respektive lagfølger, hvormed de respektive områder er karakteriseret. Dette har i begge tilfælde resulteret i særdeles gode beskrivelser af både trykniveau og overordnet faneudbredelser, og der har kun været behov for mindre justeringer for at opnå de simuleringer, som er diskuteret i Kapitel 5. Tilsvarende erfaringer er ligeledes opnået i andre modelanvendelser, hvilket peger i retning af, at den geologiske lagfølgeopbygning i kombination med repræsentative værdier for den hydrauliske ledningsevne indenfor de enkelte lag, er meget væsentligt input i forbindelse med anvendelse af 3-dimensionale modeller. Derimod har fordelingen af hydraulisk ledningsevne indenfor lagene vist sig at have mindre betydning, når der er tale om at simulere de overordnede strømnings- og transportforhold, men fordelingen af denne parameter har selvfølgelig stor betydning for de lokale koncentrationer.

Som beskrevet ovenfor er det praktisk umuligt at måle de parametre, som indgår i en numerisk model, i samtlige beregningspunkter, og der vil derfor altid være usikkerhed knyttet til enhver modelsimulering som følge af det usikre datagrundlag. Størrelsen af denne usikkerhed afhænger af omfanget af det

tilgængelige datamateriale, men afhænger desuden af en række skalaparametre herunder bl.a. afstanden fra forureningskilden, forureningskildens arealmæssige udstrækning og persistensen af den geologiske variabilitet. Tæt ved kilden er der normalt stor usikkerhed knyttet til beregningsresultaterne, hvorimod usikkerheden har tendens til at blive reduceret for større transportafstande, fordi effekten af de tilstedeværende lokale heterogeniteter udglattes. Ved hjælp af stokastiske metoder er det muligt at relatere usikkerheden på simuleringensresultaterne til usikkerheden på de indgående parametre. Den mest generelle metode er Monte Carlo simulering, hvor der genereres en række realisationer af den hydrauliske ledningsevne på grundlag af statistiske data (middelværdi, spredning og rumlig korrelation), som herefter introduceres i den numeriske model. Ved at analysere simuleringensresultaterne statistisk er det muligt at opstille kvantitative mål for usikkerheden. Ved Monte Carlo simulering er det muligt at tage højde for deterministiske informationer i form af sikre oplysninger om den geologiske opbygning og konkrete målinger af de hydrauliske parametre ved at generere realisationer mellem målepunkterne, van Rooy (1987). Stokastisk grundvandsmodellering er en meget omfattende disciplin, hvor der i disse år foregår et omfattende udviklingsarbejde, se fx. Sudicky og Huyakorn (1991).

Spørgsmålet om, hvorvidt det hydrogeologiske datagrundlag i Danmark er tilstrækkeligt til pålidelig 3-dimensional modellering i praksis, må generelt besvares bekræftende. Det eksisterende grundlag vil i langt de fleste tilfælde være tilstrækkeligt til en indledende modelundersøgelse, hvorimod lokale supplerende feltundersøgelser ofte vil være nødvendige for at opnå så nøjagtige modelberegninger, at de f.eks. kan udgøre tilstrækkeligt grundlag for beslutninger om afværgeforanstaltninger.

Eftersom nøjagtigheden af modelberegninger er direkte afhængige af hvor detaljeret og nøjagtigt datagrundlaget er, vil der imidlertid altid være teknisk begrundede ønsker om at forbedre datagrundlaget. Hvorvidt det kan betale sig at indsamle yderligere data i en konkret situation afhænger af omkostningerne

herved i forhold til nytteværdien af ekstra data. Der er et klart behov for i de kommende år at få udviklet forbedrede og økonomisk attraktive teknologier til etablering af det 3-dimensionale hydrogeologiske datagrundlag. I den sammenhæng må det forventes, at geofysiske målemetoder vil blive videreudviklet og finde væsentligt øget anvendelse i praksis.

## 8. NUMERISK DISKRETISERING

Valg af diskretiseringsgrad i en numerisk model er et kompromis mellem på den ene side ønsket om en tilstrækkelig opløsning og nøjagtighed i beregningsresultaterne og på den anden side en overkommelig beregningstid på computer. I rapport M1 (Jensen et al., 1991) er inkluderet sensitivitetsberegninger for diskretiseringsgraden, hvor det er demonstreret, at både koncentrationsniveau og spredning er påvirket heraf.

Den vertikale diskretisering influerer på spredningen og fordelingen over dybden, således at ved større diskretisering fås en større spredning og dermed mindre koncentrationer. Derimod vil den gennemsnitlige koncentration over hele dybden ikke påvirkes i særlig stor grad, og gennemsnitskoncentrationer kan i nogle situationer simuleres med stort set samme nøjagtighed med en 2-dimensional model.

Den horisontale diskretisering har ligeledes indflydelse på den horisontale spredning af en forureningsfane, og desto grovere inddeling, der anvendes i simuleringen, desto større horisontal dispersiv spredning, introduceres i beregningerne. Når diskretiseringen kommer under en vis størrelse, giver en yderligere forfining normalt ikke anledning til en væsentlig forbedring af den numeriske dispersion.

Det er ikke muligt at opstille generelle detaljerede retningslinier for hensigtsmæssige valg af numerisk diskretisering, da det afhænger af en række forhold herunder krav til detaljeringsgrad, transportproblemets skala, kildens skala samt modellens numeriske nøjagtighed. Generelt kan dog siges, at hvis der ønskes foretaget simuleringer af fanens vertikale placering, bør der være mindst 3 beregningspunkter indenfor fanen, og tilsvarende bør der være mindst 25 beregningspunkter indenfor fanens horisontale udstrækning.

På baggrund af erfaringerne fra Lossepladsprojektet og modelberegninger fra andre lossepladser, kan det konkluderes, at til undersøgelser af forureningsspredning fra "punktkilder" er den valgte diskretisering for Vejen Losseplads på 25 x 25 x 2 m sandsynligvis i overkanten af det optimale. Dvs. at det må forventes, at fremtidige undersøgelser vil anvende finere diskretisering i takt med muligheden for forøgede computerressourcer i de kommende år.

Til forureningsproblemer stammende fra fladebelastning viser erfaringerne fra NPO projektet, at en væsentlig grovere diskretisering er tilstrækkelig i horisontal retning, hvorimod den vertikale diskretisering bør være af samme størrelsesorden som i tilfældet med punktkilder.

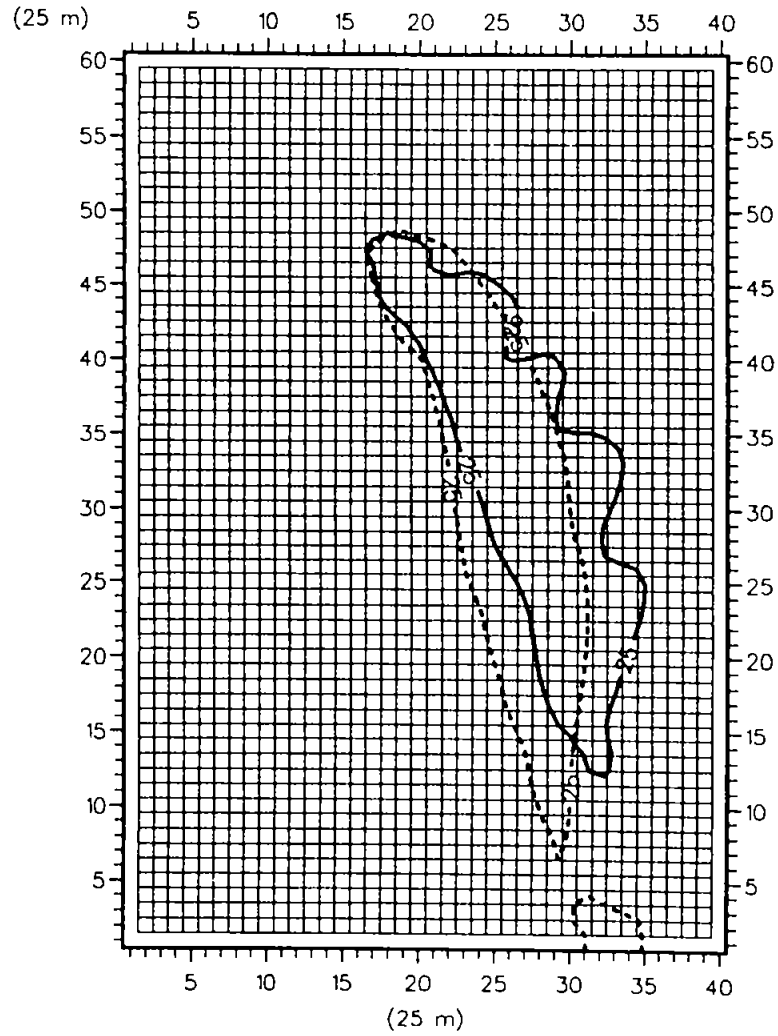
Et specielt problem knytter sig til fastsættelsen af randbetingelserne ved modelberegninger for lossepladser. På grund af den meget lille diskretisering og de som regel små transportafstande vil modelområder ofte kunne nøjes med en længdeskala af størrelsesorden 1 km. Det er imidlertid næsten aldrig muligt at finde passende randbetingelser (vandløb, impermeable områder, faste vandskel eller lignende) på en sådan lokal skala. En modellering, der baseres udelukkende på en lokal skala, vil derfor ofte være domineret af de valgte randbetingelser og følgelig særdeles unøjagtig. Derfor er der både for Vejen Losseplads og for kalkmagasinet ved Karlstrup som baggrund for den lokale stoftransportmodel opstillet en såkaldt regional model dækkende et væsentligt større område. Med den regionale model foretages kun strømningsberegninger i et grovere net. Randbetingelserne for den lokale model overføres i form af trykniveauer eller strømninger fra den regionale model. Samme metode blev anvendt ved modelundersøgelserne i Århus-området (DHI, 1989), hvor de overordnede strømningsforhold under lossepladser i mange tilfælde styres af variationer i oppumpning fra forskellige kildepladser. SHE har således indbygget en facilitet til automatisk udtagning af randbetingelser fra en regional model til brug i en lokal model.

## 9. PERKOLATSPREDNING UNDER STATIONÆRE/IKKE-STATIONÆRE STRØMNINGSFORHOLD

Hidtil har transportberegninger sædvanligvis været udført under antagelse af stationær grundvandsstrømning, fordi tidsskalaen for forureningstransport normalt er væsentligt længere (mange år) end tidsskalaen for de sæsonmæssige variationer, således at der formodes at ske en udjævning indenfor simuleringsperioden. Imidlertid udviser nedsivningen en sæsonmæssig variation og en variation fra år til år, som vil give anledning til fluktuationer i de hydrauliske trykniveauer og dermed i strømningshastigheder og -retninger. Variationer i hastigheden vil ikke påvirke fanens horisontale spredning, men kun hastigheden af transporten, og set over en årrække har denne variation derfor minimal betydning. Derimod vil fluktuationer i retningen påvirke den laterale dispersion, og hvis denne mekanisme ikke tages i regning, skal der ske en kunstig forøgelse af den transversale dispersivitet.

I Rapport M1 (Jensen et al., 1991) er betydningen af denne mekanisme undersøgt nærmere ved at udføre simuleringer af forureningsspredningen både under stationære og ikke-stationære strømningssforhold. I Figur 9.1 er vist den simulerede arealmæssige perkolatspredning efter 18 år for både stationære og ikke-stationære strømningssforhold. Som det fremgår af figuren har stoffanen beregnet på grundlag af ikke-stationær vandstrømning en mere sydlig retning, men den laterale dispersion af den overordnede faneudbredelse er tilsyneladende ikke forøget væsentligt. På lokal skala og herunder ikke mindst tæt på forureningskilden kan imidlertid konstateres forskelle i simuleringsresultaterne, som følge af perkolatproduktionens tidsmæssige variation. Specielt for nærfeltet er det derfor væsentligt at medtage de sæsonmæssige variationer i tolkningen af målingerne, hvorimod det er mindre betydningsfuldt i fjernfeltet. Stort set samme observationer blev foretaget i tracerfeltet, hvor de sæsonmæssige fluktuationer ligeledes kun påvirkede transportforløbet i mindre grad.





Figur 9.1 Simuleret perkolatspredning under stationære (—) og ikke-stationære (---) strømningsforhold.

Det skal understreges, at de geologiske forhold i det undersøgte område er meget homogene, hvilket bl.a. manifesterer sig i, at fluktuationerne i det hydraulisk trykniveau indenfor området stort set er i fase, og der genereres derfor ikke transversale strømningsskomponenter af betydning over sæsonen. Samtidig er lossepladsens beliggenhed langt nedstrøms et grundvandsskel medvirkende til, at strømningens retning ikke varieres væsentligt i tiden. Disse forhold har selvsagt stor betydning for de konklusioner, som er fremkommet i nærværende rapport. Under andre og mere variable geologiske forhold kan det på ingen måde udelukkes, at de sæsonmæssige variationer i grundvandsstrømningen kan øge dispersionen i et væsentligt større omfang end tilfældet er ved Vejen.

## 10. DISPERSION

Transport af opløste ikke-reaktive forureningsstoffer i grundvand regnes traditionelt at være bestemt af de to processer advektion og dispersion. Advektion refererer til den transport, som sker med middelbevægelsen af grundvandet, og dispersion beskriver transporten, som skyldes de lokale hastighedsvariationer omkring middelbevægelsen, Freeze og Cherry (1979). Disse hastighedsfluktuationer skyldes de altid tilstedeværende inhomogeniteter i de geologiske lagfølger.

Den klassiske matematiske model for transport og spredning af opløste stoffer i porøse medier er advektions-dispersionsligningen, som er udledt under antagelse af, at dispersionsprocessen kan beskrives ved Ficks diffusionslov, Bear (1972). I ligningen indgår som parametre dispersiviteter, som repræsenterer spredningen på langs og på tværs af strømningsretningen. Advektions-dispersionsligningen er oprindeligt udledt for en skala repræsenterende det "representative elementary volume (REV)", jfr. Bear (1979), hvilket til alle praktiske formål kan antages at svare til skalaen i laboratorieopstillinger. Imidlertid har ligningen i stort omfang været anvendt til beskrivelse af stofspredningen i felten, hvor dispersiviteterne så er forhøjet en størrelsesorden eller mere for at beskrive den større spredning, som den heterogene geologiske opbygning giver anledning til.

Dispersiviteterne har i den forbindelse typisk været anvendt som kalibreringsparametre. Først er der foretaget en kalibrering af en strømningsmodel på grundlag af hydrogeologiske data, primært transmissiviteter og potentialer, hvorved der er etableret en beskrivelse af den advektive udbredelse. Dernæst er en stoftransportmodel kalibreret ved at justere på dispersiviteterne, indtil der på grundlag af skøn for kildestyrke opnås en god beskrivelse af de foreliggende koncentrationsmålinger i det påvirkede magasin. Da det altid er vanskeligt at kvantificere kildestyrkens historiske udvikling, og da der oftest kun foreligger et mindre antal koncentrationsmålinger, er ovennævnte metode til be-

stemmelse af dispersivitetene forbundet med betydelig usikkerhed.

I Lallemand-Barries og Peaudecerf (1978) samt Gelhar et al. (1985) er der foretaget en sammenstilling og diskussion af en række feltmålinger af den langsgående dispersivitet. Af disse sammenstillinger fremgår, at dispersiviteten tilsyneladende er skalaafhængig, og at der er tale om en betydelig spredning på resultaterne selv inden for samme aflejringstype og for samme transportafstande. Den fysiske forklaring på disse observationer henføres til jordlagenes heterogene opbygning, og den deraf afledede variation i de hydrauliske parametre og herunder specielt den hydrauliske ledningsevne. Dette betyder, at for større transportafstande vil forureningsfanen blive udsat for flere og flere inhomogeniteter, og dermed skal introduceres en større dispersivitet for at beskrive den heraf afledte spredningsmæssige effekt. Tilsvarende gør sig gældende, at desto mere inhomogent magasin, der er tale om, desto større dispersivitet skal anvendes. Problemstillingen er yderligere kompliceret af, at de to transportmekanismer advektion og dispersion ikke er uafhængige størrelser, fordi dispersion i princippet kan opfattes som en reststørrelse afhængig af detaljeringsgraden af den advektive beskrivelse. Hvis der er et omfattende hydrogeologisk datamateriale til stede, således at det er muligt at opstille et detaljeret strømlinienet, kan størstedelen af stoftransporten relateres til advektion, og reststørrelsen - dispersion - er da meget lille. Det omvendte gør sig gældende, hvis der kun foreligger sparsomme hydrogeologiske oplysninger, idet hovedparten af transporten da beskrives ved dispersion, fordi strømlinierne ikke kan beskrives særlig detaljeret. Dette forhold er selvsagt med til at give et meget tilsløret billede af stoftransport i grundvand. Samtidig skal dog også nævnes, at de fleste forsøg, som er sammenstillet i de to ovennævnte publikationer, er behæftet med betydelig usikkerhed som følge af usikre forsøgsomstændigheder, og det er derfor ikke muligt at drage endegyldige konklusioner på det grundlag.

I forbindelse med en række teoretiske undersøgelser, hvor den hydrauliske ledningsevne opfattes som en stokastisk variabel, er der etableret sammenhænge mellem dispersivitet og variation i hydraulisk ledningsevne, se fx. Dagan (1982), Dagan (1984), Gelhar og Axness (1983), Gelhar et al. (1979) og Matheron og de Marsily (1980). Disse teoretiske arbejder har endvidere påvist, at dispersionsprocessen i visse tilfælde ikke kan beskrives ved en Ficks diffusionsanalogi i nærfeltet, fordi dispersiviteten vokser mod en asymptotisk værdi, som måske først nås efter transportafstande på flere hundrede meter.

Generelt kan siges, at der er en række uafklarede forhold omkring anvendelse af advektions-dispersionsligningen til beskrivelse af forureningsspredning i naturlige grundvandsmagasiner og herunder ikke mindst omkring bestemmelsen af dispersiviteten. Dette har foranlediget, at der i udlandet har været udført kontrollerede stor-skala dispersionsforsøg med henblik på at undersøge disse forhold på grundlag af veldokumenterede data. De tre kendteste forsøg er Borden Air Force Base, Freyberg (1986) og Mackay et al. (1986), Cape Cod, Garabedian et al. (1988) og Twin Lake, Killey et al. (1988).

I alt er der således tale om meget beskedent antal kontrollerede stor-skala forsøg, og da der samtidig ikke har været udført et i Danmark, var det en af bevæggrundene for at gennemføre et dispersionsforsøg som led i Lossepladsprojektet. Forsøget i området ved Vejen losseplads blev udført efter stort set de samme principper som de udenlandske nævnt ovenfor. Målet var at etablere et detaljeret geologisk og hydrogeologisk datagrundlag for derved at kunne opstille den bedst mulige beskrivelse af den advektive udbredelse. På grundlag af en detaljeret kortlægning af tracerudbredelsen i tid og rum er det muligt at isolere dispersionsbidraget og dermed kvantificere dispersivitetsparametrene.

I første omgang blev disse parametre bestemt på grundlag af et forsøg med tritium, hvilket resulterede i værdierne 0.45 m, 0.001

m, 0.05 m og 0.0005 m i henholdsvis longitudinal horisontal, transversal horisontal, longitudinal vertikal og transversal vertikal retninger. Disse værdier blev efterfølgende valideret i forbindelse med tracerforsøget med klorid, og de samme parameter-værdier blev ligeledes med et godt resultat anvendt ved modelleringen af forureningsudbredelsen fra lossepladsen. Dispersivitetstværdierne er i god overensstemmelse med resultaterne fra de udenlandske forsøg, men de er markant lavere end de, som dels er opført i Lallemand-Barris og Peaudecerf (1978) samt Gelhar et al. (1985) og dels traditionelt har været anvendt i ingeniørmæssig praksis.

Der er flere forklaringer på denne tilsyneladende uoverensstemmelse. For det første skal det pointeres, at samtlige forsøg, som er nævnt i denne sammenhæng inklusive forsøget ved Vejen, er udført i relativt homogene alluviale sandaflejringer, hvilket vil resultere i værdier i den lave ende af skalaen. Der er endnu ikke udført forsøg af denne type i heterogene aflejringer, men det må forventes, at dispersionen her har et højere niveau. Tilbage står imidlertid, at de fundne dispersivitetstværdier er lavere end tidligere antaget, og en væsentlig årsag hertil er, at der for alle nævnte forsøg er foretaget en 3-dimensional tolkning af de indsamlede data, hvilket vil resultere i lavere værdier, end hvis der foretages en 2-dimensional analyse.

I forbindelse med tracerforsøget, som blev udført i sprækket kalk, Jacobsen (1991) og Brettmann og Jensen (1992), blev der identificeret en langsgående horisontal dispersivitet på 8 m, hvilket i relation til ovenstående er en relativt høj værdi i betragtning af, at der kun er tale om en transportskala på 25 m. Den høje værdi må tilskrives de meget heterogene forhold i opsprækkede bjergarter, som giver en forøget spredningsmæssig effekt, men usikkerheder omkring de forsøgsmæssige forhold kan dog også have medvirket til en forhøjet værdi.

På grundlag af resultaterne fra dispersionsundersøgelser udført dels i nærværende sammenhæng og dels i udlandet kan konkluderes,

at de dispersivitetsværdier, som skal anvendes i forbindelse med modelberegninger af forureningsspredning i sandmagasiner, er lavere end de, som hidtil har været anvendt i ingeniørmæssig praksis. For 3-dimensionale modelanvendelser er der tale om særdeles små dispersiviteter, men selv for 2-dimensionale modelberegninger, hvor den ene dimension er elimineret, og hvor dispersionsleddet derved tillige skal inkludere spredningen hidrørende fra variationen i de hydrauliske forhold over dybden, peger resultaterne i retning af meget mindre værdier. Under mere heterogene forhold som for eksempel i morænelersområder forventes dispersiviteter, som er højere end de ovenfor angivne, men indtil videre foreligger ikke veldokumenterede undersøgelser, som kan underbygge dette. Når der er tale om opsprækkede formationer peger resultaterne fra M3 i retning af, at der skal anvendes dispersiviteter af en helt anden størrelsesorden.

## 11. SPRÆKKETRANSPORT

Hvis forurening sker i en geologisk formation med sprækkestruktur kan transporten ikke beskrives ved hjælp af den sædvanlige advektions-dispersionsligning (2.7), fordi den dobbeltporøse struktur giver anledning til et anderledes transportforløb karakteriseret ved et hurtigt gennembrud af en forurening gennem sprækkesystemet samtidig med en midlertidig oplagring af forurening i matrixsystemet og en langsom frigivelse herfra igen.

Forureningstransport under disse geologiske forhold kan beskrives ved at betragte bjergarten som sammensat af et sprække- og et matrixdomæne, og derefter opstille strømnings- og transportligninger for begge domæner med mulighed for gensidig udveksling af både vand og stof. Denne beskrivelse forudsætter, at den geometriske udformning af sprækkesystemet kan defineres. Hvis der er registreret overordnede sprækker er det vigtigt at få disse introduceret i modellen, da de kan have en dominerende indflydelse på transporten. I tilfælde af et mere tæt og homogent udviklet sprækkesystem er det umuligt at identificere den komplette geometri, og i det tilfælde vil man i modellen foretage en syntetisk generering af sprækkesystemet på grundlag af opmålinger af sprækkediameter, -densitet og -retning, Sudicky og McLaren (1992). Yderligere er der også mulighed for at introducere et stokastisk element ved genereringen af sprækkesystemet. Den "diskrete" modelformulering er forholdsvis kompliceret og datakrævende, og specielt stiller den numeriske løsning af de involverede strømnings- og transportligninger store krav til computerkapaciteten, især hvis der er tale om 3-dimensionale problemer.

En alternativ og mere enkel formulering er baseret på en kontinuumsbetragtning, hvor bjergarten beskrives som et ækvivalent porøst medium karakteriseret ved en effektiv hydraulisk ledningsevne, som repræsenterer vandstrømningen i sprækkerne (mobil fase). I matrix antages vandet at være stillestående (ikke-mobil fase), men mellem sprækker og matrix kan ske en



stofudveksling ved diffusion. Denne formulering lader sig forholdsvist enkelt implementere i de traditionelle transport-dispersionsmodeller, idet diffusionsudvekslingen kan indbygges som et kilde/dræn led i modellen, jfr. den modifikation, der blev introduceret i SHE-modellen i forbindelse med Lossepladsprojektet.

Den "diskrete" modelformulering må siges at være den metode, som er fysisk mest velbegrunder, men den rummer som nævnt nogle beregningsmæssige vanskeligheder, som ikke er til stede, når der opdeles i en mobil og ikke-mobil vandfase. Hvis sprækkesystemet er tæt og homogent udbygget, og den hydrauliske ledningsevne for matrix er meget lille i forhold til den hydrauliske ledningsevne for sprækkesystemet, vil sidstnævnte simplificering være acceptabel, og den har med god tilnærmelse beskrevet tracertransporten ved Karlstrup.

## 12. DENSITETSEFFEKT

Ved vurderinger af betydningen af densitetseffekter på opblandings- og transportforholdene i en forureningsfane er det vigtigt at sondre mellem den situation, hvor der sker en total opblanding mellem det tungere perkolat og det rene grundvand eller alternativt om perkolatets nedtrængning i grundvandet sker i isolerede fingre (hydrodynamiske instabil strømning) uden opblanding med det omgivende grundvand.

I en række tilfælde er konstateret nedsynkning af en forureningsfane i umiddelbar nærhed af udslipstedet, som ikke umiddelbart kan forklares ved en densitetseffekt, fordi det ikke er muligt at simulere dette ved hjælp af en numerisk model, hvor densitetsforskelle kan tages i regning. Det mest nærliggende eksempel på dette fænomen er tracerforsøget med uorganiske kloridsalte, hvor der skete en markant nedsynkning under udslipstedet på trods af, at densitetskontrasten var forholdsvis beskednen ( $\Delta = 0.006$ ). Det er ikke muligt at reproducere den observerede vertikale fortrængning ved hjælp HST3D modellen, og observationerne tilskrives derfor strømning af traceropløsning i isolerede kanaler, som det ikke er muligt at tage i regning. Disse densitetsbetingede strømningsfænomener er demonstreret af Schincariol og Schwartz (1990) i en laboratorieopstilling for en række forskellige kombinationer af strømningshastigheder og densitetskontraster, og det er derfor sandsynligt, at forureningsspredning i grundvand i visse situationer er påvirket af disse mekanismer. Imidlertid er det ikke for nærværende muligt at medtage disse strømningsfænomener i de numeriske beregninger, og vurderingerne vil derfor være af mere kvalitativ karakter.

Det må formodes, at fingerstrømning vil have større tendens til at optræde i situationer, hvor forureningskilden er relativt koncentreret både i tid og sted. I de tilfælde hvor der er tale om større affaldsdeponier, som er frit eksponeret for nedbør og fordampning, er det tænkeligt, at der sker en større grad af opblanding mellem perkolat og grundvand, således at de ovenfor

diskuterede strømningsfænomener optræder i mindre grad. For at belyse betydningen af densitetskontraster under sådanne forhold er der i projekt M1 (Jensen et al., 1991) foretaget en række orienterende modelberegninger af spredning- og opblandingsforhold under alternative hydrogeologiske situationer og densitetskontraster. Modelberegningerne viser, at den vertikale opblanding af perkolat i grundvand er stærkt afhængig af de hydrogeologiske forhold og herunder specielt styrkeforholdet mellem perkolatproduktion og grundvandsflux. Densitetsforskellen mellem perkolat og grundvand har kun indflydelse på perkolatspredningen, når gradienten i det hydrauliske trykniveau er lille, hvilket vil sige tæt på grundvandsskel. Ved større gradienter, dvs. i større afstand fra grundvandsskel, er det beregnet, at densitetseffekten kun har signifikant betydning, hvis anisotropiforholdet mellem vertikal og horisontal hydraulisk ledningsevne er meget større end 1, hvilket ikke forekommer i sædvanlige danske aflejringer.

Sammenfattende kan siges, at en række eksperimentelle undersøgelser har dokumenteret, at densitetsdrevet forureningstransport kan forekomme i afgrænsede kanaler i vertikal retning. Samtidig har en række modelsimuleringer vist, at hvis der sker en opblanding mellem perkolat og grundvand er effekten af densitetsforskelle i de fleste situationer mindre betydningsfuld. Det er derfor vanskeligt på det foreliggende grundlag at afklare den generelle betydning af densitetens indflydelse.

### 13. KEMISKE PARAMETRE

Ligesom der ved bestemmelsen af de geologiske og hydrauliske parametre til en 3-dimensional model med mange beregningspunkter vil være behov for at udnytte al eksisterende viden og data på systematisk vis, vil det også være tilfældet for parametre til geokemiske modeller. De vigtigste typer af parametre er

- \* Kationbytningskapaciteten, CEC (lign. 2.17)
- \* Selektivitets- og aktivitetskoefficienter (lign. 2.16)
- \* Stabilitetskonstanter (lign. 2.19)
- \* Opløselighedsprodukter (lign. 2.21)
- \* Reaktionshastighedskonstanter.

Generelt kan det konkluderes, at der indtil videre er begrænsede erfaringer med bestemmelse af kemiske parameterverdier. En oversigt over anvendte parameterverdier i en række modelanvendelser fremgår af Engesgaard og Christensen (1988). Erfaringerne fra Lossepladsprojektet er sammenfattet i P0-rapporten (Christensen og Rügge, 1992).

De parameterverdier, som blev benyttet i forbindelse med modelleringen af det uorganiske tracereksperiment ved Vejen Injektionsfelt, var alle bestemt ud fra laboratorieanalyser af prøver udtaget på den konkrete lokalitet. Erfaringerne herfra var særdeles gode, idet modelberegningerne viste sig at komme forbavsende tæt på de observerede koncentrationer, uden at det var nødvendigt at foretage nogen egentlig modelkalibrering. Såfremt geokemisk modellering skal anvendes i praksis fremover, er det imidlertid urealistisk hver gang at lave så omfattende felt- og laboratoriearbejde. Der er således behov for at opnå større erfaring med estimering af geokemiske parametre ud fra bl.a. geologiske informationer samt at få udviklet nye og billigere feltmetoder.

#### 14. KALIBRERING

Anvendelse af en numerisk model til analyse af historiske data eller til forudsigelse af fremtidige forhold kræver, at modellen er i stand til at beskrive de fysiske processer. Hertil kræves en numerisk model, som kan løse de styrende differentiaalligninger tilstrækkeligt nøjagtigt, samt kendskab til en række parametre. Disse parametre er i de fleste tilfælde kun kendt i et begrænset antal punkter fx. boringer, hvori der er foretaget prøvepumpninger, eller indirekte via geofysiske målinger med en vis arealmæssig udstrækning. Det er derfor ofte nødvendigt at estimere en lang række parametre ved anvendelse af en model. Kalibreringen af en model går således ud på at minimere forskellen mellem beregnede og målte værdier, fx. hydraulisk trykniveau eller koncentrationer, ved at justere de "ukendte" parametre, indtil der er opnået en acceptabel nøjagtighed.

Som tidligere beskrevet vil det ofte være nødvendigt at bestemme parameterverdier i mere end 100.000 beregningspunkter. Det er derfor af afgørende betydning at benytte en systematisk og stringent metodik ved kalibreringen. I modsat fald bliver kalibreringsarbejdet uoverkommeligt og resultatet tilfældigt og i bedste fald uoverskueligt.

Under kalibreringen af en model er det vigtigt at holde sig for øje, hvilke parametre der kan antages at være målte og dermed skal fastholdes i kalibreringsfasen, og hvilke det er tilladt at justere, samt inden for hvilke intervaller disse parametre må justeres, uden at det vil være i modstrid med den eksisterende hydrogeologiske viden. Det er ligeledes vigtigt at gøre sig klart, hvilken effekt en justering af den enkelte parameter har på simuleringsresultatet.

I Kapitel 7 er anvendelsen af geologiske informationer i forbindelse med modelopstilling beskrevet. Følgende metodik for kalibreringen har været anvendt såvel i Vejen som ved andre undersøgelser og kan generelt anbefales:

- (1) En 3-dimensional geologisk model opstilles med baggrund i vertikale geologisk tolkede profiler, kort med horisontal udbredelse af linser og geologiske lag, m.v.
- (2) Hvert geologisk lag/sedimenttype karakteriseres med et sæt parameterverdier gældende for alle beregningspunkter med samme geologiske karakteristika.
- (3) En model opstilles. Diskretiseringen fastlægges, herunder om modellen opstilles som 2- eller 3-dimensional. Et geologisk lag behøver ikke nødvendigvis at være sammenfaldende med diskretiseringen i modellen. Interpolationsrutiner sørger for, at parameterverdier automatisk tildeles alle beregningspunkter ud fra den geologiske model og de til hvert geologisk lag hørende parameterverdier.
- (4) En første strømningsberegning foretages og beregnede trykniveauer sammenlignes med observerede værdier.
- (5) Såfremt overensstemmelsen mellem observerede og beregnede trykniveauer ikke er tilfredsstillende forsøges at justere på parameterværdierne inden for de i forvejen fastsatte intervalgrænser. I denne fase fastholdes samme parameterverdier indenfor de enkelte geologiske lag.
- (6) Såfremt det ikke er muligt at opnå tilfredsstillende resultater under punkt (5) revurderes den geologiske model, og i tilfælde af modifikationer heraf startes med punkt (1) igen.
- (7) Såfremt resultaterne stadig ikke er tilfredsstillende tillades det at variere parameterverdier inden for samme geologiske lag. Det gøres ved at fastholde konstante parameterverdier inden for større områder,

således at variable parameterverdier fra punkt til punkt generelt ikke tillades. Disse variationer fortsættes indtil der opnås tilfredsstillende overensstemmelse mellem beregnede og observerede trykni-  
veauer. Variationerne i parameterverdierne indenfor de enkelte geologiske lag konfronteres med den hydrogeologiske viden. Såfremt klare inkonsistenser mellem den geologiske viden og den hydrauliske kalibrering erkendes, er der behov for nye feltundersøgelser inden modelkalibreringen kan færdiggøres.

- (8) Når strømningsmodellen er færdigkalibreret, foretages kalibrering af parametre af betydning specielt for stoftransport. Der anvendes også i dette tilfælde princippet om ens værdier inden for samme geologiske lag. Såfremt det ikke er muligt at opnå tilfredsstillende resultater revurderes kalibreringen af strømningsmodellen.

Den vigtigste kalibreringsparametre ved opstillingen af en stationær 2-dimensional grundvandsmodel er transmissiviteten og dens fordeling, mens magasintal, horisontale og vertikale hydrauliske ledningsevner skal inddrages, hvis der er tale om ikke-stationære forhold henholdsvis en 3-dimensional beskrivelse. Udover disse parametre kan randbetingelserne i form af ned-sivning, trykni-  
veauer langs modelranden etc. være parametre, der kan justeres under kalibreringsprocessen.

Ved kalibreringen af en stoftransportmodel er det porøsiteten, som bestemmer partikelhastigheden, og dispersionsparametrene, som bestemmer stofspreddingen, der er de vigtigste kalibreringsparametre. Herudover er randbetingelserne i form af fx. kildestyrke i tid og sted afgørende. I tilfælde, hvor datagrundlaget tillader modellering af et detaljeret 3-dimensionalt strømningsfelt, er betydningen af dispersionen reduceret så meget, at

spredningen som følge af det varierende strømningsfelt som regel vil være betydelig større end spredningen forårsaget af dispersionen. Detaljeringsgraden i beskrivelsen af strømningsfeltet, herunder variationen af hydrauliske ledningsevner, har ofte en afgørende betydning for stoftransport, og der kan derfor være behov for recalibrering.

Ovenstående kalibreringsprocedure bygger på den såkaldte "trial-and-error" metodik, hvor parametrene justeres gentagne gange med efterfølgende evaluering af resultaterne. Det er den traditionelle og i praksis eneste anvendelige metode til kalibrering af 3-dimensionale modeller. Dens væsentligste ulempe er, at den er yderst subjektiv og i høj grad beror på modellørens evne til at fortolke og integrere alle givne informationer. Da der som regel er et begrænset antal målinger til rådighed til kalibrering, kan flere forskellige parametersæt give lige gode kalibreringer. En styrke ved metoden, er at den kræver en dialog mellem geologividen og modellørerfaring.

Der forskes i disse år i matematiske algoritmer til automatisk, numerisk kalibrering. Disse metoder benytter observerede trykniveau og koncentrationsdata som inputdata og beregner herudfra de parameterverdier, som minimerer afvigelsen mellem modelberegnete og observerede trykniveauer og koncentrationer. Disse metoder, som benævnes "invers modellering", er med begrænset udbytte udviklet til 2-dimensionale modeller, men har haft stærkt begrænset anvendelse i praksis. Det må forventes, at praktisk anvendelse af inverse modelleringsmetoder til 3-dimensionale modeller har lange udsigter og kræver omfattende grundforskning.

Kalibrering af modeller kan således karakteriseres som et håndværk, som forudsætter omfattende modelleringserfaring for at lykkes tilfredsstillende. Jo mere komplicerede modelopstillinger der benyttes, jo større krav stilles til modellørens erfaring.



## 15. PRE- OG POSTPROCESSERING AF DATA OG RESULTATER

En effektiv afvikling af en opgave, hvori indgår anvendelsen af en numerisk model, kræver en systematisk bearbejdning af data og præsentation af resultater. Den simpleste og traditionelle form for pre-processering består i manuel editering i en modelfil med indtastning af relevante data, ligesom tabeludskrifter af resultater udgør den simpleste form for post-processering af data.

En så simpel pre- og postprocessering er ikke brugbar i forbindelse med 3-dimensional modellering i praksis, fordi den tager for lang tid og ikke kan forsyne brugeren med tilstrækkeligt overblik over de oftest særdeles omfattende datamængder.

SHE systemet består således foruden selve modellen med den numeriske løsning af de relevante ligninger af et omfattende programpakke til pre- og postprocessering. I Lossepladsprojektet er preprocesseringen baseret på direkte digitalisering af geologiske profiler og kort, mens præsentationen af beregningsresultater sker fx. ved hjælp af 3-dimensionale farveplots. Dette er illustreret i Figur 15.1.

Teknologien bag dataprocesseringen er inde i en rivende udvikling i disse år, og alle modeller, som skal bruges i praksis, må forventes inden for de næste par år at være forsynet med følgende faciliteter:

- \* digitaliseringsprocedurer,
- \* grafisk editering af tidsserier og kort,
- \* kobling til geografiske informations systemer (GIS) med mulighed for at tappe data herfra og præsentere beregningsresultater herigennem,
- \* kobling til specielle geologiske databaser, i Danmark specielt DGU's boredatabase,
- \* procedurer til automatisk modelopstilling på baggrund af rådata, dvs. generering af inputfiler ved inter-

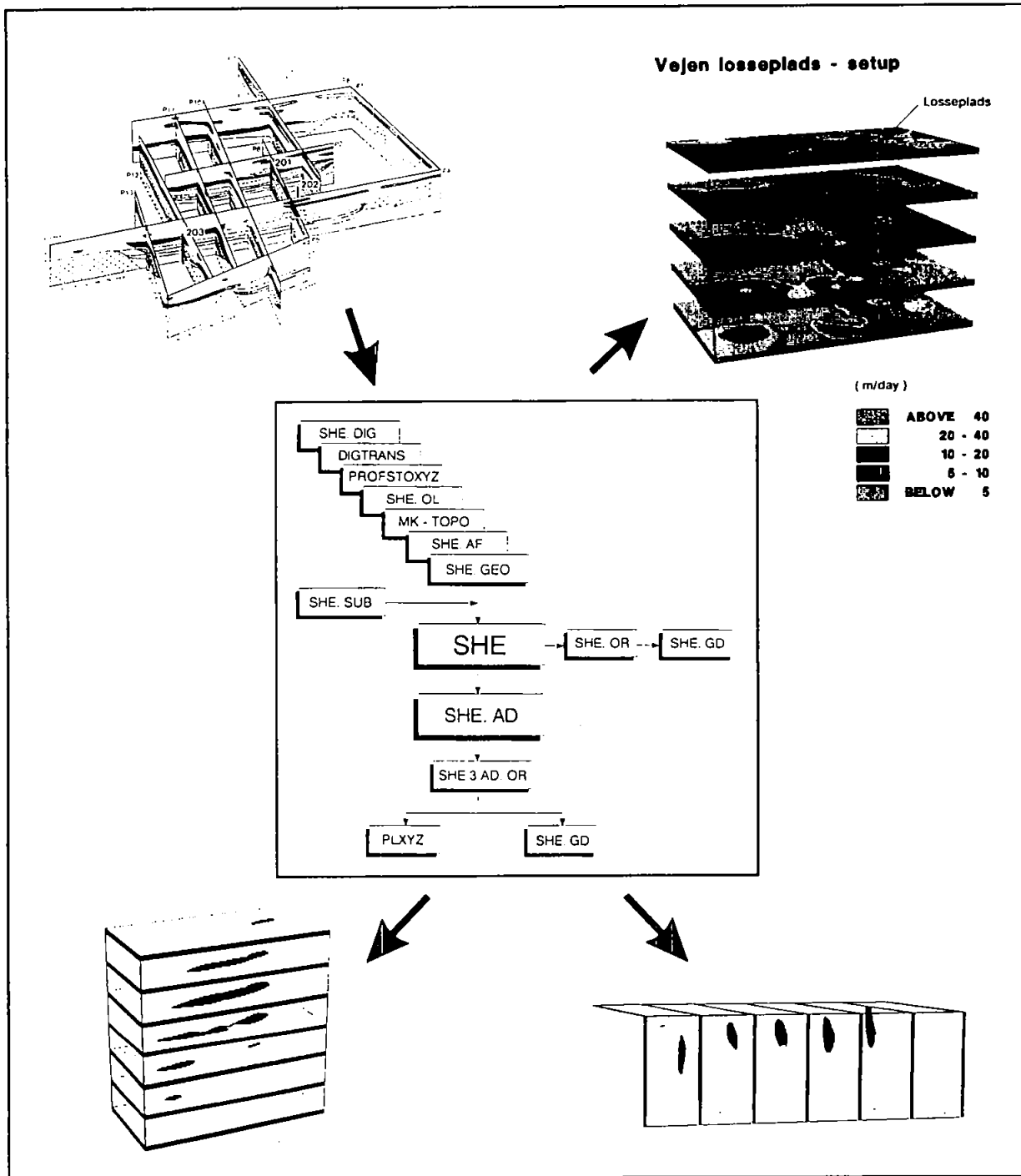
polation og anden datamanipulation, herunder grov-check af mulige fejl eller inkonsistenser i inputdata,

- \* avancerede grafisk præsentation af inputdata og beregningsresultater, bl.a. fladeplot, tværsnitsplot, 3-dimensionale plot og tidsserieplot i gråtoner og farver, og
- \* moduler til beregning af vand- og/eller stofbalancer for hele eller dele af modelområdet, statistik og frekvensanalyse af tidsserier, statistik af fladevariabler osv.

Det skal pointeres, at sådanne værktøjer ikke skal betragtes som "smarte reklamesøjler", men som absolutte forudsætninger for at udnytte modellerne mest effektivt. Her gælder det, som under kalibreringsproceduren, at jo mere kompliceret den anvendte model er, jo større brug er der for præsentationsredskaber.

Som eksempel på værdien af pre-processeringsværktøjet kan nævnes, at opstilling af SHE's grundvandskomponent for en losseplads, dvs. digitalisering af geologiske og andre data, etablering af inputdatafiler samt første stationære modelkørsel, typisk kræver 1-3 dages arbejde for én person, når tolkede geologiske profiler og kort foreligger. Denne arbejdsindsats er lige stor uafhængigt af, om modellen skal opstilles som 2- eller 3-dimensional. Hovedparten af arbejdsindsatsen ligger således dels i etableringen af den geologiske model (tolkede geologiske profiler og kort), dels i modelkalibreringen.

Med de rigtige hjælperedskaber i form af pre- og postprocesseringsprogrammer er en 3-dimensional modelopstilling således ikke væsentligt mere ressourcekrævende end en tilsvarende 2-dimensional modellering. 2-dimensional modellering vil kun være væsentligt billigere, hvis det kan ske på grundlag af et simpelt datagrundlag, hvorved opstillingen af den tilgrundliggende geologiske model gøres hurtigere (og grovere).



Figur 15.1 Illustration af pre-og postprocessering af modeldata og beregningsresultater.

Den 3-dimensionale model giver mulighed for at kalibrere med en helt anden detaljeringsgrad, og afhængigt af omfanget af de til rådighed værende måleresultater vil kalibreringsarbejdet hermed blive forøget.

3-dimensional grundvandsmodellering er i dag praktisk anvendeligt og med et ressourceforbrug, som gør det til en realistisk mulighed i mange opgaver. Denne konklusion understøttes af den betydelige stigning, der inden for de sidste to år er sket i anvendelse af 3-dimensional grundvandsmodellering i forbindelse med løsning af praktiske rådgivningsopgaver i Danmark.

## 16. KONKLUSIONER

Matematisk modellering var en vigtig og integreret del af Lossepladsprojektet. I forbindelse med projektet er der sket en videreudvikling af DHI's hydrologiske modelsystem SHE, og der er foregået en testning af komplicerede modelopstillinger på områder med særdeles godt datagrundlag. Der er således foretaget 3-dimensional modellering med anvendelse af op til 60.000 beregningspunkter.

Hovedkonklusionerne fra de konkrete modelundersøgelser for Vejen Losseplads, Vejen Injektionsfelt samt lokaliteten med opsprækket kalk ved Karlstrup er:

- \* Modelleringen af Vejen Losseplads giver tilfredsstillende resultater, selvom sammenligningen med den observerede forureningsfane er usikker, bl.a. på grund af ufuldstændig viden om kilden.
- \* Modelleringen af tracerudbredelserne i Vejen Injektionsfelt giver meget tilfredsstillende resultater med særdeles god overensstemmelse mellem observerede og simulerede koncentrationer.
- \* Modelleringen af transport og geokemiske reaktioner for uorganiske stoffer ved et tracereksperiment i Vejen Injektionsfelt giver meget tilfredsstillende resultater med særdeles god overensstemmelse mellem observerede og simulerede koncentrationer af både de injicerede og de fra sedimentet ionbyttede kationer. Resultaterne er opnået uden egentlig kalibrering af den geokemiske model, idet alle parameterverdier er bestemt på forhånd ved laboratorieanalyser på prøver taget i naturen.

- \* Modelleringen af tracerudbredelse i kalkmagasin ved Karlstrup giver tilfredsstillende resultater med god overensstemmelse mellem observerede og simulerede koncentrationer. Den opsprækkede kalk er modelmæssigt beskrevet som et dobbeltporøst medium, dvs. med porøsiteten opdelt i en mobil (sprækkerne) og en immobil (matricen) del, hvorimellem der sker stofudveksling ved hjælp af diffusion.
  
- \* Modelleringen af afværgeforanstaltninger illustrerer styrker og svagheder ved fem alternativer: oppumpning langt fra lossepladsen, oppumpning tæt ved lossepladsen, hydraulisk fiksering af forureningskilden, fysisk afskærmning af lossepladsen og separationspumpning.

Sammenfattende kan konkluderes, at 3-dimensional grundvandsmodellering kan give en god beskrivelse af forureningstransport og geokemiske reaktioner og på lokaliteter med tilstrækkeligt godt datagrundlag give en god overensstemmelse med observerede koncentrationer.

Ved at sammenholde projektets resultater med relevante erfaringer fra andre sideløbende danske undersøgelser samt publicerede udenlandske resultater kan følgende generelle erfaringer drages med hensyn til modellering af forureningstransport i grundvand:

- \* Dispersionen i alluviale sandmagasiner er væsentligt mindre end hidtil antaget under danske forhold. Den langsgående horisontale dispersivitet er fundet til 0.5 m over en transportafstand på 200 m.
  
- \* Dispersionen i opsprækkede kalkmagasiner er væsentlig større end i alluviale sandmagasiner; der er således fundet en langsgående horisontal dispersivitet på 8 m over en transportafstand på 25 m.

- \* Dispersiviteter er en funktion af såvel de fysiske forhold som af detaljeringsgraden af den benyttede modellering. Såfremt der foretages en 3-dimensional modelopstilling på baggrund af alle eksisterende geologiske informationer, dvs. med mange geologiske lag og variable lagtykkelser, er dispersiviteterne størrelsesordener mindre end i traditionelle 2-dimensionale modelanvendelser for samme områder. Den numeriske diskretiseringsgrad har indvirkning på simuleringresultatet, og der beregnes større spredninger desto grovere beregningsnet der anvendes.
- \* Beskrivelse af forureningsspredning fra en losseplads kræver som regel en 3-dimensional modellering.
- \* Etablering af en 3-dimensional geologisk model er en nødvendig forudsætning for en efterfølgende 3-dimensional grundvandsmodellering.
- \* Der er et klart behov for i de kommende år at få udviklet forbedrede og økonomisk attraktive teknologier til indsamling af 3-dimensionale hydrogeologiske data. I den sammenhæng må det forventes, at geofysiske målemetoder vil blive videreudviklet og finde væsentlig øget anvendelse i praksis.
- \* Ionbytning er en meget vigtig geokemiske proces, som nødvendigvis i mange situationer må tages i regning ved analyse af forureningsspredning af uorganiske stoffer.
- \* Geokemisk modellering er i dag praktisk muligt. Der er dog stadig et begrænset erfaringsgrundlag med hensyn til indsamling og estimering af geokemiske parameterverdier samt med hensyn til modelkalibrering og validering. Det er således ikke muligt at drage konklusioner om, hvilke niveauer af nøjagtighed, der kan forventes.

- \* Den valgte diskretisering ved Vejen Losseplads på 25 x 25 x 2 m er i overkanten af det optimale. Det må derfor forventes, at fremtidige undersøgelser vil anvende finere diskretisering i takt med muligheden for forøgede computerressourcer i de kommende år. Lossepladsmodeller med op imod 1 mill. beregningspunkter må fx. ikke anses for urealistisk om få år.
  
- \* En række eksperimentelle undersøgelser har dokumenteret, at densitetsdrevet forureningstransport kan forekomme i afgrænsede kanaler i vertikal retning. Samtidig har en række modelsimuleringer vist, at hvis der sker en opblanding mellem perkolat og grundvand er effekten af densitetsforskelle i de fleste situationer mindre betydningsfuld. Der kan derfor ikke drages entydige konklusioner med hensyn til betydningen af perkolatets densitet.
  
- \* Kalibrering af en 3-dimensional model med 10.000-vis af beregningspunkter og parameterverdier kræver en systematisk og stringent metodik. En anbefalet metodik, som har været afprøvet under projektet er beskrevet i Kapitel 14. Hovedhjørneste i denne metodik er en stringent anvendelse af geologiske informationer i form af en geologisk model samt dialog mellem geologividen og modelerfaring. Kalibrering af modeller er et håndværk, som forudsætter omfattende modelleringserfaring for at lykkes tilfredsstillende. Jo mere komplicerede modelopstillinger der benyttes, jo større krav stilles til erfaring i modelanvendelse.
  
- \* Omfattende og brugervenlige programmer til pre- og postprocessing er en absolut forudsætning for en effektiv udnyttelse af modellerne, herunder modelanvendelser til opgaver i praksis. Følgende faciliteter bør inkluderes: digitalisering, grafisk editering, kobling til standard GIS'ere, kobling til geologiske databaser (bl.a. DGU's), procedurer til automatisk modelopstilling ud fra rådata,



grafisk præsentation af inputdata og beregningsresultater samt moduler til beregning af vand- og stofbalancer.

- \* Med de rigtige hjælperedskaber i form af pre- og postprocesseringsprogrammer er 3-dimensional modellering ikke væsentligt mere ressourcekrævende end en tilsvarende 2-dimensional modellering. 3-dimensional modellering stiller derimod større krav til brugererfaring med hensyn til opstilling og specielt kalibrering for at kunne opnå troværdige resultater.

## 17. REFERENCER

- Abbot, M.B., J.C. Bathurst, J.A. Cunge, P.E. O'Connell and J. Rasmussen (1986). An introduction to the European Hydrological System - Système Hydrologique Européen - SHE 1: History and philosophy of a physically-based distributed modelling system and 2: Structure of a physically-based distributed modelling system. *Jour. of Hydrology*, 87, 45-77.
- Abbott, M.B. and D.R. Basco (1989). *Computational fluid dynamics, An introduction for engineers*. Longman, London and Wiley, New York.
- Ammentorp, H.C., A. Refsgaard (1991). Operationalisering af en tre-dimensional stoftransportmodel. Rapport M4/7. Lossepladsprojektet.
- Bear, J. (1972). *Dynamics of fluids in porous media*. American Elsevier, New York, N.Y., 764 p.
- Bear, J. (1979). *Hydraulics of groundwater*. McGraw Hill Series in Water Resources and Environmental Engineering, 569 p.
- Bitsch, K., K. Høgh Jensen og P.L. Bjerg (1991). Vejen injektionsfelt: Dispersion. Rapport M5/6. Lossepladsprojektet.
- Bjerg, P.L., K. Hinsby, P. Gravesen, K. Bitsch, K. Høgh Jensen, B. Skov, E.V. Clausen og H.J. Poulsen (1991b). Vejen Injektionsfelt: Hydrogeologi. Rapport H2. Lossepladsprojektet.
- Bjerg, P.L. (1992). *Transport af kationer i grundvandszonen*. Ph.D. Thesis, Laboratoriet for Teknisk Hygiejne. Danmarks Tekniske Højskole.

- Bjerg, P.L., T.H. Christensen, H.C. Ammentorp, M. Refstrup and B. Skov (1992). Vejen injektionsfelt. Uorganisk stoftransport. Rapport P4. Lossepladsprojektet.
- Brettmann, K. og K. Høgh Jensen (1992). Modellering af stoftransport i opsprækket kalk. Rapport M3, Lossepladsprojektet.
- Dagan, G. (1984). Solute transport in heterogeneous porous formations. *J. Fluid Mech.*, 145, 157-177.
- Dagan, G. (1982). Stochastic modelling of groundwater flow by unconditional and conditional probabilities, 2, The solute transport, *Water Resour. Res.*, 18(4), 835-848.
- DHI (1989). Hydrologisk model til vandindvindingsplanlægning for Århus kommune, Århus Amtskommune og Århus Kommunale Værker.
- Christensen, T. H., and K. Rügge (1992). Forureningskemisk integration. Rapport P0-3. Lossepladsprojektet.
- Engesgaard, P., H.C. Ammentorp, and J.C. Refsgaard (1992). A Multicomponent three-dimensional transport and geochemical calculations in the SHE. DHI - to be submitted to *Journal of Hydrology*.
- Engesgaard, P. and T.H. Christensen (1988). A review of chemical solute transport models. *Nordic Hydrology*, 19, p. 182-216.
- Engesgaard, P. and K.L. Kipp (1991). A geochemical model for redox-controlled movement of mineral fronts in ground-water flow systems: A case of nitrate removal by oxydation of pyrite, submitted for publication.

- Engesgaard, P. (1991). Geochemical modelling of contaminant transport in groundwater. Institute of Hydrodynamics and Hydraulic Engineering. Technical University of Denmark. Series Paper 56.
- Freeze, R.A. and J.A. Cherry (1979). Groundwater. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J.
- Freyberg, D.L. (1986). A natural gradient experiment on solute transport in sand aquifer, 2. Spatial moments and the advectations and dispersion of non-reactive tracers. Water Resour. Res., 22(13), 2031-2046.
- Frind, E.O., W.H.M. Duynisveld, O. Strebhel and J. Boettcher (1989). Simulation of nitrate and sulfate transport and transformation in the Fuhrberger Feld aquifer, Hannover, Germany. Contaminant Transport in Groundwater (Eds. Kobus and Kinzelbach), Balkema, Rotterdam, 97-104.
- Garabedian, S.P., D.R. LeBlanc, L.W. Gelhar and M.A. Celia (1991). Large-scale natural gradient tracer test in sand and gravel, Cape Cod, Massachusetts. 2. Analysis of spatial moments for non-reactive tracer. Water Resour. Res., 27(5), 911-924.
- Garabedian, S.P., L.W. Gelhar and M.A. Celia (1988). Large-scale dispersive transport in aquifers: field experiments and reactive transport theory. Ralph M. Parsons Laboratory, Department of Civil Engineering, MIT. Report no. 315. 280.
- Gelhar, L.W., A. Mantoglou, C. Welty and K.R. Rehfeldt (1985). A review of field scale physical solute transport processes in saturated and unsaturated porous media. Final Proj. Rep. EPRI EA-4190, Electric Power Research Institute, Palo Alto, California, 116 p.

- Gelhar, L.W. and C.L. Axness (1983). Three-dimensional stochastic analysis of macro-dispersion in aquifers. *Water Resour. Res.*, 19(1), 161-180.
- Gelhar, L.W., A.L. Gutjahr and R.L. Naff (1979). Stochastic analysis of macrodispersion in a stratified aquifer. *Water Res. Res.* 15(6), 1387-1397.
- Gravesen, P. (1989). Undersøgelser ved Vejen losseplads. Geologiske forhold. Rapport H10, Lossepladsprojektet.
- Jacobsen, R. (1991). Hydraulik og stoftransport i opsprækket kalk. Rapport H9. Lossepladsprojektet.
- Jensen, K. Høgh (1983). Simulation of water flow in the unsaturated zone including the root zone. Institute of Hydrodynamics and Hydraulic Engineering. Technical University of Denmark, Series Paper No. 33.
- Jensen, K. Høgh, A. Refsgaard og K. Bitsch (1991). Undersøgelser ved Vejen losseplads: Matematisk modellering. Rapport M1/2. Lossepladsprojektet.
- Killey, R.W.D. and G.L. Moltyaner (1988). Twin Lake tracer tests: Setting, methodology, and hydraulic conductivity distribution. *Water Resour. Res.*, 24(10), 1585-1612.
- Kipp, K.L. (1987). A computer code for simulation of solute transport in three-dimensional groundwater flow systems. U.S. Geological Survey Water Resources Investigations Report.
- Kjeldsen, P. (1990). Perkolatkarakterisering. Rapport P3, Lossepladsprojektet.

- Konikow, L.F. and J.D. Bredehoeft (1978). Computer model of two-dimensional solute transport and dispersion in groundwater. Techniques of water resources investigations of the United States Geological Survey, Book 7, Chapter C2.
- Konikow, L.F. and D.B. Grove (1977). Derivation of equations describing solute transport in groundwater. U.S. Geological Survey, Water Resources Investigations, 77-19.
- Kristiansen, H. og Laier, T. (1990). Undersøgelse ved Vejen losseplads. Uorganisk grundvandskvalitet. Rapport H13, Lossepladsprojektet.
- Lallemand-Barries, A. and P. Peaudecerf (1978). Recherche des relations entre la valeur de la dispersivité macroscopique d'un milieu aquifère, ses centres caractéristiques et les conditions de mesure. Etude bibliographique, Bulletin du BRGM, 2nd. série, section III, no. 4, 227-284.
- Mackay, D.M., D.L. Freyberg, P.V. Roberts and J.A. Cherry (1986). A natural gradient experiment on solute transport in a sand aquifer. 1, Approach and overview of plume movement. Water Resour. Res., 22(13), 2017-2029.
- Matheron, G. and G. de Marsily (1980). Is transport in porous media always diffusive? A counter-example, Water Resour. Res., 16(5), 901-917.
- Parker, J.C. and M. Th. van Genuchten (1984). Flux-averaged and volume averaged concentrations in continuum approaches to solute transport. Water Resour. Res., 20, 866-872.
- Refsgaard, A., J.C. Refsgaard and T. Clausen (1992). A Three-Dimensional Module for Groundwater Flow and Solute Transport in the SHE. DHI - submitted to Journal of Hydrology.

- Refsgaard, A. and H.R. Sørensen (1991). Undersøgelser ved Vejen losseplads. Tre-dimensional modellering af alternative afværgeforanstaltninger. Rapport R4. Lossepladsprojektet.
- Refsgaard, J.C. og O. Stang (1981). An integrated ground-water/surface water hydrological model. Dansk Komité for Hydrologi. Rapport H13.
- Schincariol, R.A. and F.W. Schwartz (1990). An experimental investigation of variable density flow and mixing in homogeneous and heterogeneous media. Water Resour. Res. 26(10), 2317-2329.
- Schleidegger, A.E. (1961). General theory of dispersion in porous media. Jour. Geophys. Research, 66(10), 3273-3278.
- Stang, O. (1981). A regional groundwatermodel for the Suså area. Dansk Komite for Hydrologi. Rapport H9.
- Sudicky, E.A. and P.S. Huyakorn (1991). Contaminant migration in imperfectly known heterogeneous groundwater systems. Reviews of Geophysics. U.S. National Report to International Union of Geodesy and Geophysics 1987-1990, 240-253.
- Sudicky, E.A. and R.G. MacLaren (1992). The LaPlace transform Galerkin technique for large-scale simulation of mass transport in discretely fractured porous formations. Water Resour. Res., 28(2), 499-514.
- Traberg, R. (1992). Geokemisk modellering af forureningstransport i grundvand - Perkolatudslip fra slaggedeponi i Vestskoven. Eksamensprojekt ved Institutet for Strømningsmekanik og Vandbygning, DTH.

Tyson, H. N. and E.M. Weber (1964). Groundwater management for the nation's future - Computer simulation of groundwater basins. J. Hydraul. Div. Amer. Soc. Civil Eng., 90, HY4, 59-77.

Van Roy, D. (1987). Conditional stochastic simulation of groundwater contamination. A case study. Institutttet for Strømningsmekanik og Vandbygning, Danmarks Tekniske Højskole. Series Paper No. 42.



## UDGIVNE RAPPORTER

I forbindelse med LOSSEPLADSPROJEKTET er der med denne rapport ialt udgivet følgende rapporter:

### HYDROGEOLOGI

EN REGIONAL GEOLOGISK MODEL FOR OMRÅDET VED VEJEN, Institut for Teknisk Geologi, DTH (Rapport H0-1, 20 sider), december 1987. ISBN 87-503-7079-0.

SEVA: PC-DATABASE FOR GEOLOGI, HYDROLOGI OG VANDKVALITET, Institut for Teknisk Geologi, DTH (Rapport H0-2, 46 sider), december 1990, ISBN 87-503-8915-7.

UNDERSØGELSER VED VEJEN LOSSEPLADS: GEOLOGISK, HYDROGEOLOGISK, GEOKEMISK INTEGRATION, Danmarks Geologiske Undersøgelse (Rapport H0-3, 110 sider), december 1991, ISBN 87-503-9547-5.

UNDERSØGELSER VED VEJEN LOSSEPLADS: LAGFØLGEBORINGER, Geoteknisk Institut (Rapport H1, 122 sider), juli 1990, ISBN 87-503-8183-0.

VEJEN INJEKTIONSFORSØG: HYDROGEOLOGI, Laboratoriet for teknisk Hygiejne, Danmarks Geologiske Undersøgelse m. fl. (Rapport H2, 168 sider), juni 1991, ISBN 87-503-9211-5.

UNDERSØGELSER VED VEJEN LOSSEPLADS: RESERVOIRFORHOLD OG FORURENINGSUDBREDELSE BESTEMT VED BOTESAM-METODEN, Danmarks Geologiske Undersøgelse (Rapport H5, 125 sider), oktober 1990, ISBN 87-503-8736-7.

UNDERSØGELSER VED VEJEN LOSSEPLADS: POTENTIALEFORHOLD, Geoteknisk Institut (Rapport H6, 121 sider), maj 1991, ISBN 87-503-9110-0.

BOTESAM OG SNEGLEBORING: SAMMENLIGNENDE UNDERSØGELSER, Laboratoriet for Geofysik (Århus Universitet), Danmarks Geologiske Undersøgelse og Lossepladsprojektets sekretariat (Rapport H7, 47 sider), oktober 1991, ISBN 87-503-9352-9.

EVALUERING OG UDVIKLING AF METODER TIL PRØVETAGNING OG FELTANALYSE AF ANOXISK GRUNDEVAND, Institut for Teknisk Geologi, DTH (Rapport H8, 82 sider), oktober 1990, ISBN 87-503-8738-3.

HYDRAULIK OG STOFTRANSPORT I EN OPSPRÆKKET KALKBJERGART, Danmarks Geologiske Undersøgelse (Rapport H9, 70 sider), maj 1991, ISBN 87-503-9137-2.

UNDERSØGELSER VED VEJEN LOSSEPLADS: GEOLOGISKE FORHOLD, Danmarks Geologiske Undersøgelse (Rapport H10, 100 sider), december 1989, ISBN 87-503-8182-2.

UNDERSØGELSER VED VEJEN LOSSEPLADS: FYSISK-KEMISK SEDIMENTKARAKTERISERING, Institut for Geologi og Geoteknik (Rapport H11, 55 sider), oktober 1991, ISBN 87-503-9354-5.

UNDERSØGELSER VED VEJEN LOSSEPLADS: UORGANISK GRUNDEVANDSKVALITET, Danmarks Geologiske Undersøgelse (Rapport H12/13, 82 sider), december 1990, ISBN 87-503-8916-5.

## FORURENINGSKEMI

AMTSKOMMUNALE UNDERSØGELSER AF GRUNDVANDSFORURENING VED GAMLE LOSSEPLADSER, Laboratoriet for teknisk Hygiejne (Rapport P0-1, 72 sider), december 1990, ISBN 87-503-8918-1.

UNDERSØGELSER VED VEJEN LOSSEPLADS: TUNGMETALLER, Laboratoriet for teknisk Hygiejne, DTH (Rapport P0-2, 36 sider), december 1992, ISBN 87-601-3527-1.

FORURENINGSKEMISK INTEGRATION, Laboratoriet for teknisk Hygiejne, DTH (Rapport P0-3, 88 sider), december 1992, ISBN 87-601-3529-8.

UNDERSØGELSER VED VEJEN LOSSEPLADS: ORGANISK GRUNDVANDSKVALITET OG ANALYSEUDVIKLING, Vandkvalitetsinstituttet (Rapport P1, 57 sider), maj 1991, ISBN 87-503-9093-7.

ØKOTOKSIKOLOGISKE METODER TIL UNDERSØGELSE AF FORURENET GRUNDVAND - LITTERATURUNDERSØGELSE, Vandkvalitetsinstituttet (Rapport P2-1, 56 sider), maj 1988, ISBN 87-503-7323-4.

UNDERSØGELSER VED VEJEN LOSSEPLADS: ØKOTOKSIKOLOGI, Vandkvalitetsinstituttet (Rapport P2-2, 47 sider), december 1991, ISBN 87-503-9552-1.

UNDERSØGELSER VED VEJEN LOSSEPLADS: PERKOLATUDSIVNING, Laboratoriet for teknisk Hygiejne, DTH (Rapport P3, 180 sider), maj 1991, ISBN 87-503-9094-5.

VEJEN INJEKTIONSFORSØG: UORGANISK STOFTRANSPORT, Laboratoriet for teknisk Hygiejne, DTH (Rapport P4, 135 sider), december 1992, ISBN 87-601-3530-1.

SORPTION AF ORGANISKE STOFFER, Laboratoriet for teknisk Hygiejne, Danmarks Tekniske Højskole (Rapport P5-1, 85 sider), juli 1988, ISBN 87-503-7322-6.

SORPTION AF ORGANISKE STOFFER I AKVIFERER: LABORATORIEUNDERSØGELSER, Laboratoriet for teknisk Hygiejne, DTH (Rapport P5-2, 106 sider), juli 1990, ISBN 87-503-8184-9.

GRUNDVANDZONENS MIKROBIOLOGI, Afdelingen for Generel Mikrobiologi, Københavns Universitet (Rapport P6-1, 80 sider), januar 1988, ISBN 87-503-7118-5.

UNDERSØGELSER VED VEJEN LOSSEPLADS: GRUNDVANDSZONENS MIKROBIOLOGI, Afdelingen for Generel Mikrobiologi, Københavns Universitet, (Rapport P6-2, 90 sider), december 1989, ISBN 87-503-8183-0.

FORURENINGSBETINGEDE ÆNDRINGER AF HYDRAULISK LEDNINGSEVNE I LEREDE AFLJEJRINGER: LITTERATURUNDERSØGELSE, Geoteknisk Institut (Rapport P7-1, 77 sider), december 1992, ISBN 87-601-3532-8.

FORURENINGSBETINGEDE ÆNDRINGER AF HYDRAULISK LEDNINGSEVNE I MORÆNELER: LABORATORIEFORSØG, Geoteknisk Institut (Rapport P7-2, 48 sider), december 1992, ISBN 87-601-3533-6.

## MATEMATISK MODELLERING

MATEMATISK INTEGRATION, Institut for Strømningsmekanik og Vandbygning, DTH/Dansk Hydraulisk Institut (Rapport M0, 96 sider), december 1992, ISBN 87-601-3534-4.

UNDERSØGELSER VED VEJEN LOSSEPLADS: MATEMATISK MODELLERING, Institut for Strømningsmekanik og Vandbygning/Dansk Hydraulisk Institut (Rapport M1/2, 160 sider), februar 1991, ISBN 87-503-8972-6.

MODELLERING AF STOFTRANSPORT I OPSPRÆKKET KALK, Institut for Strømningsmekanik og Vandbygning, DTH (Rapport M3, 53 sider), december 1992, ISBN 87-601-3535-2.

OPERATIONALISERING AF EN TRE-DIMENSIONAL STOFTRANSPORTMODEL, Dansk Hydraulisk Institut (Rapport M4/7, 88 sider), februar 1991, ISBN 87-505-8971-8.

VEJEN INJEKTIONS FELT: DISPERSION, Institut for Strømningsmekanik og Vandbygning/Laboratoriet for teknisk Hygiejne, DTH (Rapport M5/6, 107 sider), december 1991, ISBN 87-503-9549-1.

## AFVÆRGEFORANSTALTNINGER

OVERSIGT OVER DANSKE OG UDENLANDSKE AFVÆRGEFORANSTALTNINGER, Vandkvalitetsinstituttet (Rapport R0-1, 82 sider), december 1990, ISBN 87-503-8917-3.

UNDERSØGELSER VED VEJEN LOSSEPLADS: RENSNING AF PERKOLATFORURENET GRUNDVAND, Vandkvalitetsinstituttet (Rapport R1, 80 sider), december 1991, ISBN 87-503-9550-5.

UNDERSØGELSER VED VEJEN LOSSEPLADS: IN-SITU MÅLING AF NEDBRYDNINGSPOTENTIALER I GRUNDEVANDSZONEN, Laboratoriet for teknisk Hygiejne (Rapport R2-1, 30 sider), november 1991, ISBN 87-503-9456-8.

UNDERSØGELSER VED VEJEN LOSSEPLADS: NEDBRYDNING AF MCPP I GRUNDEVANDSZONEN, Laboratoriet for teknisk Hygiejne (Rapport R2-2, 63 sider), juni 1991, ISBN 87-503-9213-1.

AFVÆRGE PUMPNING VED SEPARATIONSPUMPNING - FASE 1: DEMONSTRATIONSMODEL, Danmarks Geologiske Undersøgelse (Rapport R3-1, 67 sider), december 1990; ISBN 87-503-8920-3.

UNDERSØGELSER VED VEJEN LOSSEPLADS: TRE-DIMENSIONAL MODELLERING AF ALTERNATIVE AFVÆRGEFORANSTALTNINGER, Dansk Hydraulisk Institut (Rapport R4, 45 sider), maj 1991, ISBN 87-503-9095-3.

## AFVÆRGEUDVIKLINGSRAPPORTER

BIOLOGISK NEDBRYDNING AF KLOREREDE OPLØSNINGSMIDLER - PROJEKTER GENNEMFØRT VED SKRYDSTRUP SPECIALDEPOT, Afdeling for Generel Mikrobiologi, Laboratoriet for teknisk Hygiejne med flere (Rapport A1, 81 sider), november 1991. ISBN 87-503-9453-3.

NEDBRYDNING AF DIESELolie I UMÆTTET JORD: LABORATORIEUNDERSØGELSER, Laboratoriet for teknisk Hygiejne, Cowiconsult og Dansk Teknologisk Institut (Rapport A2, 85 sider), november 1991. ISBN 87-503-9454-1.

AFVÆRGE PUMPNING VED SEPARATIONSPUMPNING - FASE 2 & 3: FELTFORSØG, Danmarks Geologiske Undersøgelse/Geoteknisk Institut (Rapport A3, 120 sider), maj 1991. ISBN 87-503-9111-9.

#### UDREDNINGSRAPPORTER

NEDBRYDELIGHED AF MILJØFREMMEDE ORGANISKE STOFFER, Lossepladsprojektets sekretariat, DTH (Rapport U1, 105 sider), oktober 1987. ISBN 87-503-7017-0.

FORURENEDE INDUSTRIGRUNDE, Lossepladsprojektets sekretariat, DTH (Rapport U2, 130 sider), januar 1988, ISBN 87-503-7081-2.

GRUNDEVANDSPRØVETAGNING OG FELTMÅLING, Lossepladsprojektets sekretariat, DTH, (Rapport U3, 222 sider), april 1989, ISBN 87-503-7817-1.

FORURENEDE GASVÆRKSGRUNDE, Lossepladsprojektets sekretariat, DTH, (Rapport U4, 221 sider), november 1989, ISBN 87-7491-315-8.

ANVENDELSE AF PHOTOIONISATIONSDETEKTOR VED UNDERSØGELSE AF JORDFORURENING, Lossepladsprojektets sekretariat, DTH, (Rapport U5, 52 sider), december 1989, ISBN 87-503-8173-3.

KILDER TIL INDUSTRIKORTLÆGNING, Geokon A/S, (Rapport U6, 140 sider), december 1989, ISBN 87-503-8174-1.

SKRYDSTRUP SPECIALDEPOT - Erfaringer fra undersøgelser og afværgeforanstaltninger, Lossepladsprojektets sekretariat, DTH, (Rapport U7, 60 sider), december 1989, ISBN 87-503-8174-1.

JORDPRØVETAGNING PÅ FORURENEDE GRUNDE - Strategier, metoder og håndtering, Lossepladsprojektets sekretariat, DTH (Rapport U8, 110 sider), april 1991, ISBN 87-503-9043-0.