



UPPSALA
UNIVERSITET

UPTEC W 25006

Examensarbete 30 hp

Februari 2025

Grundvattenpumpning som saneringsåtgärd för PFAS – en modellstudie vid Sundsvall-Timrå Airport

Ellen Dahlin





Abstract

PFAS contamination poses a significant threat to water resources in Sweden, particularly near firefighting training sites where large releases of PFAS-containing firefighting foam have occurred over long periods. Groundwater pumping may help prevent the spread of PFAS to surrounding environments, but its effectiveness could be limited by factors such as sorption to aquifer materials and geological conditions that hinder groundwater flow and transport of PFAS.

This study evaluates the potential for PFAS removal from the groundwater zone through pumping at a former firefighting training site at Sundsvall-Timrå Airport, where high PFAS levels in soil and groundwater pose a risk of contamination to the nearby Sörån stream. Groundwater flow and PFAS transport are modeled using MODFLOW and MT3D-USGS. Several scenarios are analyzed, comparing well placement, screen depth, and pumping rates. Remediation efficiency is assessed by examining PFAS mass reduction over 50 years.

Results suggest that at least 50 years of groundwater pumping are needed to achieve a 90% reduction in PFAS mass in the saturated zone. High pumping rates are necessary, but they carry the risk of drawing water from Sörån. The presence of silt in the otherwise sandy soil may hinder PFAS transport and extend the remediation process. The method is also constrained by PFAS sorption, with compounds having higher distribution coefficients (K_d -values) requiring longer pumping durations. This study enhances understanding of the opportunities and limitations of groundwater pumping for PFAS-contaminated groundwater remediation.

It is recommended that the results from this project be interpreted together with site-specific K_d -values for the occurring PFAS substances at the location, in order to better draw conclusions about the timeframes for remediating PFAS from the groundwater.

Keywords: PFAS, Sorption, Groundwater Pumping, Groundwater Modeling, MODFLOW, MT3D-USGS

REFERAT

Grundvattenpumpning som saneringsåtgärd för PFAS – en modellstudie vid Sundsvall-Timrå Airport

Ellen Dahlin

PFAS-föreningar utgör ett allvarligt hot mot vattentillgångarna i Sverige, särskilt i närheten av brandövningsplatser där stora utsläpp av PFAS-innehållande brandsläckningsskum har skett under lång tid. För att förhindra spridning av PFAS till omgivande miljö skulle grundvattenpumpning kunna sättas in som åtgärd. Dess effektivitet kan dock begränsas av faktorer som sorption till akviferens material och en geologi som hindrar grundvattenflödet och försvårar transporten av PFAS.

I detta arbete utvärderas möjligheterna att avlägsna PFAS från grundvattenzonen genom grundvattenpumpning vid en tidigare brandövningsplats vid Sundsvall-Timrå Airport. Där har mycket höga halter PFAS uppmätts i jord och grundvatten som riskerar att transporteras till den närliggande Sörån. Grundvattenflöde och transport av PFAS modelleras i GMS med MODFLOW och MT3D-USGS. Effektiviteten av pumpning jämförs i flera scenarier där effekten av brunnspacering, filterdjup och pumpflöde analyseras och jämförs. Saneringseffektiviteten bedöms genom att undersöka massreduktionen av PFAS över en 50-årsperiod.

Resultaten tyder på att minst 50 år av grundvattenpumpning krävs för att uppnå en saneringsgrad om 90 % med avseende på massa PFAS i den mättade zonen. För att uppnå detta krävs höga pumpflöden som innebär stor risk för att vatten dras in från Sörån. Förekomst av silt i den annars sandiga jorden kan dock begränsa transporten av PFAS och därmed förlänga saneringsprocessen ytterligare. Metoden begränsas av att PFAS sorberar och ämnen med högre fördelningskoefficient (K_d -värde) bidrar till behovet av att pumpa under lång tid.

Det rekommenderas att resultaten från detta projekt tolkas tillsammans med platsspecifika K_d -värden för förekommande PFAS-ämnen på platsen, för att bättre kunna dra slutsatser om tidsperspektiven för att sanera PFAS från grundvattnet.

Nyckelord: PFAS, Grundvattenpumpning, Sorption, Grundvattenmodellering, MODFLOW, MT3D-USGS

FÖRORD

Detta examensarbete utfördes under hösten och våren 2024/25 som det avslutande arbetet efter fem och ett halvt års studier vid civilingenjörsprogrammet i miljö- och vattenteknik vid Uppsala Universitet och Sveriges Lantbruksuniversitet. Projektet har genomförts som en del i SGI:s arbete inom ramen för regeringsuppdraget om PFAS, för forskning och kunskapsspridning rörande undersökning, utredning och åtgärder av PFAS-förorenade områden. Inom ramen för regeringsuppdraget har undersökningar genomförts, vilka har finansierats av regeringens anslag 1:4 Sanering och återställning av förorenade områden. Vissa preliminära resultat används i detta arbete med godkännande av SGI. Handledare för projektet var Robert Earon på SGI. Ämnesgranskare var Fritjof Fagerlund från institutionen för geovetenskaper på Uppsala Universitet.

Jag vill börja med att tacka Robert Earon, för ovärderlig vägledning och lärorika samtal under hela projektet. Jag har särskilt uppskattat din stöttning i de stunder då modelleringen känts extra utmanande. Men som sagt, hade det varit lätt hade alla gjort det. Ett varmt tack vill jag också rikta till Fritjof Fagerlund, för din hjälpsamhet och dina värdefulla synpunkter på arbetet. Du har en fantastisk förmåga att uppfatta och svara på frågor, även när studenten själv inte förstår vad det är den inte förstår.

Ett stort tack till Dan Berggren Kleja på SGI och SLU för att ha initierat detta spännande projekt. Tack också till Michael Pettersson på SGI samt Jenny Westerberg, Ulrika Iverfelt och Anders G. Christensen på Niras för ert engagemang och bidrag under projektets gång.

Sist men inte minst, tack mina vänner på programmet för allt kul vi har gjort under årens gång, tack Johan för dina kloka och lugnande råd och tack familjen för all er stöttning!

POPULÄRVETENSKAPLIG SAMMANFATTNING

När det brinner räknas varje sekund: elden måste släckas snabbt. Brandkåren behöver hela tiden öva på detta för att alltid vara redo. Detta görs vid specifika brandövningsplatser. Vid övningarna används ofta ett speciellt brandsläckningsskum som är mycket effektivt för att släcka bränder.

Problemet är att skummet innehåller PFAS, en grupp kemikalier som visat sig vara skadliga för miljön och människors hälsa. PFAS sprids lätt i vatten och har hittats i höga halter i både jord och grundvatten nära brandövningsplatser. Eftersom ämnena är svåra att bryta ner i naturliga förhållanden riskerar de att spridas vidare till omgivande vattendrag och dricksvatten. Eftersom nästan alla människor har PFAS i blodet och forskning tyder på att det är skadligt för vår hälsa, är det viktigt att förhindra spridning till omgivande miljöer.

För att minska spridningen kan grundvattenpumpning användas. Det innebär att förorenat grundvatten pumpas upp och kan då renas ovan mark för sedan antingen återföras till marken eller släppas ut i en flod eller sjö. Genom att pumpa vattnet kan man också hindra grundvattenflödet och därmed bromsa transporten av PFAS. Men är det en bra lösning? Innan man börjar måste man veta hur lång tid det tar, vad det kostar och hur effektivt det är. Kan all PFAS verkligen avlägsnas? Det är dessa frågor som detta arbete har undersökt.

Som fallstudie har en tidigare brandövningsplats vid Sundsvall-Timrå Airport undersökts, där mycket höga PFAS-halter har uppmätts i jord och grundvatten. Ett problem där är att föroreningarna riskerar att transporteras med grundvattnet mot det närliggande vattendraget Sörån, vilket innebär risk för långväga spridning i miljön.

För att studera detta har en datormodell av området vid flygplatsen byggts upp. Modellen är baserad på tillgänglig data om marklager och föroreningssituation. Modellen används för att simulera grundvattenflöde och PFAS-transport. Undersökningen av effektiviteten av grundvattenpumpning är uppbyggd som en jämförelse mellan flera scenarier. I modellen testas olika placeringar av brunnar där vatten pumpas upp, samt effekterna av varierande brunnsdjup och pumpflöden. Resultaten visar att det i samtliga fall är svårt att effektivt avlägsna PFAS genom grundvattenpumpning.

Ett av huvudproblemen är att PFAS sorberar, det vill säga fastnar på markpartiklar. När ämnena binds till jorden istället för att vara lösta i vattnet, blir de svårare att pumpa upp. Ju starkare sorptionen är, desto längre tid tar saneringen. Denna undersökning visar att det kan krävas minst 50 år av pumpning för att avlägsna PFAS, men att det till och med kan ta uppemot 100 år. Sorptionen till markpartiklarna är mycket begränsande och effektiviteten av åtgärden beror mycket på hur mycket PFAS det finns i mark och grundvatten vid brandövningsplatsen, samt hur starkt de är bundna till markpartiklarna.

Om man pumpar mer vatten avlägsnas mer PFAS och det går snabbare. Ett annat problem som då uppstår är att höga pumpflöden kan leda till att rent vatten från Sörån dras in i det förorenade området, vilket gör att ännu mer vatten behöver renas. Om man däremot pumpar långsammare, förlängs saneringsprocessen ytterligare.

Man vet inte exakt hur marklagren ser ut vid brandövningsplatsen som undersöks i denna studie, men några undersökningar visar tecken på att det kan förekomma en del silt i den annars sandiga jorden. Silt är en typ av jordmaterial som är väldigt finkornigt. Vatten rinner långsamt genom silt, och PFAS fastnar lättare i dessa jordpartiklar. Denna undersökning antyder att om det finns mycket silt i marken finns det risk för att PFAS fastnar där. Detta innebär att saneringen kan ta ännu längre tid än vad man förväntar sig från början.

Denna studie visar att grundvattenpumpning är ineffektivt som enskild saneringsmetod för PFAS-förorenat grundvatten. Det tar lång tid och det kan innebära stora kostnader. Däremot kan metoden användas för att begränsa spridningen, genom att bromsa grundvattenflödet och förhindra att PFAS når Sörån. Det kan vara en tillfällig lösning i väntan på mer effektiva saneringsåtgärder.

ORDLISTA

AFFF Aqueous Film-Forming Foam

DNAPLs Dense Non-Aqueous Phase Liquids

FOSA Perfluorooktansulfonamid

FTAB Fluortelomersulfonamidalkylbetain

FTSA Fluortelomersulfonat

GMS Groundwater Modeling System

LNAPLs Light Non-Aqueous Phase Liquids

MODFLOW Modular Three-Dimensional Finite-Difference Groundwater Flow Model

MT3DMS Modular Transport 3-Dimensional Multi-Species model

OECD Organisation for Economic Co-operation and Development

PFAS Per- och polyfluorerad alkylsubstans

PFBS Perfluorbutansulfonsyra

PFHxA Perfluorhexansyra

PFHxS Perfluorhexansulfonsyra

PFNA Perfluorononansyra

PFOA Perfluoroktansyra

PFOS Perfluoroktansulfonsyra

PFPeA Perfluorpentansyra

USGS United States Geological Survey

INNEHÅLL

1	INTRODUKTION	1
1.1	Per- och polyfluorerade alkylsubstanser	1
1.1.1	Kemiska och fysikaliska egenskaper	2
1.1.2	Användningsområden	2
1.1.3	Transport i miljö	3
1.1.4	Toxicitet och hälsorisker	5
1.1.5	Lagstiftning och gränsvärden	5
1.1.6	Regeringsuppdraget om PFAS	5
1.2	Pump-and-treat	6
1.3	Grundvatten- och transportmodellering	7
1.3.1	Grundvattenflöde och MODFLOW	8
1.3.2	Föroreningstransport och MT3DMS	9
1.3.3	Kalibrering av flödesmodeller	10
1.3.4	Geostatistik och T-PROGS	11
2	SYFTE OCH FRÅGESTÄLLNINGAR	12
3	FALLSTUDIE: SUNDSVALL-TIMRÅ AIRPORT	13
3.1	Lokalisering	13
3.2	Brandövningsplatser	14
3.3	Geologi	16
3.4	Hydrogeologi	17
4	METOD	18
4.1	Regional modell	18
4.1.1	Modellområde	18
4.1.2	Rasternät	18
4.1.3	Randvillkor	19
4.1.4	Marklager och markegenskaper	19

4.1.5	Grundvattenbildning	20
4.1.6	Flödessimulering	21
4.1.7	PFAS-modell	22
4.2	Extraktionsbrunnar	23
4.3	Lokala modeller	25
4.3.1	Modellområde	25
4.3.2	Rasternät	26
4.3.3	Randvillkor	26
4.3.4	Geologiska heterogeniteter	27
4.3.5	PFAS-modell	30
4.4	Kalibrering och validering	31
5	RESULTAT	32
5.1	Regional modell	32
5.1.1	Flödessimulering	32
5.1.2	PFAS-plym	34
5.1.3	Extraktionsbrunnar	35
5.2	Lokala modeller	37
5.2.1	Flödessimuleringar utan brunnar	37
5.2.2	PFAS-simulering	39
5.2.3	Flödessimuleringar med brunnar	42
5.2.4	Flöde över modellgräns	45
5.2.5	Massreduktion av PFAS per K_d -värde	47
5.2.6	Koncentration på modellrand	50
5.2.7	Geologiska heterogeniteter	54
6	DISKUSSION	61
6.1	Brunnarnas effekt	61
6.1.1	Grundvattenavsänkning	61
6.1.2	Flöde över modellgräns, flödesriktning och masstransport	61
6.1.3	Massreduktion	62
6.1.4	Koncentration på modellrand	63

6.2	Effekt av K_d -värde	64
6.3	Effekt av heterogeniteter	64
6.3.1	Modellens känslighet för ändring av porositet	65
6.4	Tid för sanering	66
6.5	Modellutformning och metod	67
6.5.1	Kalibrering och validering av flödesmodeller	67
6.5.2	Utformning av lokala modeller	67
6.5.3	PFAS-modellen	68
6.5.4	Marklager och materialegenskaper	69
6.6	Fortsatta studier	70
7	SLUTSATSER	72
8	REFERENSER	73
9	APPENDIX	77
9.1	Hydraulisk konduktivitet och material	77
9.2	Grundvattenbildning	78
9.3	Regional modell: Kalibreringsdata	80
9.4	T-PROGS	82
9.5	Lokala modeller	85
9.5.1	Flödessimuleringar utan brunnar	85
9.5.2	Massreduktion av PFAS per brunnscenario	90

1 INTRODUCTION

Per- och polyfluorerade alkylsubstanser (PFAS) är en grupp ämnen som används i många olika typer av produkter och för många olika ändamål, vilka har visat sig vara skadliga för människa och natur. PFAS har bland annat använts i brandsläckningsskum vilket har lett till stora utsläpp till mark och vatten. En mycket betydande spridningsväg för PFAS i miljön är via yt- och grundvatten (SLU 2023). Vattentänker i närheten av brandövningsplatser har visat sig ha förhöjda halter av PFAS till följd av användandet av brandsläckningsskum som innehåller PFAS. Dessa brandövningsplatser utgör viktiga punktkällor för PFAS-utsläpp i Sverige (Miljöinstitutet 2023).

En sedan länge etablerad och välanvänd metod för rening av grundvatten är *pump-and-treat*, det vill säga att pumpa upp grundvatten och rena det ovan mark (SGF u.å.[a]). Denna metod som enskild saneringsåtgärd för PFAS har emellertid visat sig ineffektiv (Birnstingl och Wilson 2024; Hall et al. 2024), eftersom det utan sanering av källzonen finns risk att grundvattnet återkontamineras av läckande föroreningar. Beroende på föroreningssituation kan detta pågå under lång tid, ibland decennier (Birnstingl och Wilson 2024; Hall et al. 2024; SGF u.å.[a]). Transporten av PFAS i grundvattnet är emellertid beroende av många olika faktorer, vilka varierar från plats till plats. Vid planering av saneringsåtgärder är det därför viktigt att ha god platskännedom och kunskap om föroreningssituationen och rådande specifika geologiska och hydrologiska förhållanden. Grundvatten- och transportmodellering är ett verktyg som kan användas för att kartlägga transporten av PFAS i grundvatten.

I detta arbete används modellering för att utvärdera möjligheterna att använda grundvattenpumpning som saneringsåtgärd vid en tidigare brandövningsplats vid Sundsvall-Timrå Airport. Undersökningen genomförs som en fallstudie med data från den gamla brandövningsplatsen vid Sundsvall-Timrå Airport. Där har höga halter PFAS påträffats, som riskerar att transporteras med grundvattnet till ett närliggande vattendrag. Där finns ett behov av att minska mängden PFAS i grundvattnet för att minska risken för läckage av PFAS till omgivande miljöer.

I följande avsnitt presenteras en bakgrund till vad PFAS är och dess rörelse i miljön. I anslutning till detta ges en kort översikt över det regeringsuppdrag om PFAS som SGI arbetar med, samt vilka åtgärdsmetoder för PFAS som testas inom ramen för regeringsuppdraget. Vidare beskrivs saneringsmetoden *pump-and-treat* och det ges en bakgrund till hur grundvatten- och transportmodellering fungerar.

1.1 PER- OCH POLYFLUORERADE ALKYLSUBSTANSER

PFAS är samlingsnamnet på en mycket stor ämnesgrupp med över tio tusen identifierade kemikalier med olika struktur, funktionella grupper och egenskaper. De är syntetiskt framställda ämnen och har en kolkedja där en eller flera av de väteatomer som normalt är bundna till kolatomerna är utbytta mot fluoratomer (Kemikalieinspektionen 2021). Det finns i nuläget ingen internationell överenskommelse för hur begreppet PFAS ska definieras, men 2021 utformade OECD (Organisation for Economic Co-operation and Development) en definition som har fått brett erkännande (Kemikalieinspektionen 2024). PFAS definieras som ämnen som innehåller minst en fullt fluorerad metylgrupp ($-\text{CF}_3$) eller fullt fluorerad metylengrupp ($-\text{CF}_2-$), utan någon bind-

ning till en väte-, klor-, brom- eller jodatombindning (OECD 2021). Om samtliga kolatomer i kolkedjan är fluorerade kallas den för perfluorerad. Om det finns minst en väteatom bunden till en kolatom kallas den för polyfluorerad (Kemikalieinspektionen 2021).

1.1.1 Kemiska och fysikaliska egenskaper

PFAS kan kategoriseras utifrån kolkedjelängd. PFAS kan beskrivas som långkedjade om kedjan består av åtta kolatomer eller fler ($C > 7$), korta ($C = 4-7$) eller ultrakorta ($C = 2-3$) (McGarr et al. 2023). Ett exempel på en långkedjad PFAS är perfluoroktansulfonsyra (PFOS), med åtta kolatomer i kedjan. Perfluorhexansulfonsyra (PFHxS) räknas som en kortkedjad PFAS med sex kolatomer i kedjan (Kemikalieinspektionen 2024). Bindningen mellan kol- och fluoratomer är extremt stark, varpå de långa molekylerna generellt sett är mer stabila och svårnedbrytbara. Emellertid påverkas stabiliteten också av molekylstukturen. Korta kolkedjor med cyklisk eller förgrenad struktur är exempel på molekyler som kan uppvisa hög stabilitet (Kemikalieinspektionen 2024). Kolkedjans längd påverkar dessutom vattenlösligheten och fastläggningen i jord och mark. Längre kolkedjor innebär generellt sett högre sorption och lägre löslighet jämfört med kortare kedjor. Sorptionen är dessutom beroende av flera andra egenskaper i marken (Brusseau 2023; Rasmusson och Fagerlund 2024), vilket vidare redogörs för i avsnitt 1.1.3.

Generellt för alla PFAS är att de är persistenta, det vill säga långlivade och svårnedbrytbara. I naturliga förhållanden förekommer ingen fullständig nedbrytning av PFAS (Kemikalieinspektionen 2024). Detta gör dem tåliga mot värme, låga pH och oxiderande kemiska miljöer (Kemikalieinspektionen 2021). Vissa PFAS-ämnen kan långsamt brytas ned och omvandlas till andra PFAS. Dessa ämnen kallas för prekursorer. Förekomst av prekursorer kan innebära att ett PFAS-ämne ökar i koncentration långt efter att den initiala kontamineringen har upphört, i takt med att nedbrytning och omvandling sker (Kemikalieinspektionen 2024; McGarr et al. 2023). De bör därför beaktas i miljöundersökningar, åtgärdsplanering och riskbedömning av PFAS-föreningar (Kemikalieinspektionen 2021; SGF 2023).

Vidare har många PFAS egenskapen av att vara ytaktiva. Detta beror på molekylernas generella struktur. De har både en hydrofob del bestående av den fluorerade kolkedjan, och en hydrofil del bestående av den funktionella gruppen (Kemikalieinspektionen 2021). Långkedjiga och raka PFAS är mer hydrofoba än kortkedjiga och grenade former med samma kemiska formel (McGarr et al. 2023). De tenderar att lägga sig vid gränsskiktet mellan en vätska och en fast yta, eller mellan vätska och luft. Detta ger dem förmågan att bilda en tunn film och samtidigt avvisa både vatten och fett (Kemikalieinspektionen 2021). I vissa fall finns även en länk mellan den hydrofoba och den hydrofila delen. Att dessa tre komponenter kan varieras innebär stora möjligheter för skapandet av nya PFAS-ämnen (Kemikalieinspektionen 2024).

1.1.2 Användningsområden

Sedan 1950-talet har användningen av PFAS varit utbredd både inom industrin och i konsumentprodukter. På grund av sina praktiska egenskaper används PFAS i många olika typer av produkter (Glüge et al. 2020; Kemikalieinspektionen 2021). En sammanställning gjord av Glüge et al. (2020) visade att PFAS används inom nästan alla industriella branscher, till exempel elektronikindustrin, produktionen av plast- och gummiprodukter, bygg- och konstruktionssektorn, kemikalieindustrin och i tillverkningen av metallprodukter (Glüge et al. 2020).

Exempel på vanliga produkter som innehåller PFAS är rengöringsmedel, kläder och textilier, medicinsk utrustning, skönhetsprodukter och kabelisolering (Glüge et al. 2020). Många produkter med vatten-, fett- eller smutsavvisande egenskaper har en beläggning av PFAS, till exempel vattenavvisande textilier, matförpackningar och non stick-pannor (Kemikalieinspektionen 2021).

En produkt av särskild relevans för detta arbete är PFAS-innehållande brandsläckningsskum, på engelska *Aqueous Film-Forming Foams* (AFFF). PFAS ytaktiva egenskaper gör att de kan lägga sig i gränsytan mellan en vätska och luft. Detta är särskilt användbart vid vätskebränder eftersom det snabbt bildas en tunn film mellan den brinnande vätskan och luften, vilket släcker branden. Ämnenas persistens gör också att de tål höga temperaturer (Kemikalieinspektionen 2021). Av denna anledning har det under många årtionden skett stora utsläpp av PFAS på brandövningsplatser och flygplatser där AFFF har använts för att släcka bränder i olja, flygplansbränsle, andra icke-vattenlösliga kolväten, alkoholer och aceton (Glüge et al. 2020). Denna typ av brandsläckningsskum har bidragit till den omfattande utbredningen av PFAS i miljön, eftersom den utgör ett direkt utsläpp av kemikalierna till omgivningen med stor risk för spridning till yt- och grundvatten (Glüge et al. 2020). Vanligt förekommande PFAS i mark och grundvatten i anslutning till brandövningsplatser där AFFF har använts är PFOS, PFOA, PFHxS, PFHxA, PFPeA, PFNA och PFBS (Rasmusson och Fagerlund 2024). Vidare har AFFF också visat sig innehålla flertalet prekursorer, till exempel 6:2 FTSA, 8:2 FTSA, 6:2 FTAB och FOSA (Rasmusson och Fagerlund 2024). Dessa tenderar att stanna i marken under mycket lång tid och kan belasta grundvatten med sina nedbrytningsprodukter, även efter att användningen av AFFF har upphört. Detta innebär att markområden där AFFF har släppts ut måste genomgå fullständig sanering för att förhindra framtida PFAS-förorening av grundvattnet (Ruyle et al. 2020).

1.1.3 Transport i miljön

Den breda användningen av PFAS har resulterat i stor spridning i miljön och ämnena har upptäckts i mark, vatten, sediment, växter, djur och människor över hela världen, även långt ifrån ursprungskällorna (Brusseau et al. 2020; McGarr et al. 2023). Ämnenas omfattande spridning i miljön, deras toxicitet och risken för mänsklig exponering skapar ett stort behov av djupgående förståelse för relevanta transportprocesser, något som visat sig utmanande till följd av den stora komplexiteten i frågan (Brusseau 2023; McGarr et al. 2023). Både hydrogeologiska förhållanden på platsen och ämnenas kemiska egenskaper, såväl som biokemiska processer som nedbrytning och transformation påverkar hur de transporteras i miljön (McGarr et al. 2023).

Det är flertalet olika processer som styr transporten av PFAS i mark och grundvatten (Rasmusson och Fagerlund 2024). I den omättade zonen kan PFAS-ämnen infiltrera jorden och transporteras med perkolerande vatten. En del PFAS-ämnen kan avgå i gasform, men de som används i AFFF är i naturliga markförhållanden inte flyktiga. I övrigt styrs transporten av mekanismer för adsorption och desorption. I den mättade zonen transporteras lösta föroreningar med grundvattenflödet. Spridning och transport styrs här av mekanisk dispersion och diffusion, samt mekanismer för adsorption och desorption. Det kan även förekomma biologisk nedbrytning av prekursorer både i den omättade och mättade zonen, om än långsam (Rasmusson och Fagerlund 2024).

PFAS-ämnen är vattenlösliga och lösligheten ökar generellt sett med minskande längd på kolkedjan (McGarr et al. 2023; Rasmusson och Fagerlund 2024). Emellertid styrs lösligheten också

av den funktionella gruppen, och ämnen med lika många kolatomer kan vara olika vattenlösliga. I mark- och vattensystem sker en fördelning av PFAS mellan den flytande och fasta fasen, där kortkedjade föreningar uppvisar en högre affinitet för vattenfasen (Rasmusson och Fagerlund 2024).

Fördelningen mellan faserna beror utöver lösligheten också på hur ämnena sorberar till fasta markpartiklar och till gränssytor mellan faser. Sorptionen styrs av ämnenas kemiska egenskaper och de hydrogeologiska förhållandena på platsen och påverkar hur lång tid det tar för PFAS att transporteras genom en akvifer (Rasmusson och Fagerlund 2024). Faktorer som främjar hög sorption inkluderar hydrofoba egenskaper hos föroreningen, lång kolkedja samt en geologisk miljö med högt innehåll av organiskt material, stor finfraktion (lera och silt) och lågt pH (Rasmusson och Fagerlund 2024).

Fördelningen av PFAS mellan den fasta fasen och vattenfasen kan beskrivas med en distributionskoefficient, K_d , vilken beskriver förhållandet mellan koncentration av adsorberat PFAS i jorden, C_s (massa PFAS per massenhet fast material) och koncentration av löst PFAS i vatten, C_w (massa PFAS per volymenhet vatten) vid jämvikt och har enheten L/kg, se ekvation (1) nedan (McGarr et al. 2023).

$$K_d = \frac{C_s}{C_w} \quad (1)$$

Ju högre K_d -värde, desto högre sorption (Rasmusson och Fagerlund 2024). K_d -värden som tagits fram i labb är vanligtvis lägre än de som erhålls från platsspecifika fältdata, eftersom det inte alltid råder jämvikt i naturen (Rasmusson och Fagerlund 2024).

De geologiska förhållandena har stor betydelse för transport av PFAS genom mark- och grundvatten. Finkorniga jordar med hög halt av lera och silt samt torv innebär lägre permeabilitet, medan sandiga eller grusiga jordar innebär högre permeabilitet och därmed en större risk för spridning. Heterogena geologiska förhållanden kan således påverka hur en förorening sprids och transporteras i en akvifer (Rasmusson och Fagerlund 2024).

Vidare adsorberar PFAS också till gränssytor mellan vatten och luft, vilket har stor påverkan på transporten av PFAS i den omättade zonen. Adsorptionen till gränssytor beror till hög grad på vattenhalten och kornstorleken i jorden. Vid lägre vattenmättnad finns fler gränssytor där PFAS kan adsorbera. Det är i den omättade zonen som den huvudsakliga retardationen av PFAS sker (McGarr et al. 2023; Rasmusson och Fagerlund 2024). Om marken tillfälligt vattenmättas, till exempel vid kraftiga regn eller översvämningar, kan PFAS snabbt spolats bort och nå grund- eller ytvatten (Rasmusson och Fagerlund 2024).

Eftersom sorptionen av PFAS beror på så många faktorer är det svårt att ange generella K_d -värden. Variationer i jordegenskaper och hydrologiska förhållanden medför att sorptionen skiljer sig mellan olika miljöer. För en jord med en organisk kolhalt på 1-3 % och ett pH-värde mellan 5 och 7 har PFOS ett K_d -värde omkring 14 L/kg (Pettersson et al. 2024). I grundvattenzonen är ofta kolhalten lägre och pH-värdet högre än detta. I den mättade zonen är också andelen fasgränssytor mellan vatten och luft låg. Värdet 14 L/kg bör således per automatik inte appliceras generellt på alla typer av jordar eller geohydrologiska förhållanden (Pettersson et al. 2024).

1.1.4 Toxicitet och hälsorisker

Kunskapen om PFAS effekt på ekologi och hälsa är begränsad. Ämnenas struktur och egenskaper ger anledning att anta att de har negativ påverkan på miljö, djur och människor (Naturvårdsverket 2024). Den mest studerade gruppen PFAS är PFAA, däribland PFOA och PFOS (Fenton et al. 2021; Kemikalieinspektionen 2021). Hundratals PFAS saknar toxikologiska data, vilket motiverar både försiktighetsåtgärder för att skydda djur och människor samt omfattande insatser för att fylla de stora kunskapsluckorna (Fenton et al. 2021).

PFAS persistenta egenskaper innebär att de inte bryts ned under naturliga förhållanden. PFAA kan tas upp av människor och djur och metaboliseras inte, utan utsöndras eller ackumuleras i vävnader (Kemikalieinspektionen 2021). PFAA skiljer sig från andra organiska miljögifter eftersom de binder till proteiner istället för att ansamlas i fettvävnad. På så sätt distribueras de i hela kroppen i olika typer av vävnader. Ju längre kolkedja, desto högre potential för bioackumulation. PFAS förekommer i höga halter högt upp i näringskedjor, vilket tyder på biomagnifiering och kan också tas upp av växter (Kemikalieinspektionen 2021).

Epidemiologiska studier har visat samband mellan en rad olika hälsoeffekter och exponering för PFAS, där observationerna i många fall också överensstämmer med resultat från djurstudier. Observerade hälsoeffekter inkluderar förändrad immun- och sköldkörtelfunktion, leversjukdom, störningar i lipid- och insulinnivåer, njursjukdom, påverkan på reproduktionssystem och fosterutveckling samt cancer (Fenton et al. 2021). Även störningar på metabolism och immunsystem har observerats efter exponering för PFAA (Kemikalieinspektionen 2021).

1.1.5 Lagstiftning och gränsvärden

Det finns reglering av enskilda PFAS i grundvatten, ytvatten och dricksvatten på internationell nivå, EU-nivå och nationell nivå. I dagsläget finns det ingen övergripande reglering för PFAS som hel ämnesgrupp, men på grund av det stora antalet ämnen och de förmodade riskerna kopplade till dem, pågår det arbete för att skapa en sådan reglering. Det är vanligt att ett enskilt förbjudet PFAS snabbt ersätts av ett annat, varför övergripande lagstiftning behövs (ECHA u.å. Kemikalieinspektionen 2024).

Det finns olika typer av gräns- och riktvärden för PFAS beroende på om det gäller dricksvatten, grundvatten eller ytvatten. Vanligt förekommande summaparametrar för PFAS inom regleringar är PFAS4, PFAS11, PFAS20, PFAS21 och PFAS24, vilka används för att ta hänsyn till summan av flera PFAS-ämnen samtidigt (SGU 2024). I Sverige beslutar Vattenmyndigheterna om tröskelvärden för grundvatten. Vid publicering av denna rapport gäller 90 ng/L för PFAS11. Gränsvärdena för ytvatten och PFOS regleras av Havs- och vattenmyndigheterna, där PFAS11 anges med gränsvärde 90 ng/l och PFOS med 0,65 ng/L som årsmedelvärde (SGU 2024).

1.1.6 Regeringsuppdraget om PFAS

På grund av de hälsorisker som finns kopplade till PFAS och den vida spridningen är det viktigt att forska på hur man kan förhindra spridningen av PFAS i miljön (SLU 2023). Av denna anledning har SGI och flera andra myndigheter fått i uppdrag av Sveriges regering att arbeta med kunskapsspridning och forskning rörande undersökning, utredning och åtgärder av PFAS-förorenade områden (SGI 2024b). Vid flygplatsen i Sundsvall-Timrå pågår pilotprojekt för att

rena jord och grundvatten från PFAS (SGI 2024a). En metod som testas är stabilisering med aktivt kol, vilket innebär att aktivt kol blandas in i den förorenade jorden samt injekteras i grundvattenzonen, i syfte att få PFAS att sorbera till kolet (SGI 2024a). En annan åtgärdsmetod för grundvatten som testas inom ramen för regeringsprojektet är luftinjektering, där syftet är att få PFAS att ansamlas vid grundvattenytan (SGI 2023). Andra åtgärder som undersöks och som riktar sig mot sanering av förorenad jord är jordtvätt och termisk behandling (SGI 2024b). Det här projektet genomförs i samarbete med SGI och ingår som en del i deras arbete med att undersöka och utveckla olika saneringsmetoder för PFAS.

1.2 PUMP-AND-TREAT

Pump-and-treat (på svenska grundvattenpumpning och behandling) är en efterbehandlingsmetod av förorenat grundvatten som innebär att grundvatten pumpas upp och renas ovan mark. Metoden har tillämpats i stor utsträckning sedan 1970-talet, för grundvatten förorenat av olika typer av föroreningar. *Pump-and-treat* har funnit särskilt stor användning inom oljeindustrin, men också i anslutning till områden förorenade av klorerade lösningsmedel, till exempel kemtvättar (SGF u.å.[a]). Det finns flera potentiella syften med att pumpa upp och behandla grundvatten. Primärt används metoden för att minska koncentrationen av föroreningar i vattnet. Dessutom kan grundvattenpumpning användas för att påverka den hydrauliska gradienten, vilket kan begränsa eller stoppa grundvattenflödet från en känd föroreningskälla och därigenom reducera spridningen av föroreningar. Det är dock vanligt att åtgärder planeras för att uppfylla båda dessa syften (Helldén et al. 2006; Zhang 2020).

Pump-and-treat är en metod som kan användas för att sanera både organiska och oorganiska föroreningar. Den är särskilt tillämpbar på *Light Non-Aqueous Phase Liquids* (LNAPLs) samt ämnen som är lösta i grundvattnet. Även om metoden har använts för att behandla *Dense Non-Aqueous Phase Liquids* (DNAPLs) har den visat sig vara relativt ineffektiv för dessa. Tekniken har även använts för att rena föroreningar som klorerade och icke-klorerade lösningsmedel, metaller samt PFAS, även om effektiviteten av *pump-and-treat* för PFAS i grundvatten har bedömts vara begränsad (Hall et al. 2024; SGF u.å.[a],[b]). För PFAS består en stor del av utmaningen i att pumpa upp eller nå föroreningen med hjälp av pumpning, och då kan *pump-and-treat* användas för att avleda den förorenade grundvattenplymen och därmed skydda känsliga recipienter. (Hall et al. 2024; SGF u.å.[b]).

Det finns flera tillgängliga reningstekniker för att rena uppumpat vatten innan det släpps ut till ytvatten eller pumpas ned i akviferen igen. Vilken som tillämpas avgörs i första hand av den förorening som åtgärden riktar sig mot. Några exempel är kolfilterrening, nanofiltrering, biologisk behandling eller stripping (SGF u.å.[a]). Stripping är en metod som innebär att en strömmande gas (vanligtvis vattenånga) används för att separera föroreningar från vattnet (SGF 2025). Det vanligaste är rening med olika typer av filtermaterial (Helldén et al. 2006). På senare år har pumpning av PFAS-förorenat grundvatten kombinerats med filterrening eller destruktion med kemisk oxidation (SGF u.å.[a]). För rening av PFAS används vanligen filter med granulärt aktivt kol (GAC) eller jonbytarfilter som PFAS sorberar till. När adsorptionseffekten avtar behöver filtren bytas ut och antingen bränns vid mycket höga temperaturer eller deponeras, och båda dessa metoder innebär risk för vidare spridning av PFAS i miljön (Hall et al. 2024).

Att effektivt kunna pumpa upp grundvatten och avlägsna föroreningar förutsätter gynnsamma hydrogeologiska förhållanden, vilket innebär en hydraulisk konduktivitet högre än ca 10^{-5} m/s samt homogena geologiska förhållanden. Metodens effektivitet minskar avsevärt vid betydande heterogenitet eller vid låg hydraulisk konduktivitet (lägre än 10^{-7} m/s), och kan då inte längre betraktas som en effektiv lösning (Mercer et al. 1990). Därför bör metoden tillämpas där förekomsten av lera och silt är begränsad. Ju mer finkornigt material som förekommer, desto fler uttagpunkter kan krävas eftersom influensradien minskar. Behovet av skyddspumpning genom förändring av grundvattengradienten kan dock minska vid lägre hydraulisk konduktivitet (SGF u.å.[a]).

En fördel med *pump-and-treat* är att det är en väletablerad metod med hög kommersiell tillgänglighet. Detta gör den relativt enkel att implementera, och vid behov kan skyddspumpning snabbt införas som en åtgärd för att begränsa spridningen av föroreningar till känsliga recipienter (SGF u.å.[a]).

En nackdel med *pump-and-treat* är att pumpningen ofta måste pågå under väldigt lång tid för att uppnå en betydande massreduktion av föroreningarna i grundvattnet (Birnstingl och Wilson 2024; Hall et al. 2024; SGF u.å.[a]). PFAS transporteras väldigt långsamt i den omättade zonen på grund av interaktioner vid gränssytor för luft och vatten (McGarr et al. 2023; Rasmusson och Fagerlund 2024). Utan sanering av källzonen kan pumpningen behöva pågå i decennier (SGF u.å.[a]). I regel krävs det därför att föroreningen avlägsnas från källzonen, och *pump-and-treat* sätts in som åtgärd i ett så kallat *treatment train*, det vill säga att flera åtgärder kombineras för att hantera föroreningen både i källzonen och längs dess spridningsvägar (Mercer et al. 1990).

I många fall är reningsmöjligheterna av grundvattnet goda med hög effektivitet. Metoden begränsas snarare av svårigheten att avlägsna föroreningen och dess restprodukter från grundvattnakviferen genom pumpning (Helldén et al. 2006). Mobila föroreningar som inte sorberar till markpartiklar är enklare att avlägsna genom pumpning. För sorberande ämnen beror renings-effektiviteten däremot på både ämnets sorptionsegenskaper och de geologiska förhållandena i akviferen. Sorption bromsar föroreningstransporten och innebär ofta att pumpningen behöver pågå under en längre tid (Mercer et al. 1990).

1.3 GRUNDVATTEN- OCH TRANSPORTMODELLERING

Modellering av grundvattenflöden och transport av lösta ämnen är ett viktigt verktyg för riskbedömning och åtgärdsplanering av förorenade områden. För att kunna skapa en modell med realistisk förankring krävs god kunskap om modellen och dess funktioner såväl som förhållandena på den aktuella platsen. Det är också av stor betydelse att det finns tillgång till data över det område och den förorening som ska modelleras (Gustafsson och Refsgaard 2007).

Det första steget i modelleringsprocessen är skapandet av en konceptuell modell. Den konceptuella modellen är en beskrivning av områdets geologiska, hydrologiska och hydrogeologiska förhållanden (Jonasson et al. 2007). Några exempel på beskrivande parametrar som tas med i den konceptuella modellen är grundvattenbildning, bebyggelse eller anläggningar som påverkar de hydrogeologiska förhållandena, hydraulisk konduktivitet och porositet i marken samt flöde och vattenstånd i ytvattendrag (Gustafsson och Refsgaard 2007; Jonasson et al. 2007).

Den konceptuella modellen används i nästa steg med en numerisk flödesmodell (också kallad strömningsmodell). Flödesmodellen bygger på informationen i den konceptuella modellen och

använder numeriska lösningsmetoder för att simulera grundvattenflödet på den aktuella platsen (Jonasson et al. 2007). Vidare måste den upprättade flödesmodellen kalibreras och valideras och det bör göras en osäkerhets- och känslighetsanalys. Detta för att identifiera osäkerheter i indata och modell, samt kvantifiera hur dessa kan påverka resultatet (Jonasson et al. 2007). En modell kan sättas upp som en stationär jämviktsmodell (*steady-state*) eller som en transient modell. En transient modell kan beskriva hur flöden och transport förändras över tid och innebär en högre grad av komplexitet, eftersom det krävs tidsserier av indata att kalibrera modellen mot (Jonasson et al. 2007).

Flödesmodellen är i sin tur nödvändig för att kunna modellera ämnestransport. För transportmodelleringen krävs indata rörande ämnets egenskaper och beteende, så som löslighet, dispersion, diffusion, nedbrytning och fördelning i jord och vatten (Gustafsson och Refsgaard 2007). De osäkerheter som finns i flödesmodellen återspeglas i resultaten från transportmodelleringen, varför det är viktigt att ha god kännedom om begränsningarna i flödesmodellen (Gustafsson och Refsgaard 2007).

1.3.1 Grundvattenflöde och MODFLOW

Grundvattenflöde genom ett poröst medium i en dimension kan beskrivas av Darcy's lag (Sparrenbom och Jeppson 2022),

$$q = \frac{Q}{A} = -K \frac{dh}{dl} \quad (2)$$

där q är specifikt flöde [m/s], Q [m³/s] är flödet över en yta med arean A [m²], K är den hydrauliska konduktiviteten [m/s] och dh/dl [-] beskriver den hydrauliska gradienten vinkelrätt mot ytan A . Tillsammans med principen om massans bevarande kan ekvation (2) användas för att beskriva grundvattenflöde i tre dimensioner (Sparrenbom och Jeppson 2022). Tredimensionellt flöde av grundvatten med konstant densitet genom ett poröst material kan beskrivas av den partiella differentialekvationen,

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) + W = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3)$$

där K beskriver den hydrauliska konduktiviteten längs x -, y - respektive z -axeln. W beskriver in- och utflöden av grundvatten och kan vara både positiv (inflöde) och negativ (utflöde). h är tryckpotential, S_s den specifika magasinskoefficienten och t tiden (Harbaugh 2005). I en stationär modell är $W = 0$, $S_s = 0$ och $\frac{\partial h}{\partial t} = 0$.

MODFLOW är en grundvattenflödesmodell ursprungligen utvecklad av United States Geological Survey (USGS) under tidigt 1980-tal. Det fullständiga namnet är *Modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model*. Som namnet antyder simulerar MODFLOW grundvattenflöden genom att använda en finit differensmetod för att numeriskt och iterativt lösa den ekvation som beskriver grundvattenflöde (Harbaugh 2005). Tillsammans med angivna randvillkor och initiala tryckförhållanden utgör ekvation (3) en matematisk representation av ett grundvattensystem. I MODFLOW byggs en modell över ett område upp, med marklager och vattenförekomster som representerar verkliga förhållanden. Modellområdet delas in i ett rutnät

av celler i flera lager. I var cells centrum beräknas den hydrauliska potentialen i varje diskret tidssteg i en tidsserie. En lösning av ekvation (3) ger ett uttryck för $h(x, y, z, t)$, där dess derivator med avseende på rum och tid uppfyller ekvationen och dess initial- och randvillkor (Harbaugh 2005; Winston 2023). För en stationär modell är detta uttryck inte beroende av tid.

MODFLOW utvecklades med fokus på användarvänlighet och har fått global spridning (Harbaugh 2005). Den är uppbyggd i en modulstruktur, vilket innebär att det till huvudprogrammet kan läggas till olika paket. Paketerna adderar specifika funktioner till det hydrologiska systemet, till exempel grundvattenbildning, brunnar och flöde i vattendrag (Harbaugh 2005). MODFLOW kan simulera grundvattenflöde i öppna och slutna akviferer, stationärt flöde och transient flöde. MODFLOW-modeller kan vara en-, två- eller tredimensionella (Winston 2023).

Groundwater Modeling System (GMS) är ett modelleringsprogram utvecklat av Aquaveo för grundvattensimuleringar. GMS utgörs av ett grafiskt användargränssnitt och stödjer flera typer av numeriska modeller, däribland MODFLOW och MT3D-USGS (Aquaveo 2014).

1.3.2 Föroreningstransport och MT3DMS

Ämnen från förorenade områden kan transporteras med grundvattnet och spridas långt från ursprungskällan. Därför är det viktigt att kunna modellera hur föroreningar transporteras i miljön. Detta kan göras med *Modular Transport 3-Dimensional Multi-Species model* (MT3DMS), vilket är en numerisk modell för ämnestransport i tre dimensioner. Den kan användas tillsammans med flertalet flödesmodeller (till exempel MODFLOW) och använder informationen från dessa för att simulera förändringar i ämneskoncentration i grundvatten. Den tar hänsyn till processer som påverkar ämnestransport i grundvatten, så som advektion, dispersion, diffusion och vissa grundläggande kemiska reaktioner genom användandet av tillhörande paket. Den kan användas för att simulera transport av lösta ämnen i mättat grundvattenflöde med olika typer av randvillkor och externa källor och sänkor (Zheng et al. 2012).

Ämnestransport i grundvatten påverkas av flertalet processer där grundvattneströmningen är den viktigaste (Sparrenbom och Jeppson 2022). När ett ämne rör sig med samma hastighet som grundvattnet kallas det för advektion. Advektion kan med hjälp av ekvationen för grundvattenflöde (2) beskrivas som

$$v_p = -\frac{K}{n_k} \frac{dh}{dl} \quad (4)$$

där v_p är medelpartikelhastigheten [m/s], K är hydraulisk konduktivitet [m/s], n_k [-] är kinematisk porositet och dh/dl [-] beskriver hydraulisk gradient (Sparrenbom och Jeppson 2022). I internationell litteratur används begreppen effektiv porositet och kinematisk porositet synonymt (Sparrenbom och Jeppson 2022). I dokumentationen för MT3DMS används termen *effective porosity* (Zheng et al. 2012). I detta arbete har det beslutats att använda begreppet effektiv porositet som synonym till kinematisk porositet.

Ekvation (4) förutsätter att ämnestransporten inte påverkas av några andra processer än grundvattnets flödeshastighet. I verkligheten är det många olika typer av reaktioner som kan påverka transporten, till exempel nedbrytning och sorption. Sorption beskriver hur ett ämne sorberar till den fasta fasen och kan beskrivas med olika modeller. Den enklaste förklaringsmodellen är den

för linjär sorption i jämvikt (Sparrenbom och Jeppson 2022). Den beskriver förhållandet mellan koncentrationen av ett ämne i den fasta fasen och koncentrationen av ett ämne löst i vatten, se ekvation (1) i avsnitt 1.1.3.

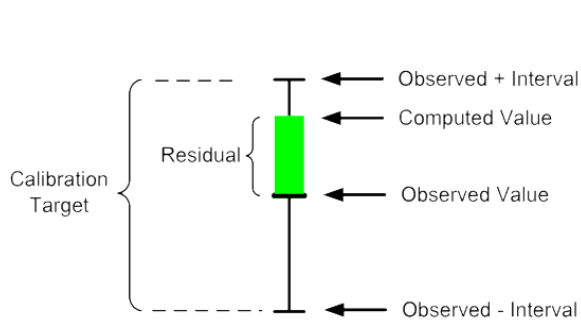
Retardationsfaktorn beskriver hur många gånger långsammare ett sorberande ämne transporteras jämfört med ett icke-sorberande ämne. För linjär sorption kan retardationsfaktorn, R_f beskrivas av ekvationen

$$R_f = 1 + \frac{\rho_B}{n} K_d \quad (5)$$

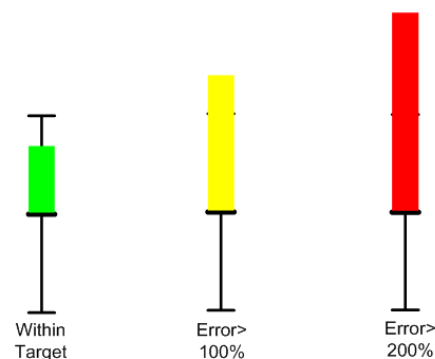
där ρ_B är jordens torra skrymdensitet [kg/m^3], n är porositet och K_d är den linjära fördelningskonstanten (Sparrenbom och Jeppson 2022). Ekvation (5) innebär att ju större K_d -värde, det vill säga ju starkare sorption, desto långsammare transporteras en partikel eller förorening i grundvattenzonen.

1.3.3 Kalibrering av flödesmodeller

Kalibrering av flödesmodeller i MODFLOW kan göras med hjälp av kalibreringspunkter i GMS. För detta behövs observerade värden på grundvattennivåer samt att användaren definierar ett kalibreringsintervall inom vilket de modellerade grundvattennivåerna bör ligga i. De modellerade värdena jämförs mot de uppmätta och GMS beräknar skillnaden mellan dessa. Kalibreringspunkterna kan användas för att visualisera hur välanpassad modellen är. De illustrerar det uppmätta värdet, det modellerade värdet samt hur felet förhåller sig till det definierade kalibreringsintervallet, se figur 1.1 och 1.2. Om felet ligger inom det definierade intervallet visas grön färg. Om felet ligger utanför intervallet men är mindre än 200 % visas gul färg. Om felet är större än 200 % visas röd färg.



Figur 1.1: Beskrivning av utseendet hos de kalibreringspunkter som används för kalibrering av flödesmodeller och förhållandet mellan observerade och modellerade värden inom kalibreringsintervallet. Bild: Aquaveo (2016a).



Figur 1.2: Beskrivning av hur färgerna grön, gul och röd illustrerar förhållandet mellan uppmätta och modellerade värden vid användandet av kalibreringspunkter för kalibrering av flödesmodeller. Bild: Aquaveo (2016b).

1.3.4 Geostatistik och T-PROGS

Transition Probability Geostatistical (T-PROGS) är en mjukvara för att statistiskt generera geologiska dataset baserat på tillgängliga geologiska data från borrhål. T-PROGS kan användas i GMS tillsammans med MODFLOW. Tillgänglig borrhålsdata används för att utföra sannolikhetsgeostatistik och generera rumsligt korrelerade materialuppsättningar i ett 3D-rasternät. Materialuppsättningarna beror på materialproportioner i borrhålen och övergångar mellan flera borrhål (Aquaveo 2020). I detta arbete används T-PROGS till att statistiskt generera rumsligt korrelerade geologiska heterogeniteter i modellagren utifrån materialdata från två borrhål. För en mer utförlig beskrivning av den teoretiska bakgrunden till T-PROGS och de statistiska metoder som används hänvisas till Aquaveo (2020) och Carle (1999).

2 SYFTE OCH FRÅGESTÄLLNINGAR

Syftet med detta arbete är att genom modellering undersöka effektiviteten av grundvattenpumpning för att avlägsna PFAS från den mättade grundvattenzonen vid den gamla brandövningsplatsen vid Sundsvall-Timrå Airport. Målet är att arbetet ska kunna användas för att utvärdera *pump-and-treat* som möjlig åtgärd på platsen. Arbetet omfattar inte reningstekniker och hantering av renat vatten. Undersökningen fokuserar endast på spridning och transport av PFAS i den mättade zonen, samt hur dessa påverkas av grundvattenpumpning. Arbetet utgår från antagandet att den omättade zonen är fullständigt sanerad för att underlätta för tolkningar av hur PFAS transporteras i modellerna. Vidare ämnar projektet att medverka till ökad förståelse för hur en heterogen geologi med områden med lägre hydraulisk konduktivitet (t.ex. siltlinser) kan påverka effektiviteten av grundvattenpumpning. Undersökningen har genomförts genom att jämföra brunnstoppställningar och brunnsegenskaper i ett antal olika scenarier i en modell över den gamla brandövningsplatsen vid Sundsvall-Timrå Airport.

Följande frågeställningar undersöks i arbetet:

- Hur påverkar brunnspacering, filterdjup och pumpflöde reningseffekten av PFAS under homogena geologiska och hydrologiska förhållanden?
- Hur lång tid tar det att sanera den mättade zonen från PFAS med grundvattenpumpning som åtgärd vid ovan nämnda förhållanden?
- Hur påverkas effektiviteten av grundvattenpumpning av storleken på fördelningskoefficient (K_d -värde) hos PFAS-ämnena?
- Hur påverkas effektiviteten av grundvattenpumpning vid förekomst av mindre områden med lägre hydraulisk konduktivitet (heterogena geologiska förhållanden)?

3 FALLSTUDIE: SUNDSVALL-TIMRÅ AIRPORT

Undersökningen i detta arbete genomförs som en fallstudie med data från den gamla brandövningsplatsen vid Sundsvall-Timrå Airport. Där har höga halter PFAS påträffats, som riskerar att transporteras med grundvattnet till ett närliggande vattendrag. Där finns ett behov av att minska mängden PFAS i grundvattnet för att minska risken för läckage av PFAS till omgivande miljöer. Mot bakgrund av hur PFAS rör sig i grundvatten och hur transporten påverkas av flera platsspecifika faktorer är det av intresse att undersöka hur möjligheterna för grundvattenpumpning som saneringsmetod för PFAS ser ut på just denna plats. I detta avsnitt beskrivs föroreningsituationen och geologiska och hydrologiska förhållanden i området där den gamla brandövningsplatsen ligger.

Flera undersökningar har tidigare genomförts i syfte att kartlägga geologiska och hydrogeologiska förhållanden samt föroreningsituationen i området (Earon 2024; Niras 2020a,b; Sweco 2018, 2019; WSP 2012, 2015, 2019). Dessutom har det inom ramen för regeringsuppdraget om PFAS gjorts flera kompletterande undersökningar som använts som underlag vid utformning av pilotprojekten (SGI 2024a). Projekt och undersökningar är finansierade av regeringens anslag 1:4 Sanering och återställning av förorenade områden. Resultaten av dessa är preliminära och finns vid färdigställandet av denna rapport ännu inte publicerade. För det här arbetet har en del av detta material tillhandahållits av SGI och används som dataunderlag i undersökningen (Sellén & Filipovic 2023a,b, 2024).

3.1 LOKALISERING

Sundsvall-Timrå Airport är belägen på ön Skeppsholmen i deltaområdet vid Indalsälvens mynning nord-öst om tätorten Timrå (figur 3.1). Flygplatsen startades 1944 och har varit statligt ägd fram till 2013. Då övertogs flygplatsen från Swedavia av Sundsvall och Timrå kommun och flygplatsen drivs idag som ett kommunalt bolag (Sundsvall-Timrå Airport 2024). Den största delen av aktiviteten på Skeppsholmen utgörs av flygplatsrelaterade verksamheter. Vegetationen på ön runt flygplatsen utgörs huvudsakligen av hedmark och skog (WSP 2019). Flygplatsområdet utgör ett område med mindre känslig markanvändning (Sweco 2018).

Den huvudsakliga recipienten för verksamheten vid flygplatsen är den nedre delen av Indalsälven som passerar Skeppsholmen. I väster rinner Sörån och i öster Norrån, vilka mynnar ut i havet cirka en kilometer nedströms flygplatsen. Hela deltaområdet är utpekade som ett riksintresse för naturvård, medan Sörån och Norrån även är klassade som riksintressen för friluftsliv. Söder om flygplatsområdet och väg E4 ligger ett skyddsområde som har status både som naturreservat och som Natura 2000-område (Sweco 2018).



Figur 3.1: Karta över ön Skeppsholmen där Sundsvall-Timrå Airport ligger. Brandövningsplatser är markerade med röda ringar. Kartan är skapad i GMS med bakgrundskartan *Google Hybrid*.

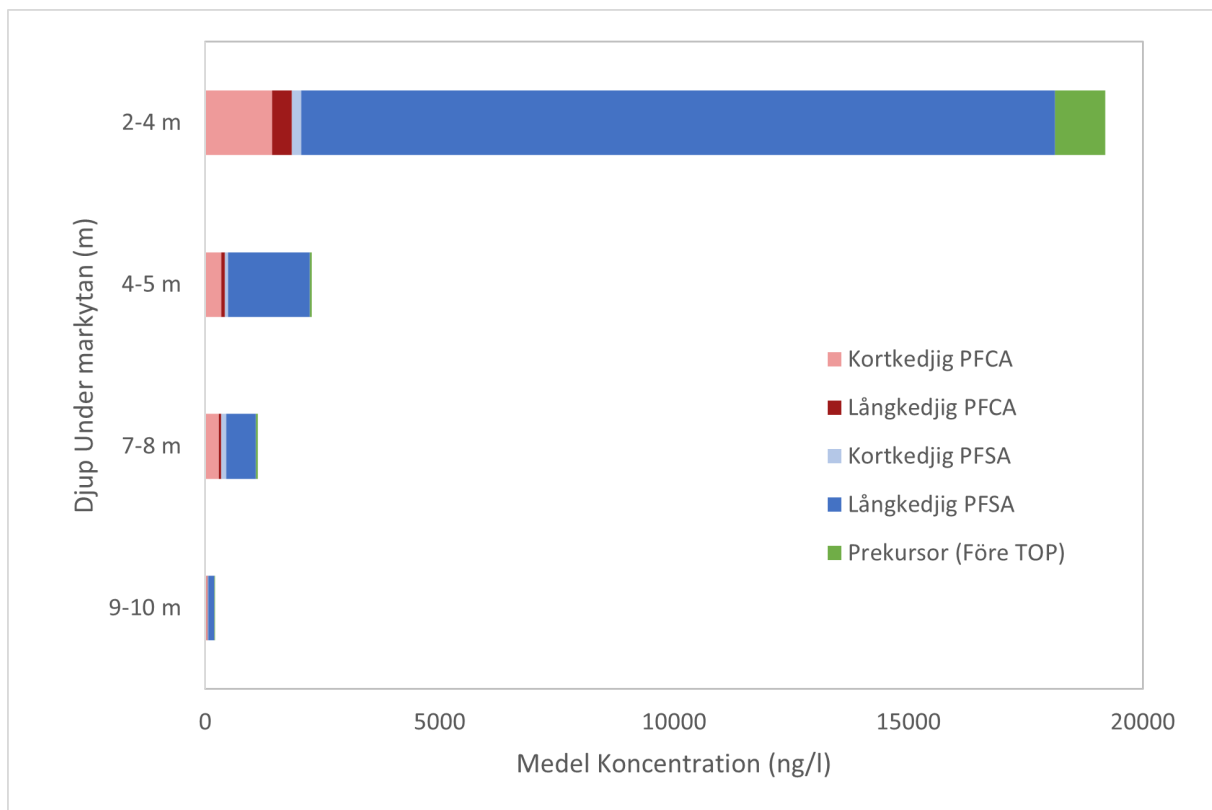
3.2 BRANDÖVNINGSPLATSER

I anslutning till flygplatsen, väster om landningsbanan är två brandövningsplatser (BÖP) belägna, se figur 3.1. Den gamla BÖP var i drift från 1970 fram till 1997, då den nya BÖP togs i bruk. För närvarande planeras antingen en ombyggnation av den nuvarande BÖP eller en omlokalisering av verksamheten till en alternativ plats norr om flygplatsen (Niras 2020b).

Tidigare undersökningar har visat på en omfattande förekomst av PFAS i jord och grundvatten vid båda BÖP (Niras 2020a,b; Sellén & Filipovic 2023a; WSP 2012, 2015, 2019). BÖPs placering medför att verksamheten vid båda dessa riskerar att påverka Sörån. Undersökningarna av den gamla BÖP har visat att majoriteten av PFAS-förekomsten återfinns i de ytliga marklagren, mellan 2-4 m djup, men PFAS har även identifierats på djup ner till 10 m, med högst

koncentrationer vid grundvattenytan, som framgår av figur 3.2 (Earon 2024; Sellén & Filipovic 2024). Det mest förekommande PFAS-ämnet i både jord och grundvatten är PFOS. Även PFHxS förekommer i höga halter i grundvattnet (Sellén & Filipovic 2023a; WSP 2019). Det förekommer också många kortkedjiga PFAS och prekursorer (Earon 2024; Sellén & Filipovic 2024).

I figur 3.2 presenteras medelkoncentrationer (ng/L) av summan av 32 olika PFAS och prekursorer baserat på resultat från dynamisk grundvattenprovtagning (Sellén & Filipovic 2023a). Värdena är beräknade som det aritmetiska medelvärdet av uppmätta koncentrationer PFAS inom respektive djupintervall (meter under markytan). 2–4 m under markytan går medelkoncentrationen upp mot 20 000 ng/L av summan av de uppmätta PFAS-ämnena. I enskilda prover i detta marklager har totalkoncentrationer omkring 33 000 ng/L uppmätts. Sett till proverna som tagits i alla marklager står PFOS i snitt för ca 50 % av den totala koncentrationen PFAS, och i marklager 2–4 omkring 50–80 % (Sellén & Filipovic 2023a). I figur 3.2 är PFOS klassificerat som en långkedjig PFSA. Inom denna kategori förekommer också PFHxS, som i snitt utgör ca 22 % av totalkoncentrationen, och är det ämne efter PFOS som uppmätts i högst koncentrationer (Sellén & Filipovic 2023a).

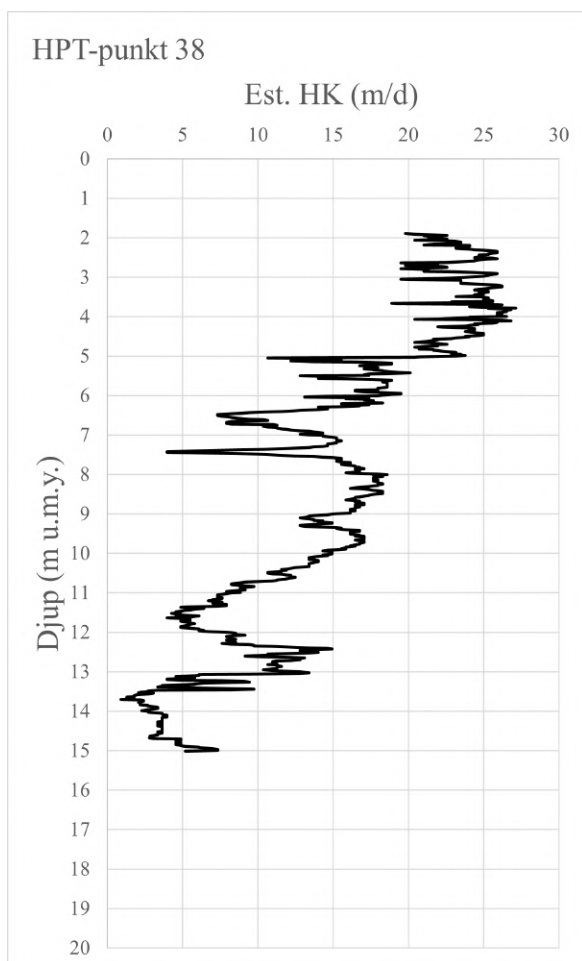


Figur 3.2: Medelkoncentration av olika grupper av PFAS i markdjupsintervall 2–4 m, 4–5 m, 7–8 m och 9–10 m. Medelvärdet är beräknat som aritmetiskt medelvärde av de uppmätta koncentrationerna inom respektive intervall. Figur av Earon (2024) baserat på data från Sellén & Filipovic (2023a) får användas med godkännande av SGI.

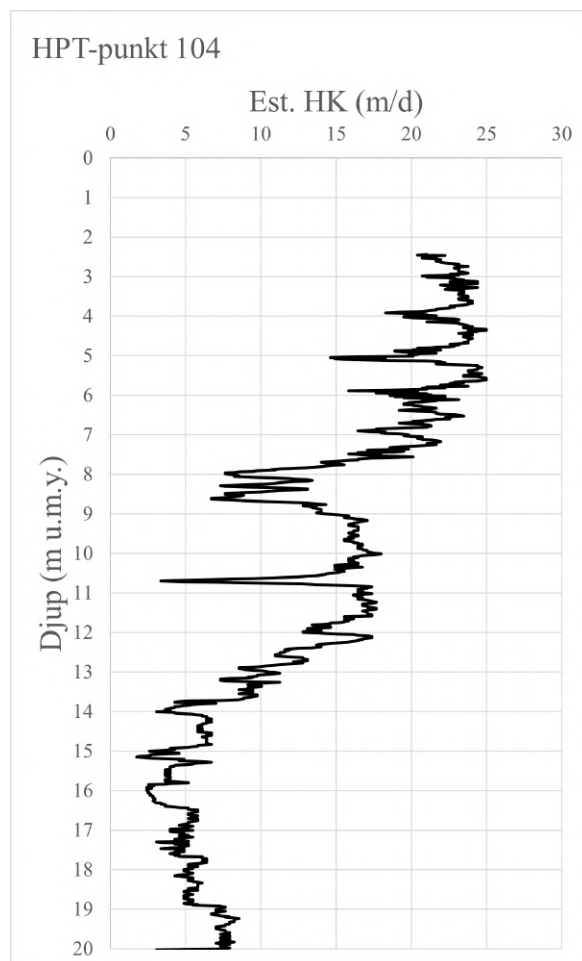
3.3 GEOLOGI

Ön Skeppsholmen ligger i deltat vid Indalsälvens mynning och består av sandiga älvsediment (SGU 2023a). På ön varierar jorddjupet ner till berg mellan 5 och 50 m, men ligger huvudsakligen inom intervallet 20–30 m (SGU 2023b). Topografiskt är området relativt flackt med landningsbanan högst belägen (Sweco 2019; WSP 2019).

Tidigare geologiska undersökningar av området vid brandövningsplatserna har visat att marken utgörs av permeabla sandlager med minskande finkornighet med djupet (WSP 2012, 2015). Det översta lagret utgörs till största delen av mellansand, följt av finare sandfraktioner med inslag av silt och sandig silt i djupare lager (WSP 2012, 2015). Denna jordlagerföljd bekräftas även av mätningar av den hydrauliska konduktiviteten som gjorts i två mätpunkter som gjorts med ett verktyg som kallas *Hydraulic Profiling Tool* (HPT) vid den gamla brandövningsplatsen, se figur 3.3 och 3.4. I fortsättningen refereras det till dessa punkter som HPT-38 respektive HPT-104. Den gradvis minskande hydrauliska konduktiviteten tyder på sandlager med minskande kornstorlek. Det förekommer också tydliga tunna lager med mycket låg konduktivitet i de djupare marklagren som kan tolkas som siltlinser och tyder på en viss geologisk heterogenitet (Sellén & Filipovic 2023b; StructX u.å.).



Figur 3.3: Uppmätt hydraulisk konduktivitet [m/d] i HPT-punkt 38 (Sellén & Filipovic 2023b). Data får användas med tillstånd från SGI.



Figur 3.4: Uppmätt hydraulisk konduktivitet [m/d] i HPT-punkt 104 (Sellén & Filipovic 2023b). Data får användas med tillstånd från SGI.

3.4 HYDROGEOLOGI

Det har gjorts undersökningar av den hydrauliska konduktiviteten kring brandövningsplatserna (Sellén & Filipovic 2023b; WSP 2012). Vid den gamla BÖP uppskattas den hydrauliska konduktiviteten minska med djupet (WSP 2012). Ca 2–5 m u.my. (i grundvattenzonen) uppskattas den ligga i ett intervall mellan ca 8–27 m/d. På djupet 8–11 m under markytan bedöms den vara ungefär 3 m/d. På ett djup större än 11 m under markytan bedöms den vara mindre än ca 0,8 m/d. Av denna anledning bedöms den huvudsakliga grundvattentransporten ske i de övre marklagren med högst hydraulisk konduktivitet (WSP 2012). De två HPT-mätningar som gjorts uppvisar ett något annorlunda resultat (Sellén & Filipovic 2023b). Den hydrauliska konduktiviteten på djupet 2–5 m under markytan uppmätts till omkring 20 m/d, omkring 15 m/d på djupet 8–11 m och på djup större än 11 m har värden inom ett ungefärligt intervall om 2–17 m/d uppmätts (Sellén & Filipovic 2023b).

I samband med tidigare utredningar har grundvattenrör installerats, bl.a. av (WSP 2012, 2019). Grundvattenytan förekommer ytligt i området kring brandövningsplatserna, ca 1,5-3,6 m u.my. och är generellt flack över hela ön (Sweco 2019; WSP 2019). En grundvattendelare löper i nord-sydlig riktning över landningsbanan, vilket antyder att grundvattnet vid brandövningsplatserna strömmar i riktning mot Sörån (Sweco 2019). Flödesriktningen kan variera lokalt, men baserat på undersökningar av föroreningsplymen mellan år 2012 och 2018 dras slutsatsen att grundvattnet huvudsakligen flödar mot Sörån (WSP 2019). Modellering av grundvattenflödet visar syd-västlig flödesriktning vid den gamla BÖP (Niras 2020b). Resultaten från modelleringen kan emellertid vara svårtolkade, eftersom små förändringar i grundvattenytan kan innebära stor skillnad i modellens resultat. Detta som en effekt av den plana grundvattenytan som uppmätts på området (Niras 2020b).

Vidare har Sweco (2019) undersökt dag- och dräneringssystemet på flygplatsområdet. Det finns ett anlagt dräneringsstråk längs landningsbanan med dräneringsledningar som leder vattnet till uppsamlingsbrunnar. Även dagvattenledningar leder vattnet till dessa brunnar. Dräneringsstråket är konstruerat av ett genomsläppligt material, vilket i praktiken innebär att det mesta vatten som når dräneringsstråket infiltrerar den också genomsläppliga jordprofilen. De drar slutsatsen att dag- och dräneringssystemet runt landningsbanan inte påverkar hydrogeologin och att allt sådant vatten bidrar till grundvattenbildningen (Sweco 2019). Också det dagvatten som når det avvattningsystem som finns kring byggnader och vägar på flygplatsområdet bedöms bidra till den lokala grundvattenbildningen (Sweco 2019).

4 METOD

Undersökningen genomfördes som en fallstudie vid den tidigare brandövningsplatsen vid Sundsvall-Timrå Airport (se Gamla BÖP, figur 3.1). Av SGI tillhandahölls en kalibrerad regional flödes- och transportmodell som omfattar hela ön där flygplatsen är belägen. Denna ingår som en del i SGIs pågående arbete inom regeringsuppdraget för PFAS, vilket redovisas efter publiceringen av denna rapport. Inom detta arbete utvecklades en ny regional flödes- och transportmodell, där vissa enskilda delar av SGI:s modell användes. I detta avsnitt redogörs för utformningen av den nya modellen, inklusive de antaganden som ligger till grund för den. Det anges också vilka delar som är hämtade från SGI:s modell samt hur de är utformade. I anslutning till detta beskrivs hur den regionala modellen användes för att skapa lokala flödes- samt transportmodeller över den gamla brandövningsplatsen och hur dessa användes för att modellera PFAS-transport med uttagsbrunnar i olika scenarier. Samtliga modeller är utformade i GMS och bygger på de platsspecifika kunskaperna från tidigare undersökningar som presenterats i avsnitt 3.

Metoden och modellutformningen beskrivs tillsammans med ett antal figurer som stöd till förståelsen. Dessa är skapade i GMS, varav en del är försedda med ett bakgrundsfoto i form av en flygbild. Tillägget av bakgrundsfoto är en inbyggd funktion i GMS där ett antal kartbilder är valbara. Bakgrunden som används i figurerna i denna rapport är *World Imagery* om inget annat anges.

4.1 REGIONAL MODELL

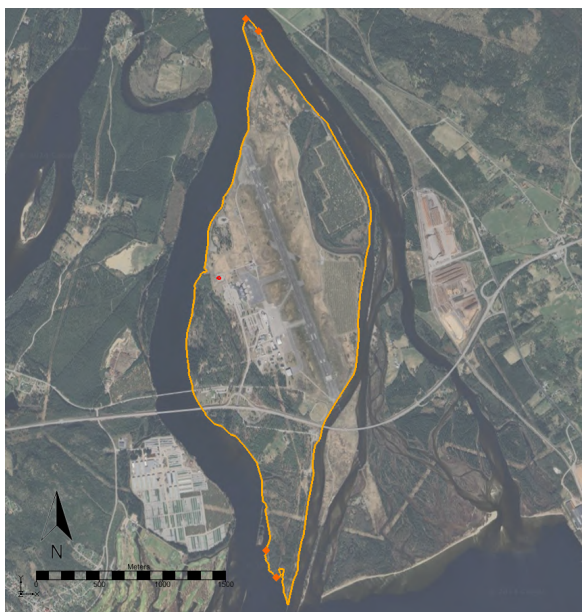
I det här avsnittet beskrivs utformningen av den regionala modellen. Den användes för att skapa fyra olika scenarier med extraktionsbrunnar samt för att skapa en lokal modell för varje scenario.

4.1.1 Modellområde

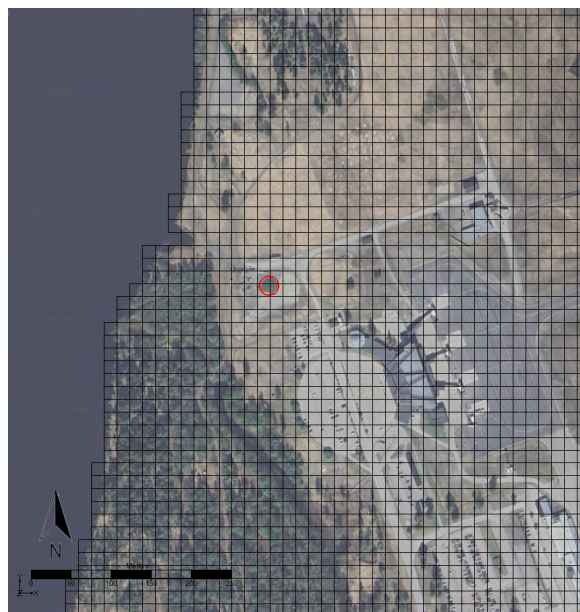
Modellområdet omfattar Skeppsholmen där Sundsvall-Timrå Airport är belägen, se figur 4.1. Gränserna definieras av öns geografiska utsträckning samt tillgängliga data för topografi och jorddjup. Modellens gränser samt data för topografi och jorddjup är identiska med de som används i SGI:s kalibrerade modell och har importerats direkt från denna. Topografidatan är ursprungligen hämtad från Lantmäteriet med 1 m upplösning (Lantmäteriet 2023). Jorddjupsdata kommer från SGU:s jorddjupsmodell (SGU 2019).

4.1.2 Rasternät

Den regionala modellen utformades med ett rasternät med celler av storleken 16×16 m, se figur 4.2. Modellen har 14 lager av varierande tjocklek, se figur 4.3. Lagren är anpassade till topografi- och jorddjupsdata vilket kan ge varierande celltjocklek i ett och samma lager. De två översta lagren har en sammanlagd mäktighet på ungefär 5–6 m, följt av 8 tunnare lager med en total mäktighet om ca 5–6 m. Därpå följer 3 lager med en sammanlagd mäktighet omkring 5 m. Det understa lagret har en mäktighet omkring 11 m. Det totala antalet aktiva celler är 196952.



Figur 4.1: Modellområdet för den regionala modellen markerat med gula linjer. Randvillkoren är definierade längs modellgränsen i noderna som visas med orangea markeringar.



Figur 4.2: Del av den regionala modellen sedd uppifrån vid den gamla BÖP. Rasternät har celler med en storlek av 16×16 m. Platsen för den gamla BÖP anges med röd markering.

4.1.3 Randvillkor

Randvillkoren i modellen är definierade som en konstant grundvattennivå i de yttersta cellerna i varje lager längs modellområdets gräns. Detta har gjorts med paketet *Time Variant Specified Head* (CHD). Randvillkoren löper längs modellgränsen mellan fyra noder. I figur 4.1 visas noderna som orangea markeringar längs modellens gräns, där de två västra noderna har tilldelats värdet 0,1 m och de två östra noderna värdet 0,06 m. Dessa värden motsvarar vattenståndet i topografidatan och är direkt tagna därifrån (Lantmäteriet 2023). Randvillkoren har importerats direkt från SGI:s kalibrerade modell.

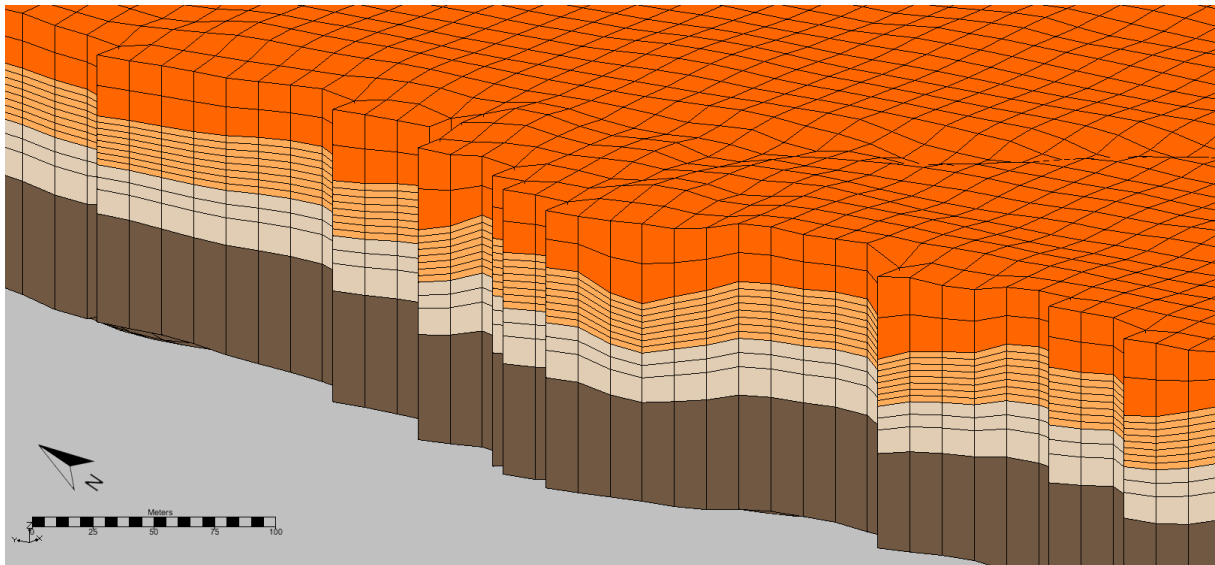
4.1.4 Marklager och markegenskaper

För markmodellen skapades flera material som senare fördelades till modellagren. Egenskaperna i materialen är definierade genom flera parametrar som har valts med hjälp av litteraturvärden och uppmätta värden. Materialen har tilldelats namn som är tänkta att symbolisera en gradvis minskande hydraulisk konduktivitet ju längre ner i lagrena man kommer. Materialen är namngivna som grov sand (orange), mellansand (ljus orange), fin sand (beige) och silt (brun), se tabell 4.1.

Den hydrauliska konduktiviteten i respektive material är vald utifrån mätvärden från de två HPT-mätningar (Sellén & Filipovic 2023b) som gjorts vid den gamla BÖP, se figur 3.3 och 3.4. Den uppmätta hydrauliska konduktiviteten delades upp i djupintervall om 5 m. Detta intervall valdes för att kunna dela upp HPT-punkterna i lika stora djupintervall (3 respektive 4 st) för att kunna ta fram värden på hydraulisk konduktivitet som kan användas i de definierade materialen. Inom varje separat intervall beräknades medel- och medianvärden, se tabeller 9.1 och 9.2 i appendix för de beräknade värdena. Sedan beräknades ett medelvärde av median hydraulisk konduktivitet inom varje djupintervall från de två HPT-punkterna, se tabell 9.3 i appendix. Des-

sa medelvärden antogs motsvara den horisontella och vertikala hydrauliska konduktiviteten i materialen, se tabell 4.1. Därefter valdes värden på vattenavgivningstalet (*specific yield* i tabell 4.1) enligt Fetter (2001). Porositeten motsvarar effektiv porositet (Zheng et al. 2012) och valdes i respektive material enligt Woessner och Poeter (2020). Övriga materialparametrar ändrades inte, se tabell 4.1.

Materialen fördelades sedan i modellagren. De två översta lagren är definierade som grov sand, följt av 8 lager mellansand och 3 lager fin sand. Det nedersta lagret är definierat som silt, se figur 4.3. Denna fördelning gjordes som en sammanlagd bedömning av lagerindelningen i HPT-punkterna och rasternätets lagertjocklek.



Figur 4.3: Marklager och material i lagren i den regionala modellen. Orange färg representerar grov sand, ljus orange mellansand, beige fin sand och brun silt.

Tabell 4.1: Materialegenskaper för materialen grov sand, mellansand, fin sand och silt som de är definierade i den regionala modellen. Tabellen är hämtad direkt ur dialogrutan för material i GMS.

Name	Color/Pattern	Transparency (%)	Horizontal k (m/d)	Vertical k (m/d)	Horiz. anisotropy	Vert. anisotropy (Kh/Kv)	Specific storage (1/m)	Specific yield	Long. disp.	Porosity
Grov sand		0.0	23.5	23.5	1.0	1.0	0.0	0.2	1.0	0.3
Mellansand		0.0	16.5	16.5	1.0	1.0	0.0	0.15	1.0	0.2
Fin sand		0.0	9.5	9.5	1.0	1.0	0.0	0.1	1.0	0.1
Silt		0.0	5.0	5.0	1.0	1.0	0.0	0.03	1.0	0.05

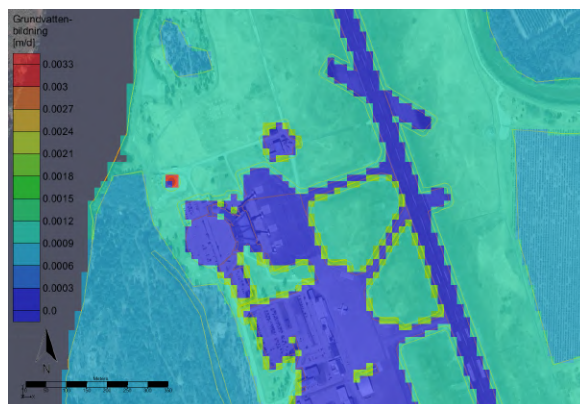
4.1.5 Grundvattenbildning

Den konceptuella modellen för grundvattenbildning är hämtad direkt från SGI:s modell och är baserad på antaganden om nederbörd, avrinning och avdunstning på olika ytor i modellområdet. I SGI:s modell antas att grundvattenbildningen i området generellt är 339 mm/år, men att den skiljer sig beroende på markanvändning. Det antas att den nederbörd som faller på hårdgjorda ytor (asfalt och takytor) rinner av och infiltrerar marken vid sidan av dessa, vilket ger högre grundvattenbildning. Grundvattenbildningen på skogsmarker antas vara lägre än den på sandiga fält på grund av högre evapotranspiration. Olika områden inom modellområdet har avgränsats med hänsyn till markanvändningen, se figur 4.4. I varje polygon definierades ett justerat värde

på grundvattenbildningen baserat på de beskrivna antagandena, se figur 4.5. I appendix presenteras de valda värdena på grundvattenbildningen i de olika områdena mer detaljerat, se tabell 9.4 samt figurer 9.1-9.3. Grundvattenbildningen definierades i paketet *Recharge* (RCH1) i de översta aktiva cellerna (lager 1).



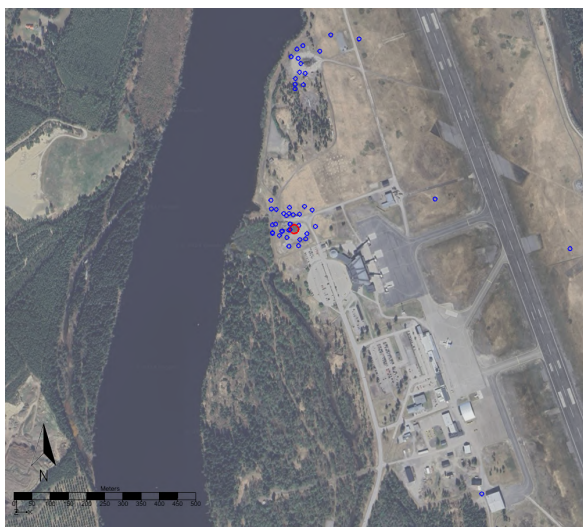
Figur 4.4: Områden med olika markanvändning avgränsas med gula linjer. Områdena används för antaganden om grundvattenbildningen på ön.



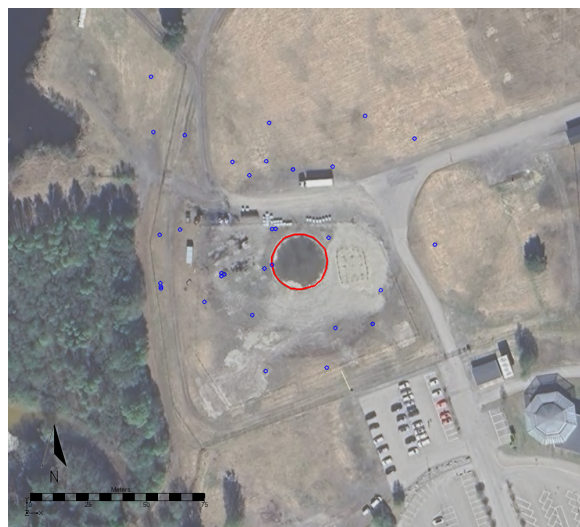
Figur 4.5: Illustration av hur grundvattenbildningen har definierats med olika värden på olika marktyper.

4.1.6 Flödessimulering

För att göra flödessimuleringar används i detta arbete en version av MODFLOW som kallas MODFLOW-NWT, vilket är en Newton-Raphson-formulering av MODFLOW-2005. MODFLOW-NWT är utvecklad för att förbättra modellering av grundvattenflöde i öppna akviferer (USGS 2022). MODFLOW-NWT användes tillsammans med lösningsmetoden NWT och flödespaketet *Upstream Weighting* (UPW) (USGS 2022). Flödessimuleringen kördes som en stationär simulering. De simulerade grundvattennivåerna jämfördes mot uppmätta värden på grundvattennivåer i flera punkter, se figur 4.6 och 4.7.



Figur 4.6: Platser för uppmätta grundvattennivåer omkring båda BÖP och i anslutning till flygplatsen utmärkta som blå punkter.



Figur 4.7: Punkter för uppmätta grundvattennivåer kring den gamla BÖP (röd ring) markerade som blå punkter.

4.1.7 PFAS-modell

Den konceptuella modellen för utbredningen av PFAS i området kring den gamla brandövningsplatsen är hämtad från SGI:s kalibrerade modell. Den är konstruerad på så sätt att det genereras en plym av PFAS i den omrättade zonen intill den gamla BÖP. Den är utformad för att generera en plym vars koncentrationer uppgår i samma storleksordning som totalkoncentrationen av de 32 PFAS som har uppmätts vid grundvattenprovtagning (Sellén & Filipovic 2023a). Den bygger på antagandet att grundvattnet belastats med PFAS via grundvattenbildningen i ett utvalt område kring den gamla BÖP under en viss tidsperiod. Plymen behöfve skapas i den regionala modellen för att brunnarnas placering skulle kunna fastställas. Plymen behöfve senare skapas på nytt i de enskilda lokala modellerna, vilket beskrivs vidare i avsnitt 4.3. I det här avsnittet beskrivs utformningen av den konceptuella modell som användes för att kunna skapa PFAS-plymen i den regionala modellen, samt de relevanta parametrar i MT3D-USGS som valts för att simulera transporten av PFAS.

Den konceptuella modellen består av flertalet avgränsade områden runt den gamla BÖP. Olika värden på en PFAS-koncentration i grundvattenbildningen har definierats inom dessa avgränsade områden med hjälp av paketet *Source/sink Mixing Package*. I figur 4.8 är områdena markerade med siffrorna 1–4. I tabell 4.2 presenteras värdena på den valda PFAS-koncentrationen i grundvattenbildningen för varje område. Brandplattan vid den gamla BÖP är markerad i en cirkel (områdes-ID 1) och området runt brandplattan i en större cirkel (områdes-ID 2). Nord-nordväst om brandplattan är ytterligare en cirkel skapad där det tidigare har funnits en infiltrationsanläggning (områdes-ID 3). Dessa cirklar omges av en större oval (områdes-ID 4). Denna är utsträckt i en riktning som motsvarar vindriktningen som vanligen råder på platsen. Denna utformning är baserad på ett antagande som SGI har gjort om att spridningen av brandsläckningsskum och vatten runt brandövningsplatsen har sträckts ut med vinden (områdes-ID 4).



Figur 4.8: Områden intill den gamla BÖP inom vilka en PFAS-koncentration i grundvattenbildningen har definierats markerade med siffrorna 1, 2, 3 och 4. Område 1 markerar brandplattan och område 2 det direkta området omkring brandplattan. Område 3 markerar platsen för var det tidigare funnits en infiltrationsanläggning.

Tabell 4.2: Värden på PFAS-koncentrationen i grundvattenbildningen som definierats i polygoner med ID 1–4 i den konceptuella modellen över spridningen av PFAS-föreningar kring den gamla BÖP.

ID	PFAS-konc. i grundvattenbildning [mg/L]
1	0,0
2	0,04
3	0,08
4	0,02

Modelleringen av PFAS-transport gjordes med den numeriska modellen MT3D-USGS, vilket är en uppdaterad version av MT3DMS. Den är utvecklad av USGS och innehåller vissa ytterligare funktioner för transportmodellering. Bland annat är ämnestransport genom torra celler möjlig, något som kan uppstå med MODFLOW-versionen NWT (USGS u.å.[b]). I det följande radas relevanta modellinställningar och använda paket upp.

- Porositet och longitudinell dispersivitet valdes att definieras av materialen.
- I paketet *Advection Package* användes den förinställda lösningsmetoden *Third order TVD Scheme (ULTIMATE)*.
- I paketet *Dispersion Package* gjordes följande inställningar:
 - NOCROSS¹ aktiverades.
 - TRPT² och TRVT³ behöll defaultvärdena 0,1 respektive 0,01 i alla lager.
 - DMCOEF⁴ valdes till $4,55 \times 10^{-5}$ m²/d i alla lager enligt Gauthier och Mabury (2024).
- I paketet *Transport Observation Package* ändrades inga värden från de förinställda.

PFAS-plymen skapades genom att köra MT3D-USGS med valda inställningar och med den tidigare skapade regionala flödessimuleringen. MT3D-USGS kördes i en simuleringssperiod om 20 år. Denna simuleringssperiod valdes efter olika försök att uppnå stationära förhållanden, så att koncentrationerna i plymen inte längre förändrades under körningen. De simulerade koncentrationerna jämfördes mot uppmätta värden från den dynamiska grundvattenprovtagningen (Sellén & Filipovic 2023a) för att kontrollera att storleksordningen av koncentrationerna i plymen motsvarade de uppmätta värdena (jämför med figur 3.2).

4.2 EXTRAKTIONSBRUNNAR

Fyra scenarier med extraktionsbrunnar utarbetades baserat på de regionala flödes- och transportsimuleringarna. För att skapa brunnar aktiverades MODFLOW-paketet *Multi Node Well 2* (MNW2). För att välja en rimlig uttagshastighet på brunnarna undersöktes flödet genom det förorenade området genom att ett godtyckligt område omkring den gamla BÖP markerades (figur 4.9). Området valdes för att omfatta hela PFAS-plymen. Arean av det markerade området är ca 93 700 m² och det sträcker sig i djupled genom samtliga modellager. Flödes hastigheten genom det markerade området kontrollerades till ca 1,5 L/s.

¹MT3D-USGS disable cross dispersion

²TRPT = förhållande mellan horisontell transversal dispersivitet och longitudinell dispersivitet [enhetslös].

³TRVT = förhållandet mellan vertikal transversal dispersivitet och longitudinell dispersivitet [enhetslös].

⁴DMCOEF = effektiv molekylär diffusionskoefficient [m²/d].



Figur 4.9: Område som användes för att undersöka flödes hastigheten vid den gamla BÖP för att bestämma en rimlig uttagshastighet på brunnar. Området sträcker sig i djupled genom samtliga lager i modellen.

Brunnarna valdes med hänsyn till flödesmängden genom det förorenade området samt plymens utseende. Brunnarnas egenskaper definierades i fyra olika scenarier; A, B, C och D, se tabell 4.3. I tabellen presenteras valda uttagshastigheter tillsammans med antal brunnar, filterdjup och totalt uttag för respektive scenario. De egenskaper som presenteras i tabellen är de som varierade mellan scenarierna och utmärker dem. Brunnarnas egenskaper är valda på ett sätt för att kunna jämföra effekten av dem. Man kan jämföra scenario A och B för att undersöka effekten av antal brunnar och placering. Scenario B och C kan jämföras för att undersöka effekten av filterdjup. C och D kan jämföras för att undersöka effekten av uttagshastighet.

Tabell 4.3: Brunnarnas egenskaper i brunnscenario A, B, C och D. Grundvattennivån i modellen ligger vid ca 0 m ö.h.

Scenario	A	B	C	D
Antal brunnar	2	1	1	1
Uttag per brunn [L/s]	1	2	2	4
Totalt uttag [L/s]	2	2	2	4
Filterdjup [m u.h.]	1-6	1-6	1-10	1-10

Filterdjupet valdes i samtliga scenarier till att börja ca 1 m under grundvattenytan. I modellerna ligger grundvattenytan vid ca 0 m ö.h. Vid filterdjup 1–6 m u.h. i scenario A når brunnarna ner till lager 6 (Brunn 1) och lager 7 (Brunn 2) i modellen. I scenario B når brunnen ner till lager 5. Vid filterdjup 1–10 m u.h. i scenario C och D når brunnen ner till lager 10 i modellen.

Vattenuttaget per brunn och det totala uttaget varierar mellan de olika scenarierna. I scenario A är det totala uttaget 2 L/s, fördelat på två brunnar. I scenarierna B och C sker det totala uttaget om 2 L/s istället från en enda brunn. För scenario D är det totala uttaget 4 L/s från en brunn. Andra parametrar i MNW2-paketet som inte varierade mellan scenarierna är brunnradie, R_w , som valdes till 0,05 m och *LOSSTYPE*⁵ som valdes till *THIEM*⁶.

Brunnarnas placering varierar mellan scenarierna, som illustreras i figur 4.10 och 4.11. I scenario A är två brunnar placerade längre uppströms i anslutning till den gamla BÖP. Scenarierna B, C och D har en enda brunn som är placerad längre nedströms jämfört med brunnarna i scenario A. I samtliga scenarier är brunnarna placerade inom området för den modellerade PFAS-plymen i den regionala modellen.



Figur 4.10: Brunnarnas placering i scenario A. Brandplattan markeras med en röd cirkel.



Figur 4.11: Brunnens placering i scenario B, C och D. Brandplattan markeras med en röd cirkel.

4.3 LOKALA MODELLER

Baserat på de fyra brunnscenarierna har det skapats lika många lokala modeller över den gamla BÖP. En av dessa användes för att skapa geologiskt heterogena marklager och undersöka effekten av detta, se avsnitt 4.3.4. Samtliga lokala modeller skapades med hjälp av den regionala flödes- och transportsmodellen för respektive brunnscenario. Marklager och markegenskaper, grundvattenbildning och inställningarna för flödessimuleringen är desamma som i den regionala modellen, se avsnitt 4.1. Detta avsnitt beskriver utformningen av de lokala modellerna, med fokus på de aspekter som skiljer sig från den regionala modellen.

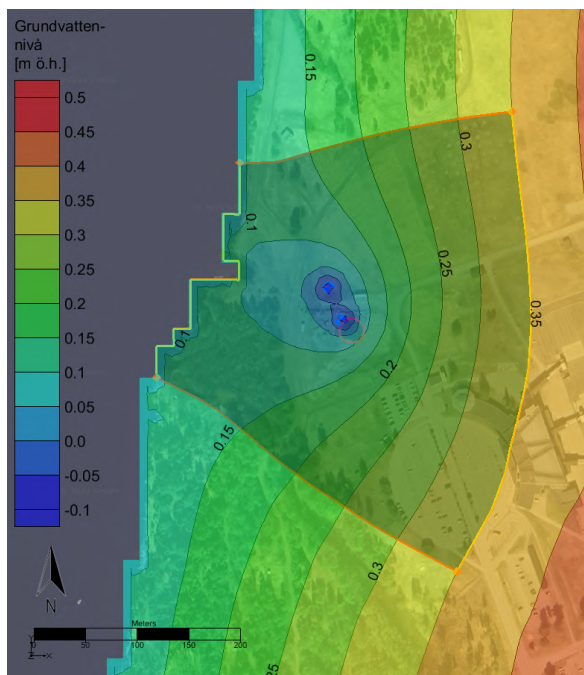
4.3.1 Modellområde

De lokala modeller som utvecklats är baserade på flödessimuleringarna för respektive brunnscenario i den regionala modellen. I samtliga scenarier omfattar det valda området PFAS-plymen. För varje brunnscenario genomfördes en ny flödessimulering, varefter det valda området till de lokala modellerna anpassades utifrån resultaten. Gränsdragningen fastställdes med hänsyn till ekvipotentiallinjerna från flödessimuleringen, se figur 4.12 och 4.13. Den östra gränsen drogs längs en ekvipotentiallinje, medan de norra och södra gränserna ritades vinkelrätt mot ekvipotentiallinjerna och sträcker sig mot den västra gränsen, som definieras av rasternätets ytterkant.

⁵ Används för att definiera pumpförlust i brunnen (USGS u.å.[a]).

⁶ Modell för pumpförlust baserad på Thiemekvationen (USGS u.å.[a]).

Modellområdet utvecklades först för scenario A och användes därefter som utgångspunkt för att definiera områdena i de övriga scenarierna B, C och D. Gränserna från scenario A justerades för att passa respektive flödessimulering, med målet att skapa modellområden av så likartad storlek som möjligt.



Figur 4.12: Modellgränser för brunnscenario A som följer en ekvipotentiallinje i flödessimuleringen med brunnar i den regionala modellen.



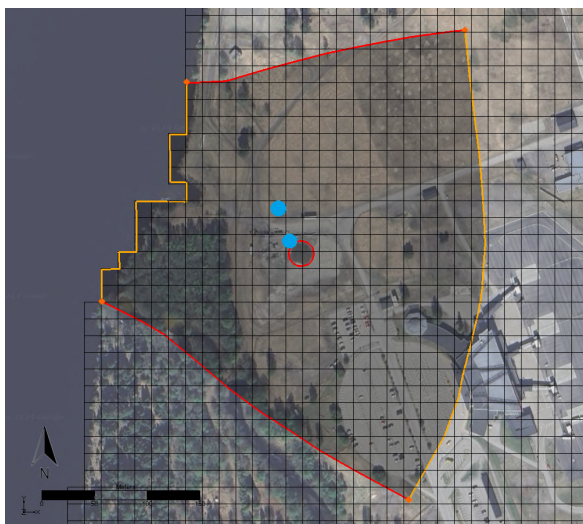
Figur 4.13: Modellgränser för den lokala modellen för brunnscenario A. Röd ring markerar platsen för den gamla BÖP och blå prickar markerar brunnarnas position.

4.3.2 Rasternät

Rasternätet i de lokala modellerna utformades med mindre cellstorlek än i den regionala modellen, jämför figur 4.14 och 4.15. I de lokala modellerna har cellerna en storlek på 4×4 m. Det totala antalet aktiva celler varierar mellan de olika modellerna och ligger i spannet 96 012 - 112 154. Marklagrens tjocklek och egenskaper samma som i den regionala modellen (för en utförlig beskrivning se avsnitt 4.1.4). Den lokala modellen C vidareutvecklades emellertid senare för att skapa geologiska heterogeniteter i marklagren, vilka skiljer sig från den regionala modellen och de övriga lokala modellerna. Detta beskrivs vidare i avsnitt 4.3.4.

4.3.3 Randvillkor

Randvillkoren i modellen är definierade som en konstant grundvattennivå i de yttre cellerna i varje lager längs modellområdets västra och östra gräns (de gränser som visas med gula linjer i figur 4.14 och 4.15). Detta har gjorts med paketet *Time Variant Specified Head* (CHD).



Figur 4.14: Området för den lokala modellen i brunnscenari A innan ett nytt rasternät skapats. Cellstorlek 16×16 m. Gula linjer markerar gränser med definierade randvillkor, röda linjer gränser över vilka inget flöde sker. Blå prickar markerar brunnarnas position.



Figur 4.15: Området för den lokala modellen i brunnscenari A med det nya rasternätet med cellstorlek 4×4 m. Gula linjer markerar gränser med definierade randvillkor, röda linjer gränser över vilka inget flöde sker. Blå prickar markerar brunnarnas position.

Grundvattennivån är definierad genom tilldelande av konstanta värden vid fyra specifika noder i hörnen av modellens gränser, där de två västra noderna har tilldelats värdet 0,1 m och de två östra noderna ett värde som bestämts av den ekvipotentiallinje som gränsen är ritad efter. Detta värde varierar därför i de olika modellerna. I modell A är det 0,359 m, i B är det 0,362 m, i C 0,370 m och i D 0,335 m. Gränsdragningen har valts så att det inte sker något flöde över de norra och södra gränserna.

För att på nytt skapa PFAS-plymen i de lokala modellerna gjordes inledningsvis en flödessimulering utan brunnar. För dessa valdes ett annat värde på de två östra noderna för att randvillkoret inte skulle vara påverkat av brunnen. Detta värde bestämdes med hjälp av flödessimuleringen utan brunnar i den regionala modellen. Värdet valdes till 0,4 m för samtliga lokala modeller och motsvarar ungefär det värde som grundvattennivån har i den regionala modellen på de lokala modellernas gräns.

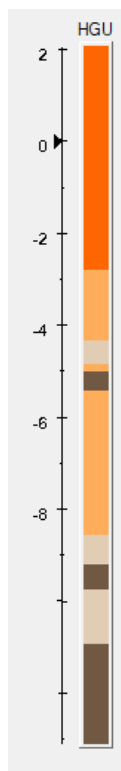
4.3.4 Geologiska heterogeniteter

I detta avsnitt beskrivs hur geologiska data integrerades i markmodellen genom att definiera borrhåls punkter i GMS baserade på två HPT-mätningar. Dessa borrhål låg till grund för en T-PROGS-simulering som skapade ett materialdataset med geologiska heterogeniteter som modellerades med brunnscenari C.

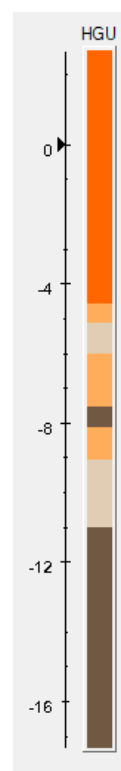
Borrhål

I GMS är det möjligt att integrera uppmätta geologiska data genom att definiera borrhåls punkter. I detta projekt skapades två borrhål baserade på uppmätt hydraulisk konduktivitet från två HPT-punkter (Sellén & Filipovic 2023b). Borrhålen utformades med ett totalt djup motsvarande respektive HPT-mätning och varje borrhål delades in i djupintervall längs z -axeln utifrån ob-

serverade variationer i hydraulisk konduktivitet. Indelningen i djupintervall gjordes genom att visuellt uppskatta tjockleken av lager med en viss hydraulisk konduktivitet genom att undersöka graferna (figur 3.3 och 3.4). Varje djupintervall tilldelades sedan ett material i så kallade *hydrogeological units* (HGUs), se tabell 4.4 och 4.5. HGU-ID är den information som används av T-PROGS. Materialen valdes från de i modellen definierade materialen (grov sand, mellansand, fin sand eller silt). Tilldelning gjordes som en grov matchning av den hydrauliska konduktiviteten i materialen med den uppmätta hydrauliska konduktiviteten i HPT-punkterna.



Figur 4.16: Illustration av borrhål 38 som det utformats i GMS. Materialföljden är baserad på en visuell tolkning av den hydrauliska konduktiviteten i HPT-punkt 38. Materialen är grov sand (orange), mellansand (ljus orange), fin sand (beige) och silt (brun).



Figur 4.17: Illustration av borrhål 104 som det utformats i GMS. Materialföljden är baserad på en visuell tolkning av den hydrauliska konduktiviteten i HPT-punkt 104. Materialen är grov sand (orange), mellansand (ljus orange), fin sand (beige) och silt (brun).

Djupintervallen i borrhålen skiljer sig från de 14 lagren i den regionala och de lokala modellernas 3D-rasternät genom att borrhålen definierades med fler lager, där skiktjockleken varierar. Dessutom förekommer materialen i borrhålen mer blandat, som visas i figur 4.16 och 4.17. Till exempel kan ett tunt lager av silt vara omgivet av mellansand och fin sand både ovanför och under, vilket illustreras i figur 4.17. Båda borrhålen har definierats med ett lager grov sand överst och ett lager silt nederst. Däremellan flera lager av mellansand, finsand och silt. Dessa två borrhål ligger till grund för den T-PROGS-simulering som gjordes för att skapa geologiska heterogeniteter.

Tabell 4.4: Djupintervall och material som de har definierats i borrhål 38, jämför med figur 4.16. z-värdet avser höjd över havet.

Z [m ö.h.]	HGU ID
2,04	Grov sand
-2,81	Mellansand
-4,34	Fin sand
-4,84	Mellansand
-5,02	Silt
-5,42	Mellansand
-8,54	Fin sand
-9,18	Silt
-9,73	Fin sand
-10,91	Silt
-13,1	Silt

Tabell 4.5: Djupintervall och material som de har definierats i borrhål 104, jämför med figur 4.17. z-värdet avser höjd över havet.

Z [m ö.h.]	HGU ID
2,67	Grov sand
-4,57	Mellansand
-5,12	Fin sand
-6,0	Mellansand
-7,54	Silt
-8,09	Mellansand
-9,02	Fin sand
-10,99	Silt
-17,33	Silt

T-PROGS och heterogena marklager

En T-PROGS-simulering gjordes för att skapa ett materialdataset med geologiska heterogeniteter för brunnscenario C, baserat på de två borrhålen. När T-PROGS körs skapas statistiskt genererade, rumsligt korrelerade materiallinser baserat på båda borrhålen. Materiallinserna antar de proportioner och den storlek som definierats. För denna simulering valdes att samtliga HGUs skulle användas, det vill säga båda borrhålens fullständiga materialprofil. För att göra en simulering med T-PROGS definierades materialfraktioner och utbredning av linser i x, y och z-led.

Som bakgrundsmaterial valdes mellansand, vilket innebär att de definierade fraktionerna av de övriga materialen kommer läggas ovanpå en bakgrund av mellansand. Andel av respektive material definierades till 30 % silt, 30 % fin sand och 10 % grov sand. Andelen bakgrundsmaterial (mellansand) anpassar sig automatiskt till de valda fraktionerna, och blev då 30 %. Detta gjordes genom att materialproportioner definierades i z-led till 0,3 (silt), 0,3 (fin sand) respektive 0,1 (grov sand). I x- och y-led antas automatiskt samma materialfraktioner som i z-led och kan inte ändras.

Linserna definierades som 1 m tjocka och 50 m långa både i x- och y-led. Detta gjordes genom att linslängden i z-led sattes till 1 m. I både x- och y-led sattes linslängden till 50 m. Samtliga inställningar till T-PROGS-simuleringen redovisas i appendix avsnitt 9.4, se figur 9.4–9.7.

Som en känslighetsanalys undersöktes hur resultatet påverkades genom att ändra porositeten i materialen. Av denna anledning skapades en variant av den heterogena modellen, där porositeten i samtliga material ändrades till 30 %. I slutändan fanns det alltså tre varianter av den lokala modellen skapad utifrån brunnscenario C:

- C: Homogena marklager, materialen har olika värden på porositet, se figur 4.1.
- C2: Heterogena marklager, materialen har olika värden på porositet, se figur 4.1.
- C3: Heterogena marklager, alla material har porositet 30 %.

I rapporten används fortsättningsvis benämningarna C, C2 och C3 för att referera till de olika modellerna.

4.3.5 PFAS-modell

Den PFAS-plym som simulerats i den regionala modellen återskapades med vissa justeringar i samtliga lokala modeller. I den regionala modellen användes plymen för att avgränsa området för de lokala modellerna. I de lokala modellerna måste plymen simuleras på nytt för att användas i flödessimuleringar med och utan brunnar.

Generering av plym

Plymen skapades på samma sätt enligt samma konceptuella modell som användes i den regionala modellen, med utmarkerade områden på och omkring gamla BÖP som tilldelades en viss föroreningsbelastning till grundvattnet, se figur 4.8 och tabell 4.2 samt avsnitt 4.1.7 för en utförlig beskrivning av detta. Likt i den regionala modellen har den numeriska modellen MT3D-USGS använts för att modellera föroreningstransporten. Alla inställningar är samma som beskrivna i avsnitt 4.1.7. Den enda skillnaden är att en annan lösningsmetod valdes för modellerna med geologiska heterogeniteter, nämligen standard finita differensmetoden. Detta gjordes för att körningen avbröts med andra lösningsmetoder.

PFAS-plymen skapades genom att köra modellen med de lokala flödessimuleringarna utan brunnar. MT3D-USGS kördes i en simuleringsperiod om 30 år. Simuleringstiden valdes så att stationära koncentrationsförhållanden i plymen skulle uppnås, det vill säga att koncentrationerna inte längre förändrades i slutet av simuleringsperioden. Det noterades att stationära förhållanden inte hade uppnåtts vid 20 år (simuleringstiden som användes i den regionala modellen), varpå simuleringsperioden 30 år valdes istället. Det konstaterades att plymen uppnått stationära förhållanden och de simulerade koncentrationerna jämfördes mot koncentrationerna i den regionala modellen för att kontrollera att den lokala plymen liknade plymen i den regionala modellen.

Omskalning av plymkoncentrationer

Plymen i den regionala modellen var skapad och kalibrerad för att simulera den totala koncentrationen av 32 PFAS. I de lokala modellerna valdes att koncentrationen skulle skalas om för att bättre motsvara den av PFOS, vilket är det mest förekommande PFAS-ämnet på platsen och i snitt står för ca 50 % av den totala koncentrationen (se avsnitt 3.2 för en beskrivning av detta). Baserat på koncentrationsförhållanden i den dynamiska grundvattenprovtagningen (Sellén & Filipovic 2023a) multiplicerades hela datasetet med PFAS-koncentrationerna med en faktor 0,5 och dessa sattes som startkoncentration.

I paketet *Source/sink Mixing Package* stängdes PFAS-koncentrationen i grundvattenbildningen av. Detta medför att inget nytt PFAS tillkommer till grundvattnet under simuleringsperioden i de kommande transportsimuleringarna. Detta gjordes mot bakgrund av antagandet om en fullständigt sanerad omättad zon vid implementeringen av extraktionsbrunnar.

Definiering av PFAS-ämnena

Tre ämnen med olika K_d -värden definierades med *Basic Transport Package* och *Chemical Reaction Package* i MT3D-USGS. Samma startkoncentration av PFAS användes för samtliga ämnen. Linjär sorption valdes och ämnena tilldelades olika K_d -värden (första sorptionskonstanten). K_d valdes till 10, 1 respektive 0,1 L/kg. Det valdes att arbeta med generella K_d -värden i ett intervall av tiopotenser (0,1; 1 och 10). Detta för att möjliggöra en analys av effekten av

storleken av K_d -värde och undersöka skillnaden mellan hög och låg sorption. Det är dessutom svårt att hitta applicerbara ämnesspecifika värden i litteraturen, eftersom K_d -värdet är beroende av många olika faktorer, bland annat koncentration och platsspecifika geologiska och hydrologiska egenskaper (som beskrivet i avsnitt 1.1.3). För syftena av detta arbete ansågs det därför dugligt att välja generella värden.

Den torra skrymdensiteten definierades i varje lager beroende på material enligt Tatsuoka et al. (1980). Grov sand i lager 1-2 tilldelades värdet 1800 kg/m^3 , mellansand och fin sand i lager 3-13 tilldelades värdet 1900 kg/m^3 och silt i lager 14 värdet 1700 kg/m^3 .

MT3D-USGS kördes tillsammans med flödessimuleringen utan brunnar samt med flödessimuleringen med brunnar. En simuleringsperiod om 50 år valdes för samtliga lokala modeller. Denna simuleringsperiod valdes som en avvägning mellan att simulera en så lång tidsperiod som möjligt och att körningarna inte skulle ta för lång tid. Resultaten exporterades och sammanställdes i Excel.

4.4 KALIBRERING OCH VALIDERING

Resultatet av samtliga flödesmodeller (utan brunnar) jämfördes mot uppmätta värden på grundvattennivån i flera punkter, se figur 4.6 och 4.7. Detta gjordes genom att undersöka de kalibreringspunkter som var skapade av SGI för samtliga observationspunkter i den regionala modellen, se tabell 9.5 i appendix. I detta arbete användes de för att jämföra flödessimuleringarna mot SGI:s kalibrerade modell och för att jämföra simulerade grundvattennivåer mot uppmätta grundvattennivåer. Felintervallet är definierat till 0,25 m. Samma kalibreringspunkter användes i de lokala modellerna som i den regionala modellen, men vissa punkter hamnade utanför modellområdet och endast de som låg innanför användes.

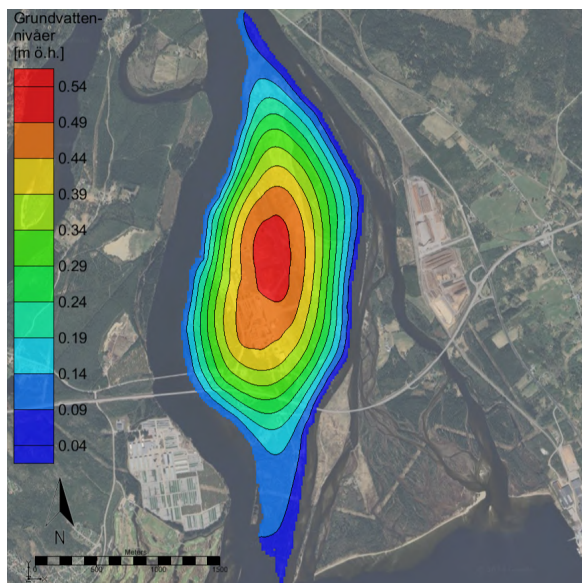
5 RESULTAT

I detta avsnitt presenteras inledningsvis resultatet av de simuleringar som gjordes i den regionala modellen. Därpå följer resultatet av simuleringarna som gjordes i de lokala modellerna A, B, C och D för respektive brunnscenario, samt i modellerna C2 och C3 med heterogena marklager med brunnscenario C. Pumpeffekten undersöks i huvudsak med avseende på reduktion av total massa i modellerna, men det görs också analyser av koncentrationsförändringar och visuella undersökningar av plymrörelser.

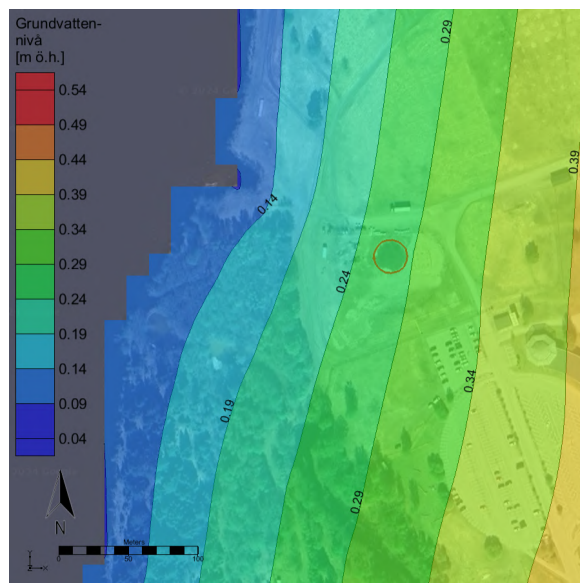
5.1 REGIONAL MODELL

5.1.1 Flödessimulering

Resultatet av den flödessimulering som gjordes i den regionala modellen presenteras i figur 5.1 och 5.2. De högsta grundvattennivåerna uppgår till ca 0,54 m ö.h. i mitten av ön. Grundvattennivåerna minskar gradvis ut mot strandkanten och de lägsta värdena är definierade av randvillkoren på den östra (0,06 m) och västra (0,1 m) stranden.

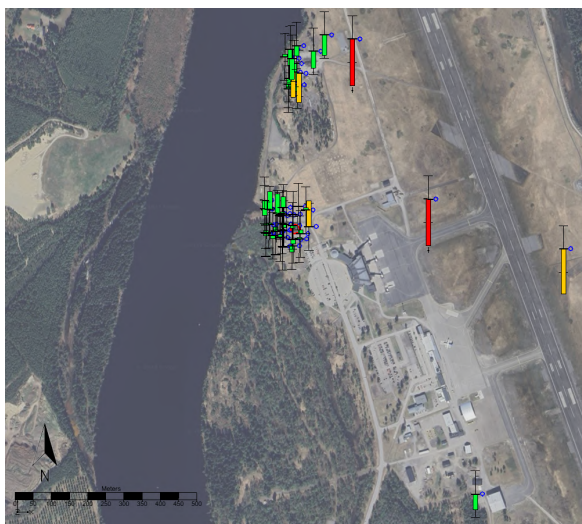


Figur 5.1: Modellerad grundvattennivå inom hela modellområdet för den regionala modellen som omfattar ön Skeppsholmen.

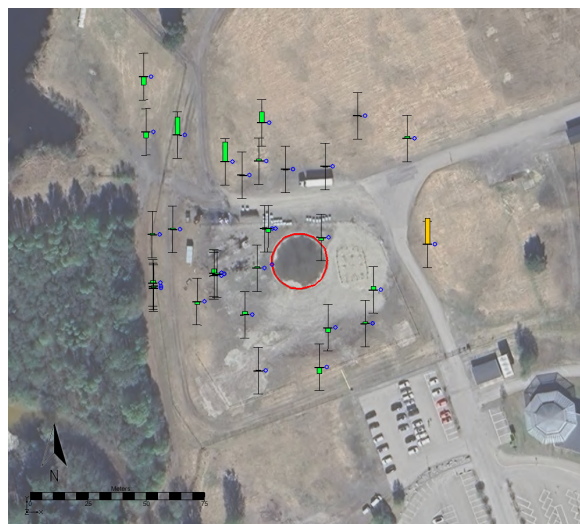


Figur 5.2: Modellerad grundvattennivå i området omkring den gamla BÖP, markerad med en röd ring.

De kalibreringspunkter som definierats för de uppmätta grundvattennivåerna presenteras i figur 5.3 och 5.4. Grön färg symboliserar att den modellerade grundvattennivån ligger inom det definierade kalibreringsintervallet om 0,25 m jämfört med det uppmätta värdet. Gul färg symboliserar att modellvärdet ligger utanför intervallet med ett fel mindre än 200 %. Röd färg betyder att felet är större än 200 %. Runt den gamla BÖP (figur 5.4) är det endast en punkt som ligger utanför kalibreringsintervallet (gul stapel). Övriga staplar är gröna. Det är dock viktigt att notera att de uppmätta värdena är insamlade vid olika tidpunkter och under olika säsonger, vilket innebär att de sannolikt påverkats av säsongvariationer.

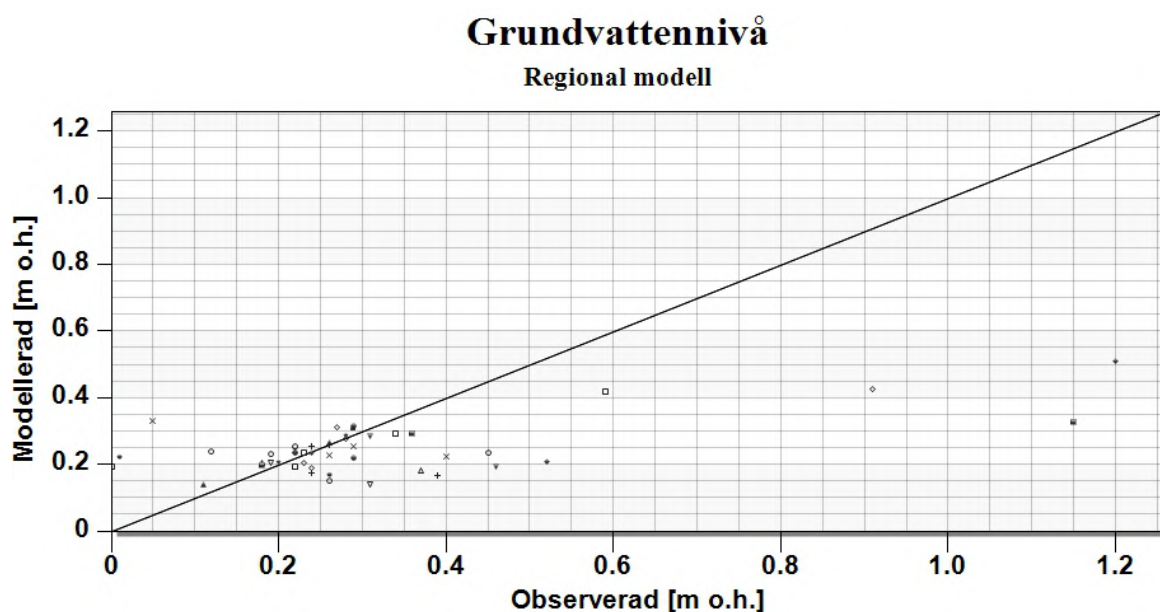


Figur 5.3: Kalibreringsstablar för den regionala flödesmodellen i de punkter där uppmätta värden på grundvattennivåerna finns tillgängliga.



Figur 5.4: Inzoomad bild över kalibreringsstablar för den regionala flödesmodellen kring den gamla BÖP, markerad med en röd ring.

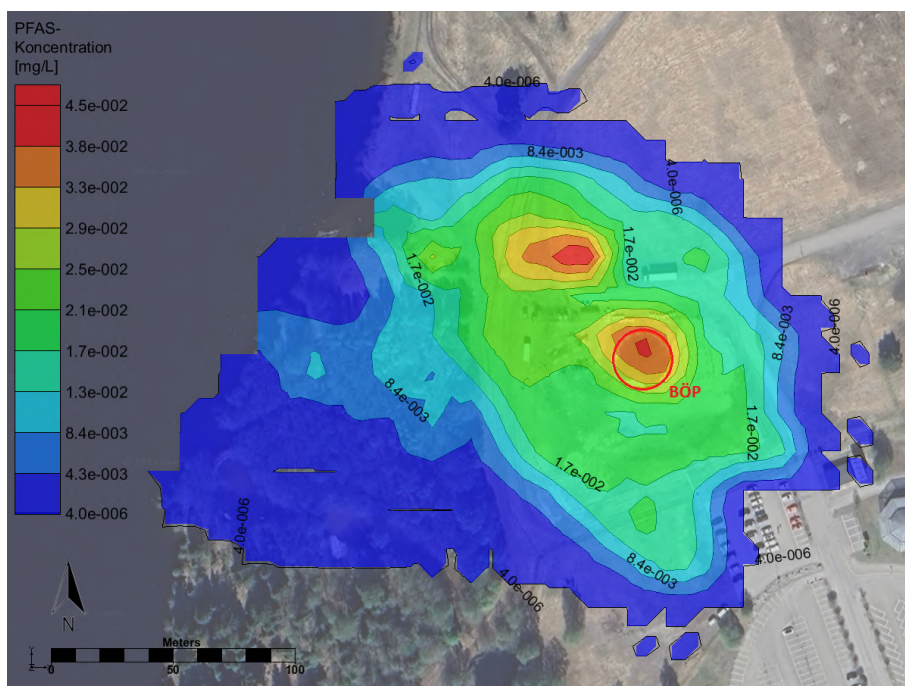
Figur 5.5 visar hur de uppmätta grundvattennivåerna förhåller sig till de modellerade värdena i den regionala modellen. Punkterna representerar de uppmätta värdena och den raka linjen är de modellerade värdena. Ju längre ifrån linjen en punkt befinner sig, desto större fel. I tabell 9.5 i appendix presenteras de uppmätta och modellerade värdena i varje punkt samt skillnaden mellan dessa.



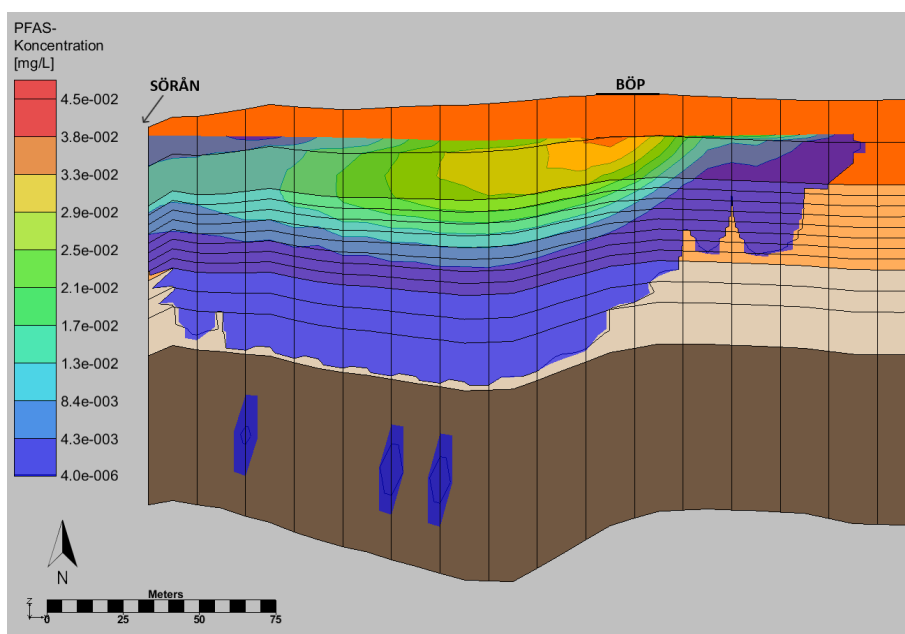
Figur 5.5: Rak linje visar de modellerade värdena på grundvattennivå i den regionala modellen. Denna kan jämföras mot uppmätta värden som representeras av punkter i figuren.

5.1.2 PFAS-plym

I figur 5.6 presenteras resultatet av den PFAS-simulering som gjordes i den regionala modellen vid den gamla BÖP för att skapa en plym av PFAS. Figuren visar koncentration PFAS i mg/L i det översta modellaget (lager 1) i det sista tidssteget av simuleringen (tidssteg 20 år). Det markerade området har värden i intervallet $4 \times 10^{-6} - 4,5 \times 10^{-2}$ mg/L (4–45 000 ng/L).



Figur 5.6: Modellerad PFAS-plym sett uppifrån, modellager 1. Utbredningen visas som koncentration PFAS i mg/L i det sista tidssteget av simuleringen (tidssteg 20 år).



Figur 5.7: Modellerad PFAS-plym från den södra sidan sett. Utsnittet är gjort i mitten av plymen där utbredningen är som djupast. Utbredningen visas som koncentration PFAS i mg/L i det sista tidssteget av simuleringen (tidssteg 20 år).

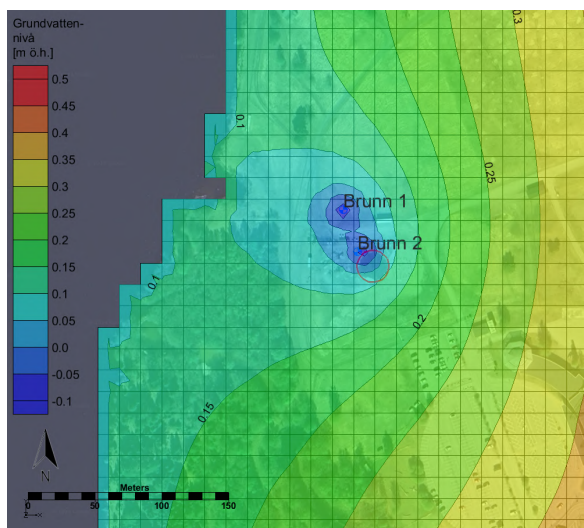
Plymen är skapad utifrån totalkoncentrationer av 32 PFAS enligt Sellén & Filipovic (2023a). Den modellerade plymen sträcker sig i djupled ned genom samtliga modellager, se figur 5.7. De högsta koncentrationerna finns närmast BÖP i de övre modellagren. I lager 14 (nederst) förekommer enskilda fläckar med koncentrationer över 4×10^{-6} mg/L (4 ng/L). Figuren visar ett utsnitt i mitten av plymen där utbredningen är som djupast, sett från den södra sidan.

5.1.3 Extraktionsbrunnar

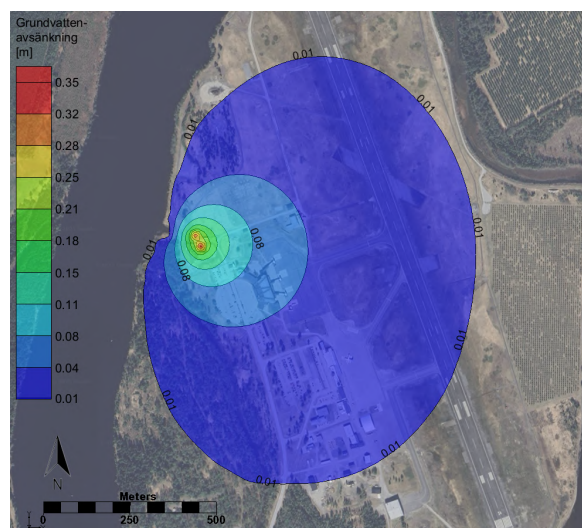
Resultatet av de flödessimuleringar som gjordes för respektive brunnscenario i den regionala modellen presenteras i detta avsnitt. För varje scenario presenteras modellerade grundvattennivåer vid den gamla BÖP samt den grundvattenavsänkning som respektive brunn medför.

Scenario A

I brunnscenario A är två extraktionsbrunnar utplacerade i området kring den gamla BÖP. Uttagshastigheten är 1 L/s för respektive brunn vilket ger en total uttagshastighet på 2 L/s. Filterdjupet för båda brunnarna går mellan 1 och 6 m under grundvattenytan, som ligger ca 0 m ö.h. Flödessimuleringen med brunnar visas i figur 5.8. Beräknad grundvattenavsänkning presenteras i figur 5.9. En avsänkning om 1 cm sträcker sig förbi landningsbanan, ca 800 m österut.



Figur 5.8: Grundvattennivåer [m ö.h.] i flödessimuleringen för brunnscenario A.

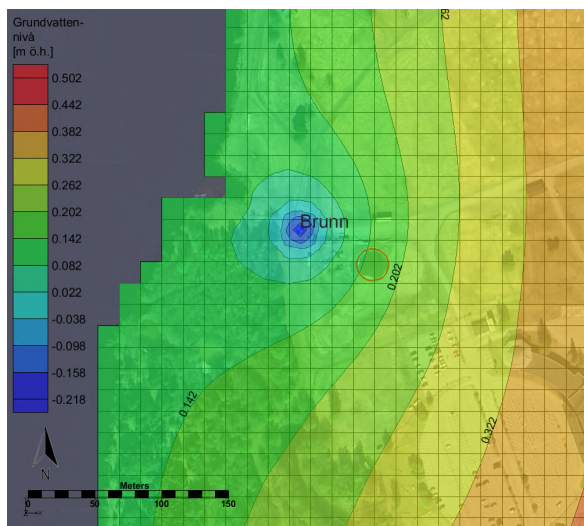


Figur 5.9: Grundvattenavsänkning [m] till följd av pumpning för brunnscenario A.

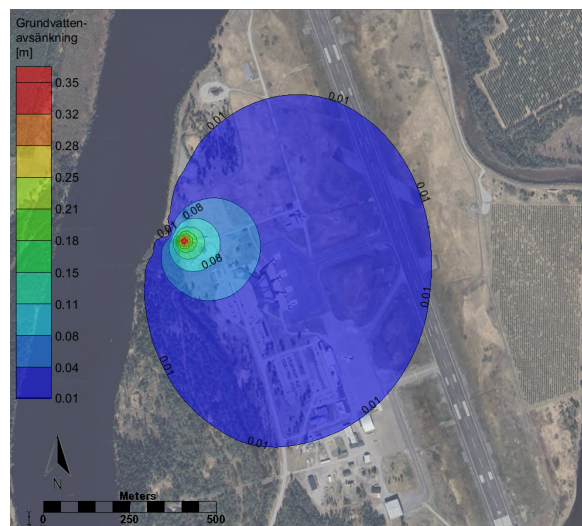
På följande sidor presenteras flödessimuleringar och grundvattenavsänkning för scenario B, C och D.

Scenario B

I brunnsscenario B är en extraktionsbrunn utplacerad väster om brandplattan vid den gamla BÖP. Uttagshastigheten är 2 L/s. Filterdjupet går mellan 1 och 6 m under grundvattenytan, som ligger ca 0 m ö.h. Resultaten av flödessimuleringen med brunn presenteras i figur 5.10. Beräknad grundvattenavsänkning presenteras i figur 5.11. En avsänkning motsvarande 1 cm syns i ett område som sträcker sig ca 750 m från brunnen.



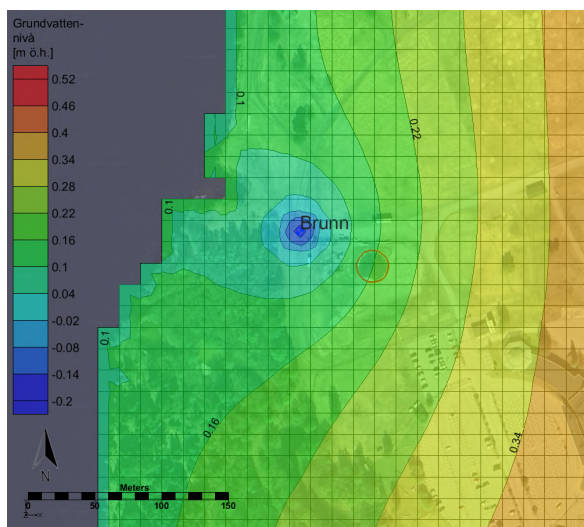
Figur 5.10: Grundvattennivåer [m ö.h.] i flödessimuleringen för brunnsscenario B.



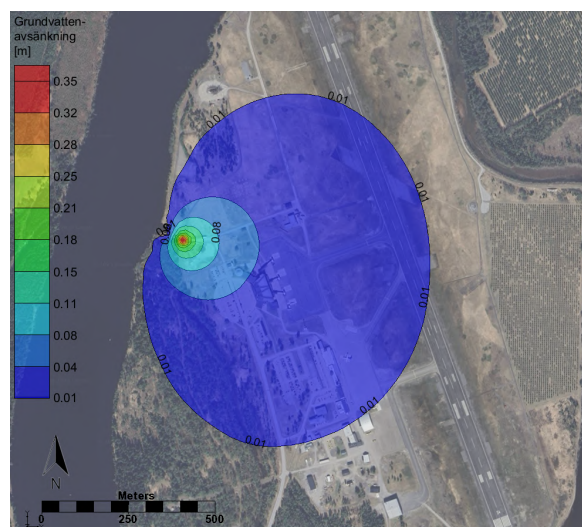
Figur 5.11: Grundvattenavsänkning [m] till följd av pumpning för brunnsscenario B.

Scenario C

I brunnsscenario C är en extraktionsbrunn utplacerad väster om brandplattan vid den gamla BÖP. Uttagshastigheten är 2 L/s. Filterdjupet går mellan 1 och 10 m under grundvattenytan, som ligger ca 0 m ö.h. Resultaten av flödessimuleringen med brunn presenteras i figur 5.12. Beräknad grundvattenavsänkning presenteras i figur 5.13. En avsänkning motsvarande 1 cm syns i ett område som sträcker sig ca 750 m från brunnen.



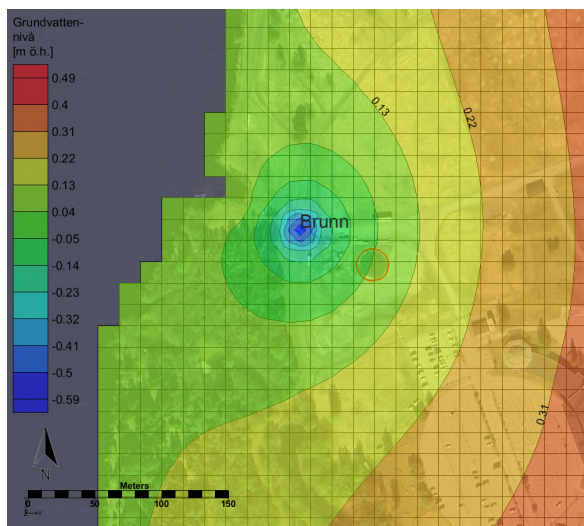
Figur 5.12: Grundvattennivåer [m ö.h.] i flödessimuleringen för brunnsscenario C.



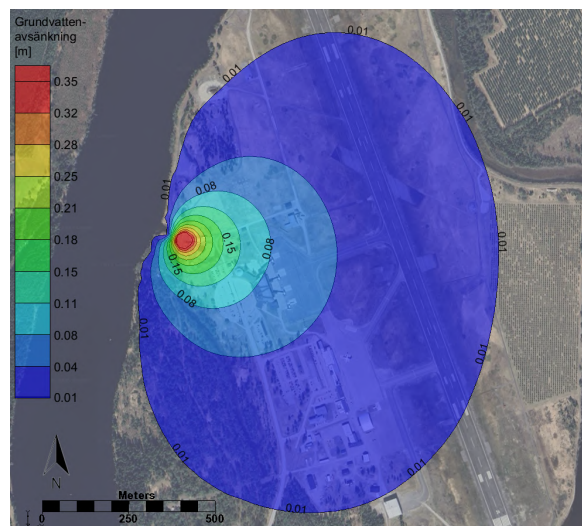
Figur 5.13: Grundvattenavsänkning [m] till följd av pumpning för brunnsscenario C.

Scenario D

I brunnsscenario D är en extraktionsbrunn utplacerad väster om brandplattan vid den gamla BÖP. Uttagshastigheten är 4 L/s. Filterdjupet går mellan 1 och 10 m under grundvattenytan, som ligger ca 0 m ö.h. Resultaten av flödessimuleringen med brunn presenteras i figur 5.12. Beräknad grundvattenavsänkning presenteras i figur 5.13. En avsänkning motsvarande 1 cm syns i ett område som sträcker sig omkring 900 m från brunnen.



Figur 5.14: Grundvattennivåer [m ö.h.] i flödessimuleringen för brunnsscenario D.



Figur 5.15: Grundvattenavsänkning [m] till följd av pumpning för brunnsscenario D.

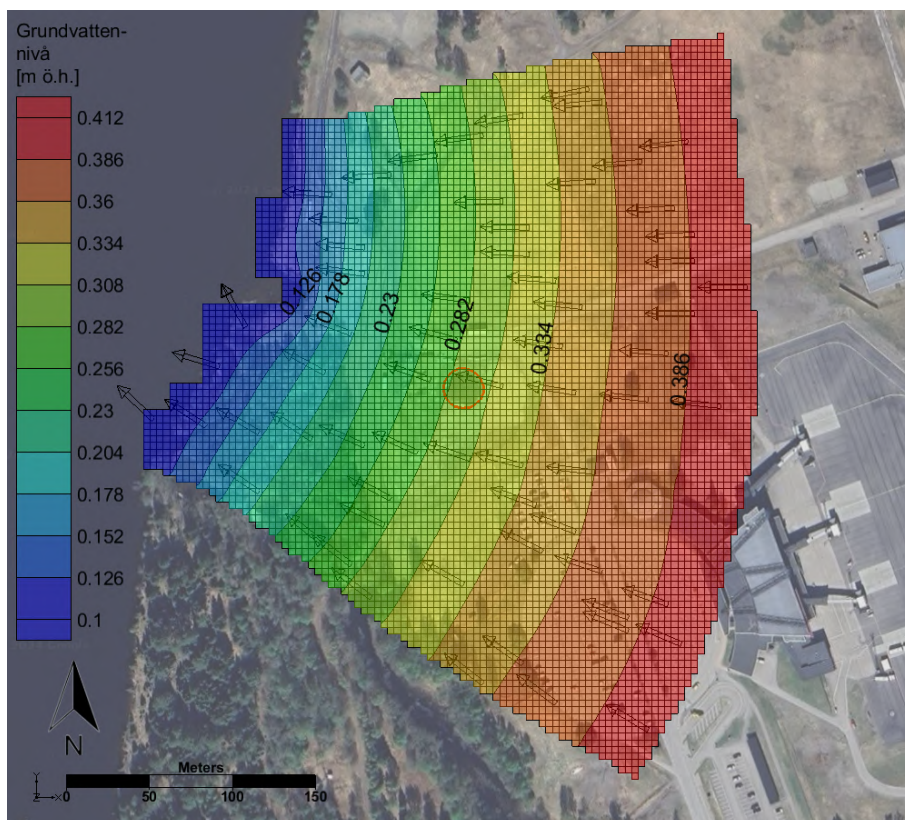
5.2 LOKALA MODELLER

5.2.1 Flödessimuleringar utan brunnar

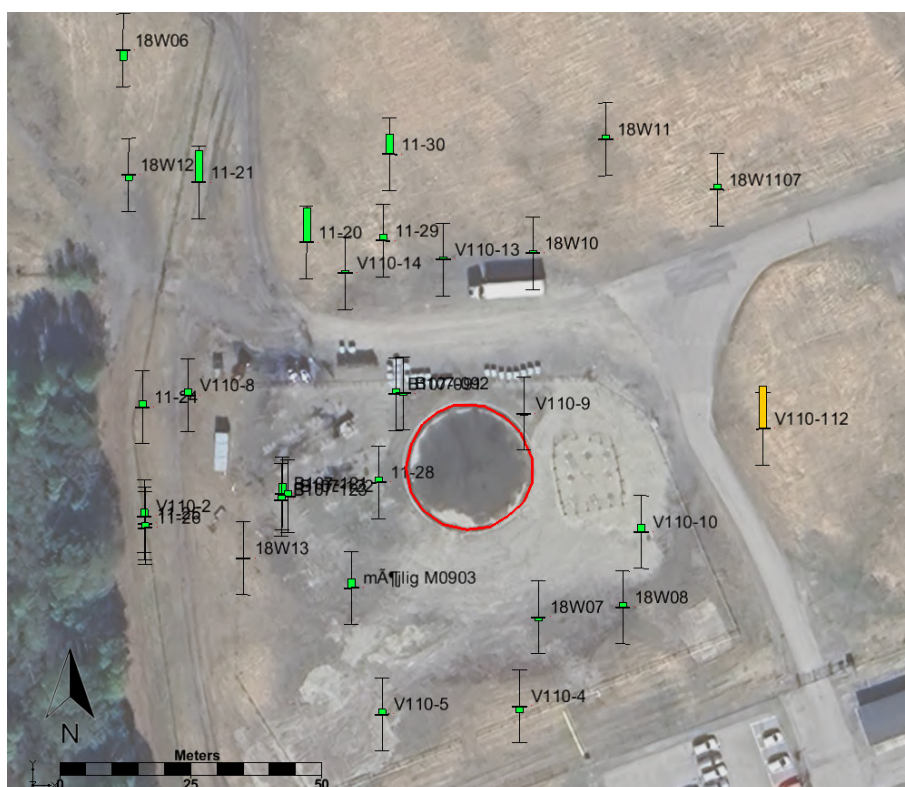
I de lokala modellerna skapades inledningsvis flödessimuleringar utan brunnar. I figur 5.16 visas grundvattennivåerna i den lokala modellen för brunnsscenario A när flödessimuleringen körts utan brunnar. Flödesriktningen visas med pilar och går från den östra sidan västerut mot Sörån.

Grundvattennivåerna och flödesriktning utan brunnar för de övriga lokala modellerna B, C och D liknar visuellt de i modell A, varpå de presenteras i appendix (avsnitt 9.5) i figur 9.8, 9.10 respektive 9.12 tillsammans med grafer för observerade och modellerade grundvattennivåer, se figur 9.9, 9.11 och 9.13. För modell C2 och C3 redovisas endast graferna med observerade och modellerade grundvattennivåer, se figur 9.14 och 9.15. I GMS beräknades medelfel för samtliga lokala modeller som presenteras i tabell 9.6 i appendix.

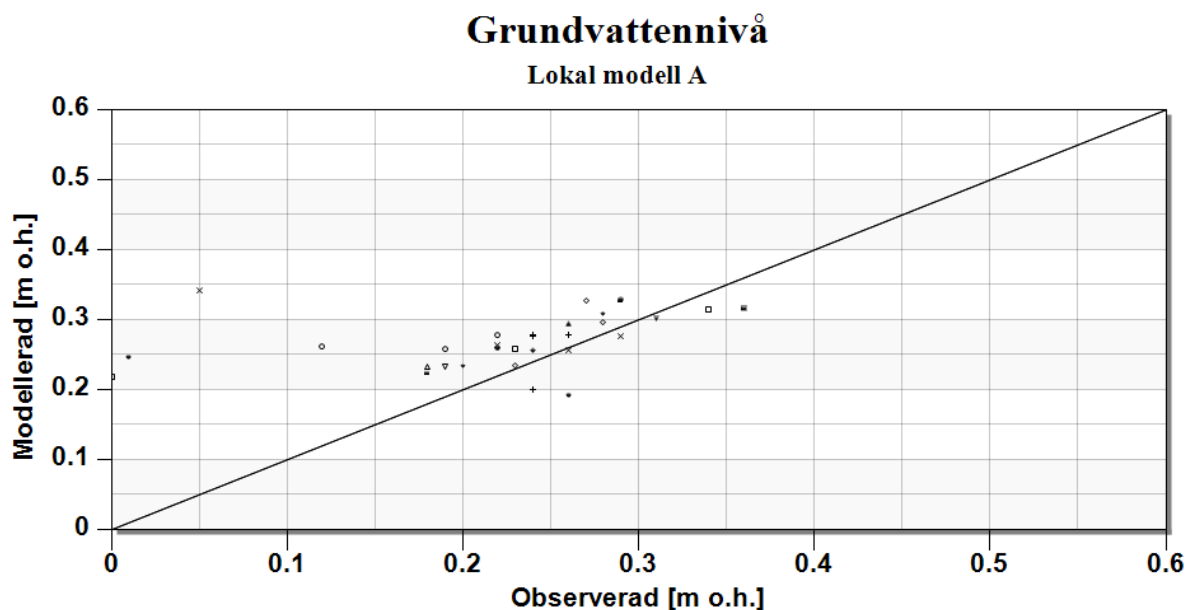
I figur 5.17 presenteras de kalibreringspunkter som föll innanför det lokala modellområdet för modell A. Figuren visar resultatet från flödessimuleringen utan brunnar. Grön färg indikerar att de modellerade värdena ligger inom kalibreringsintervallet på 25 cm. Gul färg innebär att felet är större än 25 cm men mindre än 200 %. Förhållandet mellan de modellerade och observerade värdena A presenteras i figur 5.18.



Figur 5.16: Modellerad grundvattennivå i flödessimulering utan brunnar i den lokala modellen A. Pilar visar flödesriktningen.



Figur 5.17: Kalibreringsstaplar för flödessimulering utan brunnar i modell A i de punkter där uppmätta värden på grundvattennivåerna finns tillgängliga. Röd ring markerar platsen för brandövningsplattan.



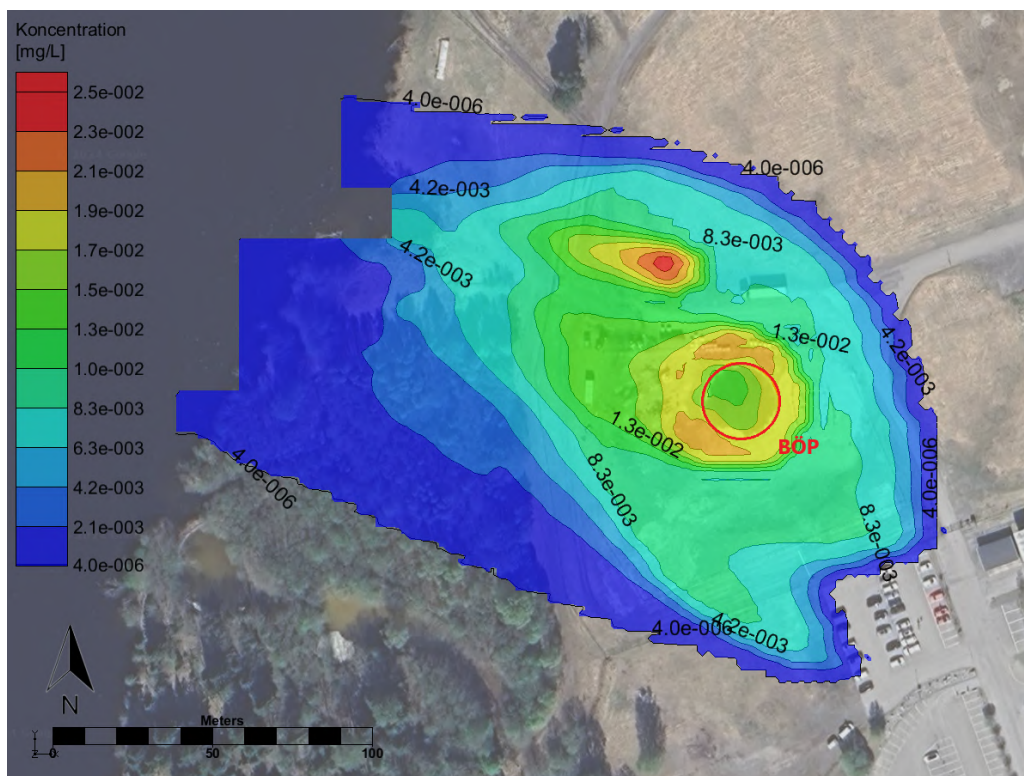
Figur 5.18: Den raka linjen som löper diagonalt visar de modellerade värdena på grundvattennivå i den lokala modellen A (utan brunnar). Denna kan jämföras mot uppmätta värden som representeras av punkter i figuren.

5.2.2 PFAS-simulering

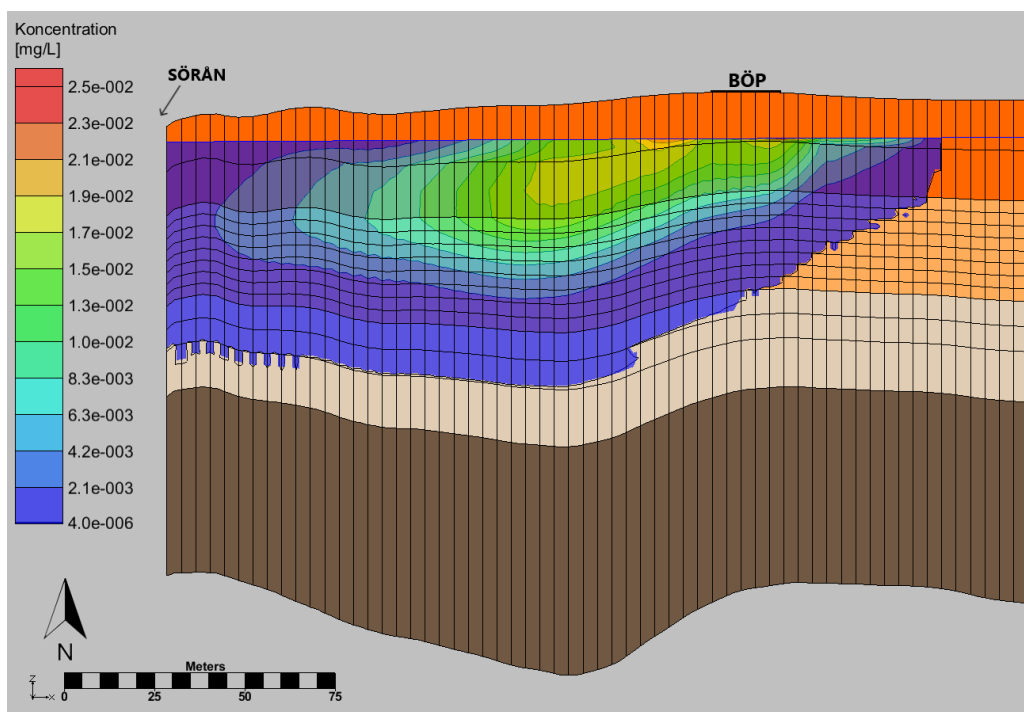
I samtliga lokala modeller återskapades den PFAS-plym som skapats i den regionala modellen, men med en koncentration anpassad efter PFOS (50 % av den totala PFAS-koncentrationen i den regionala modellen). Resultatet av detta presenteras i detta avsnitt med hjälp av bilder av den modellerade plymen i modell A. Dessa koncentrationer användes som startkoncentrationer i simuleringarna med brunnar i modell A. Plymens utseende och koncentration i de övriga lokala modellerna är snarlika, varpå de inte presenteras i rapporten.

I figur 5.19 visas plymens utsträckning i lager 1. Koncentrationerna visas i intervallet 4×10^{-6} – $2,5 \times 10^{-2}$ mg/L (4–25 000 ng/L). Plymens horisontella utsträckning i lager 3, 5, 7, 9, 11 och 13 visas i figur 5.21–5.26. Plymen sträcker sig i djupled ner till modellager 13, se figur 5.20.

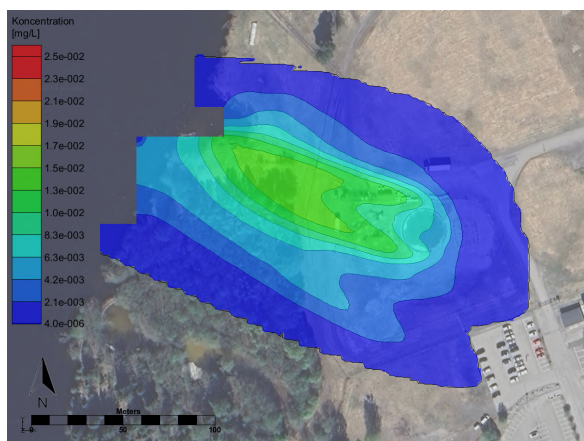
För att illustrera plymens utseende har ett urval av lager valts ut. I figur 5.21–5.26 visas plymens utbredning i lager 3, 5, 7, 9, 11 och 13. I lager 14 förekommer inga koncentrationer över 4×10^{-6} (4 ng/L). Koncentrationer och utbredning minskar med minskande djup.



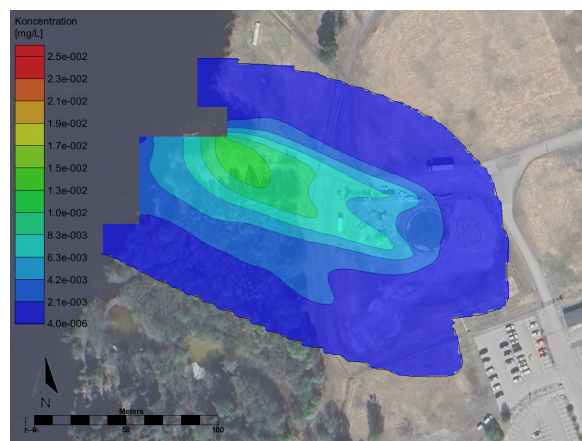
Figur 5.19: Koncentrationer och utsträckning av plymen i lager 1 i modell A. Figuren visar det område där koncentrationerna överstiger 4×10^{-6} mg/L (4 ng/L).



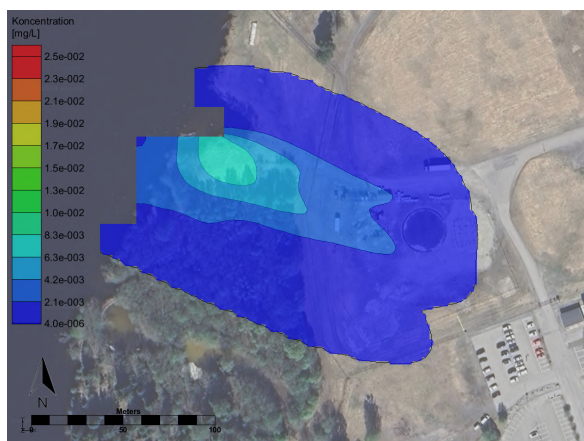
Figur 5.20: Modellerad plym från den södra sidan sett. Utsnittet är från mitten av plymen där utbredningen är som djupast och visar koncentrationer som överstiger 4×10^{-6} mg/L (4 ng/L)



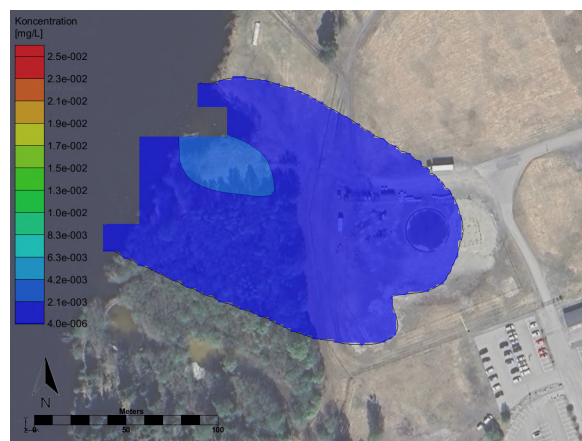
Figur 5.21: Koncentrationer och plymens utsträckning i lager 3.



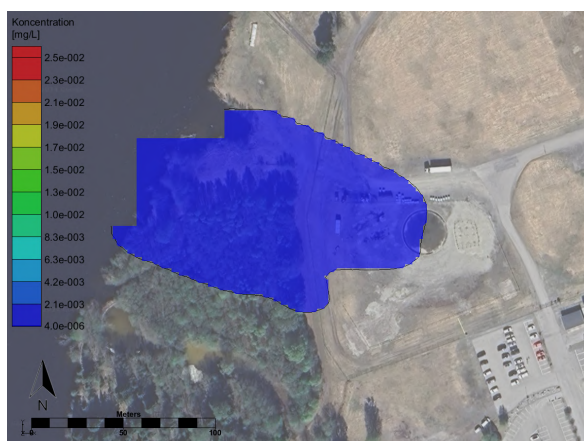
Figur 5.22: Koncentrationer och plymens utsträckning i lager 5.



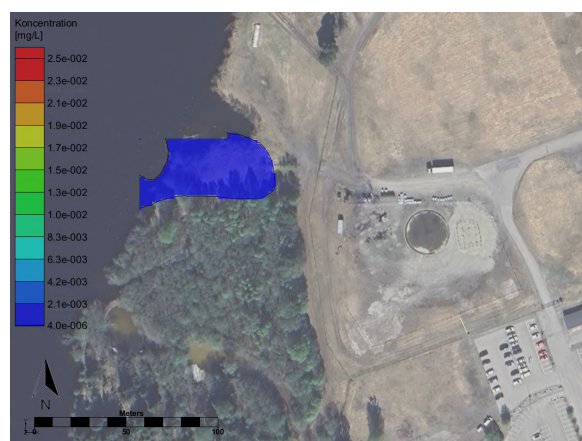
Figur 5.23: Koncentrationer och plymens utsträckning i lager 7.



Figur 5.24: Koncentrationer och plymens utsträckning i lager 9.



Figur 5.25: Koncentrationer och plymens utsträckning i lager 11.



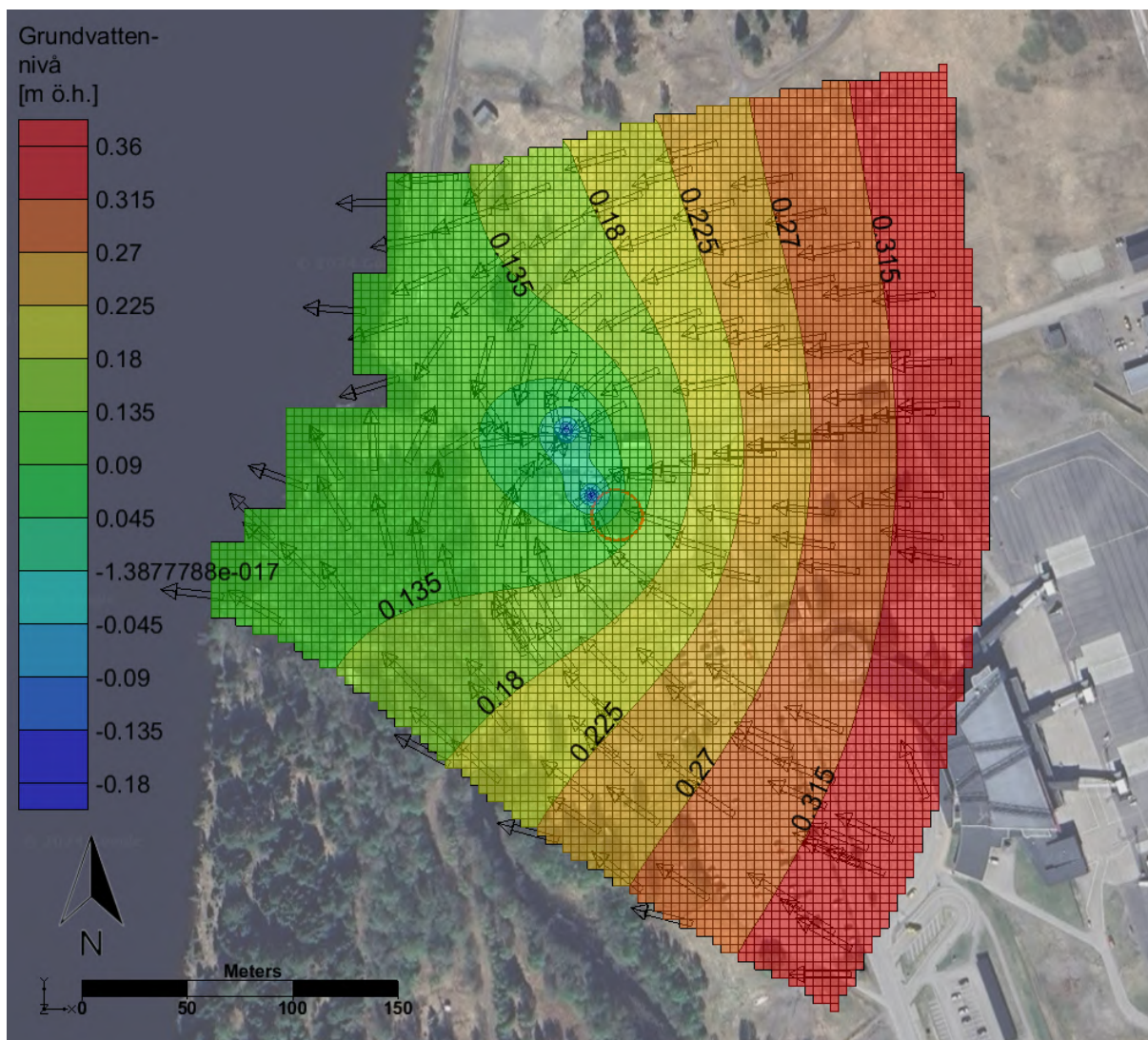
Figur 5.26: Koncentrationer och plymens utsträckning i lager 13.

5.2.3 Flödessimuleringar med brunnar

I varje lokal modell gjordes flödessimuleringar med brunnar. Resultatet av dessa presenteras i figur 5.27–5.30. I figurerna visas modellerade grundvattennivåer med brunnarna aktiva samt flödesriktning, vilket visas med pilar.

Modell A

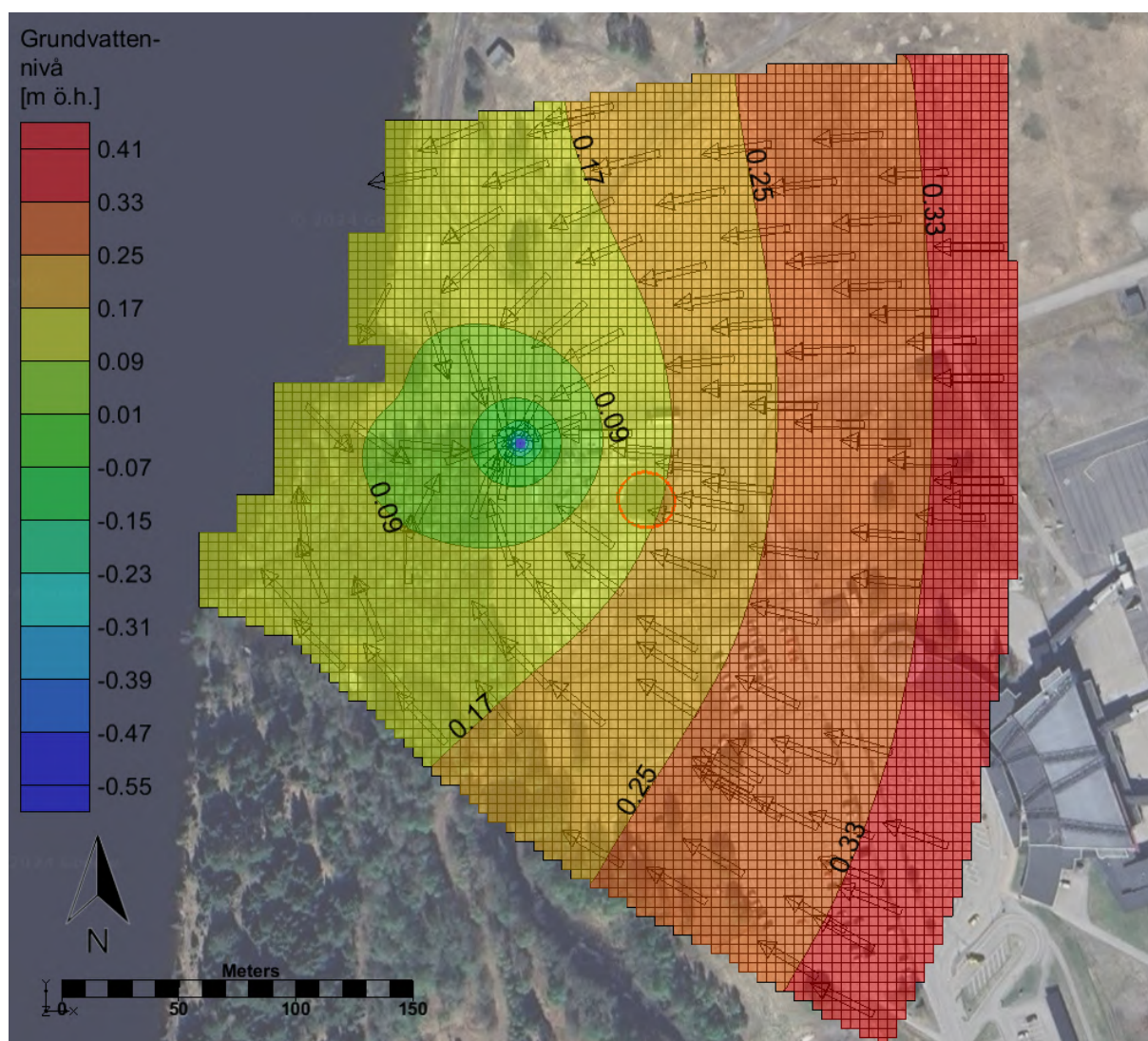
På den västra modellgränsen i modell A är flödet huvudsakligen riktat ut ur modellen, se figur 5.27 nedan.



Figur 5.27: Grundvattennivåer för modell A med pilar som visar flödesriktning. Brandplattan är markerad med en röd ring.

Modell B

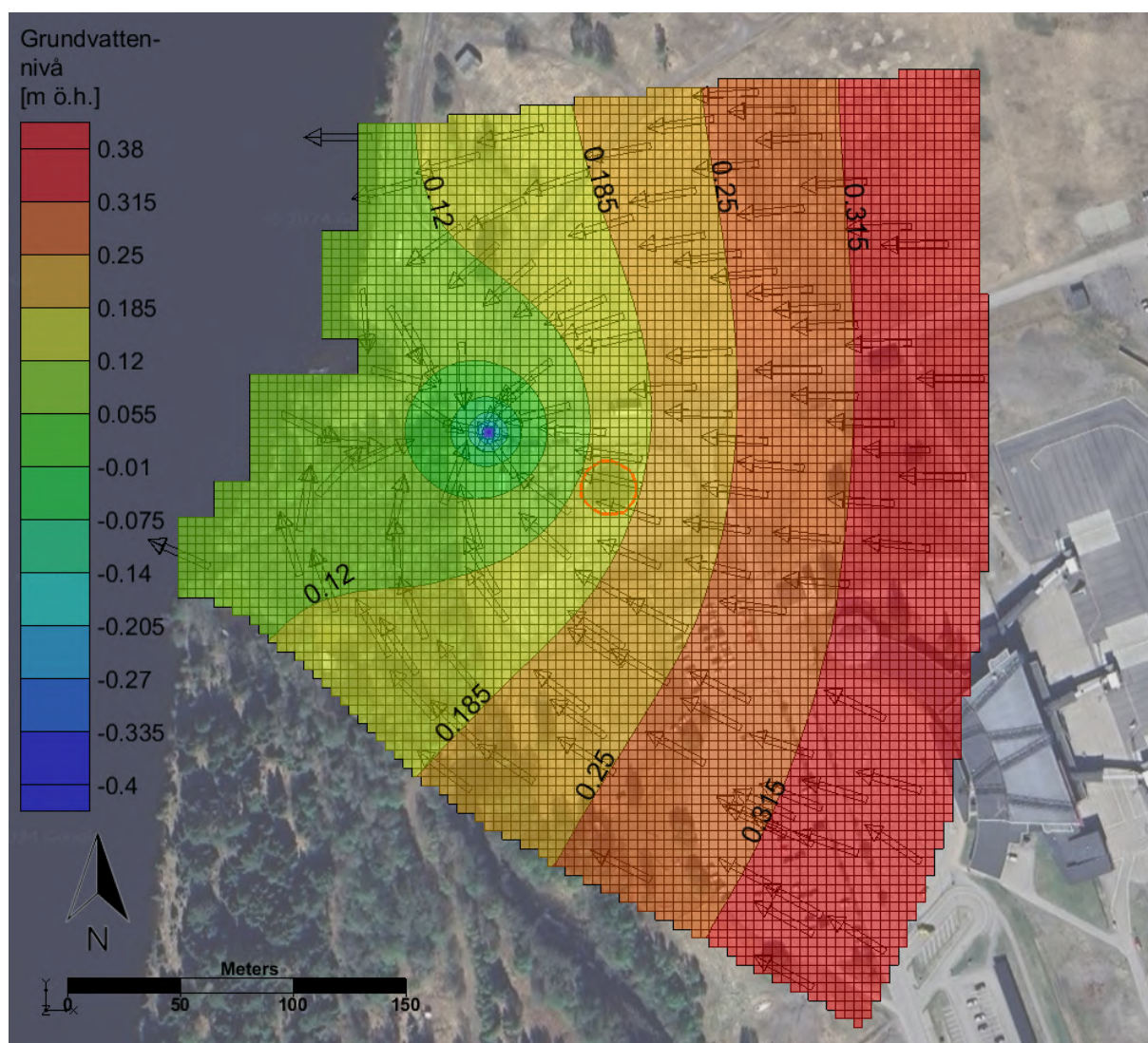
På den västra modellgränsen i modell B är flödet huvudsakligen riktat mot brunnarna, men i den norra och södra delen är flödet riktat ut ur modellen, se figur 5.28 nedan.



Figur 5.28: Grundvattennivåer för modell B med pilar som visar flödesriktning. Brandplattan är markerad med en röd ring.

Modell C

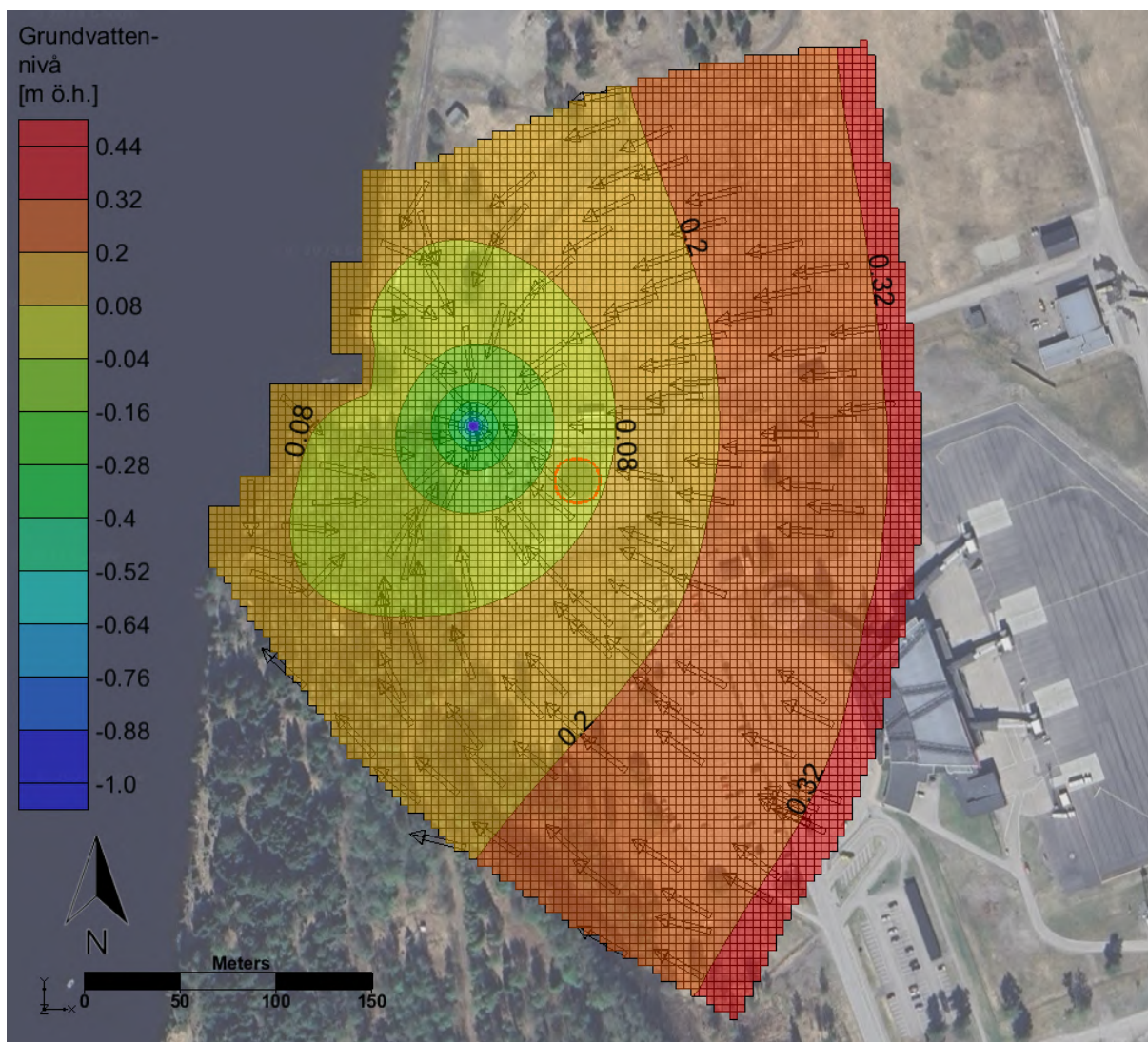
På den västra modellgränsen i modell C är flödet huvudsakligen riktat mot brunnarna, men i den norra och södra delen är flödet riktat ut ur modellen, se figur 5.29 nedan.



Figur 5.29: Grundvattennivåer för modell C med pilar som visar flödesriktning. Brandplattan är markerad med en röd ring.

Modell D

I modell D är allt flöde riktat mot brunnarna, se figur 5.29 nedan. Inget flöde sker ut över den västra modellgränsen.

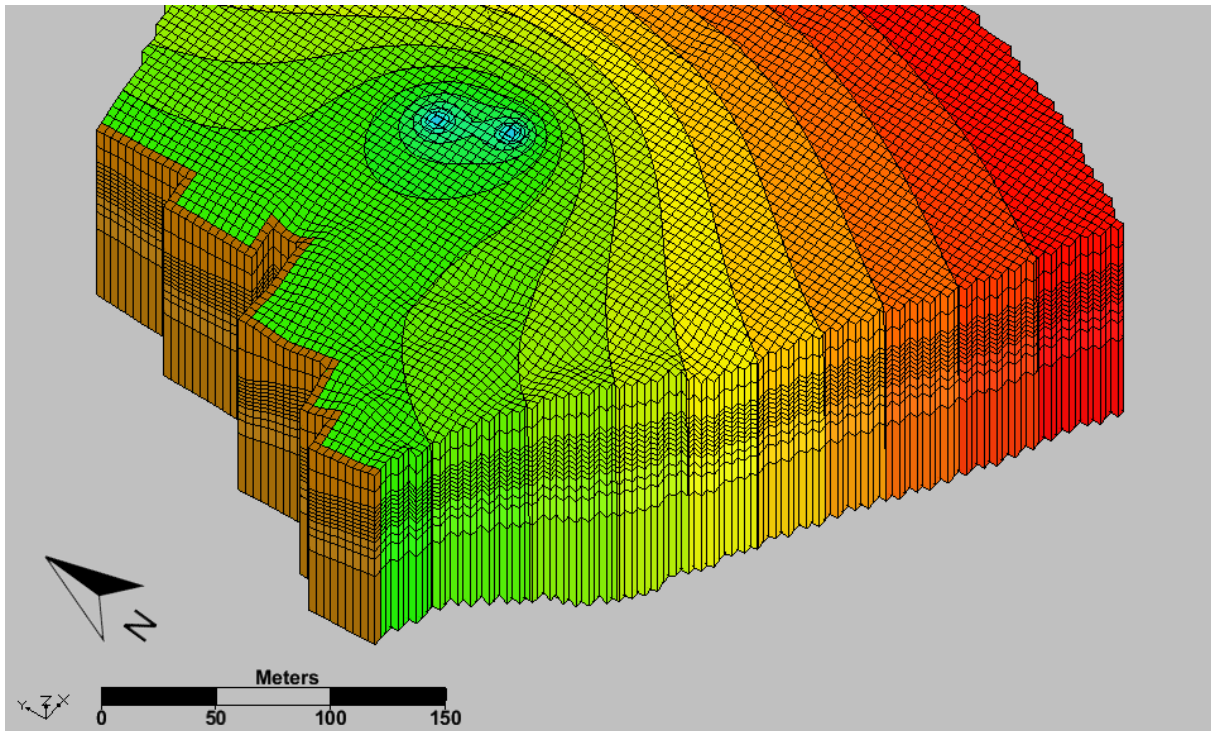


Figur 5.30: Grundvattennivåer för modell D med pilar som visar flödesriktning. Brandplattan är markerad med en röd ring.

5.2.4 Flöde över modellgräns

I tabell 5.1 presenteras flöde in och flöde ut [L/s] över den västra modellgränsen i de lokala modellerna A, B, C och D. In- och utflödet visas för flödessimuleringar utan respektive med extraktionsbrunnar. Modellgränsen valdes som de yttersta cellerna i alla lager, se figur 5.31. Rasternäten i modellerna skiljer sig åt, varpå antalet markerade celler är olika, se tabell 5.1.

Utan brunnar sker inget flöde in i modellen (0 L/s) för samtliga scenarier. I scenario A kommer flödet ut att minska från 1,49 L/s till 0,34 L/s när pumpningen sätts igång. Det kommer inte ske något flöde in över modellgränsen. I scenario B sker ett intag av vatten med 0,19 L/s. Flödet ut minskar från 1,47 (utan brunn) L/s till 0,17 L/s. Resultatet i C är i mycket likt det i B. I D är intaget av vatten över modellgränsen 1,32 L/s med brunnar och det sker inget flöde ut. Tabellen kan användas tillsammans med flödesriktningen och PFAS-plymens utseende för respektive brunnscenario för att analysera transport av PFAS ut ur modellen.



Figur 5.31: De celler som markerats i beräkningarna av flöde över den västra modellranden är markerade i brunt. Figuren visar modell A, men samma princip har applicerats för modell B, C och D.

Tabell 5.1: Flöde in och ut [L/s] över den västra modellgränsen utan och med brunnar. Antal markerade celler skiljer sig åt, vilket presenteras i den översta raden i tabellen. Flödet är det totala beräknade värdet för alla markerade celler.

	A	B	C	D
Antal celler i markerad rand	1148	1120	1134	1120
Flöde in (utan brunn) [L/s]	0,0	0,0	0,0	0,0
Flöde in (med brunn) [L/s]	0,0	0,19	0,18	1,32
Flöde ut (utan brunn) [L/s]	1,49	1,47	1,46	1,64
Flöde ut (med brunn) [L/s]	0,34	0,17	0,17	0,0

5.2.5 Massreduktion av PFAS per K_d -värde

Extraktionsbrunnarnas effekt har undersökts genom att undersöka massreduktion av PFAS i samtliga lokala modeller A, B, C och D. Figurerna i detta avsnitt visar procentuell återstod av total massa för varje K_d -värde. Detta görs genom att den totala massan [%] plottas över tid för alla brunnscenarier. Dessa jämförs mot massförändringen utan brunnar, det vill säga när all massa försvinner ut ur modellen över modellgränsen (rinner ut i Sörån). Detta värde är ett medelvärde av simuleringarna utan brunnar från de lokala modellerna A, B, C och D. I syfte att jämföra graferna undersöks vid vilken tidpunkt den totala massan når 10 % av den ursprungliga i alla scenarier och för alla K_d -värden.

$K_d = 10 \text{ L/kg}$

I figur 5.32 visas förändringen av total massa [%] för $K_d = 10 \text{ L/kg}$. Massan minskar snabbast med brunnscenario D och långsammast med scenario A. Linjerna för brunn B och brunn C är mycket nära varandra.

Endast för brunn D går att avläsa i grafen när massan når 10 %, vilket sker efter 50 år. Vid samma tidpunkt är den siffran 50 % för modell A, och i B och C omkring 25 %. Utan brunnar är ca 78 % av den ursprungliga massan kvar i modellen vid år 50.

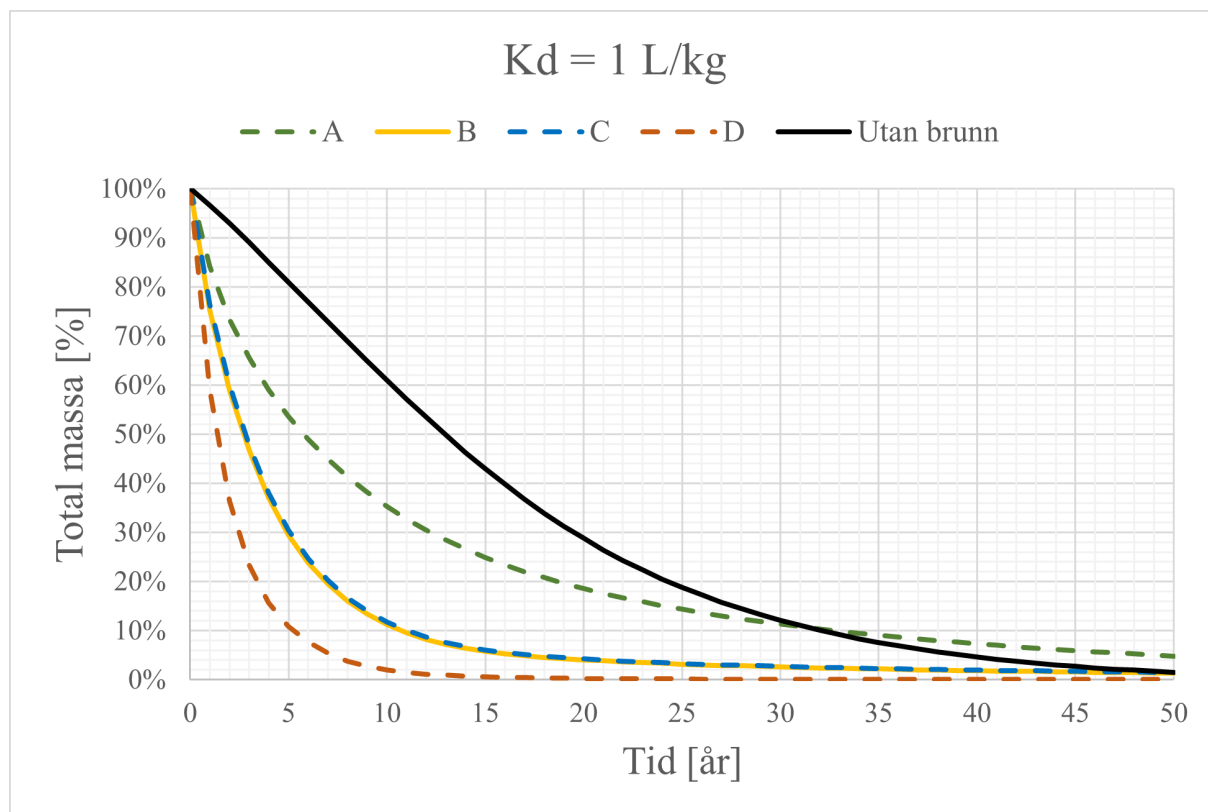


Figur 5.32: Total massa PFAS [%] i modellerna A, B, C och D över en tidsperiod på 50 år för $K_d = 10 \text{ L/kg}$.

$K_d = 1 \text{ L/kg}$

I figur 5.32 visas förändringen av total massa [%] för $K_d = 1 \text{ L/kg}$. Massan minskar snabbast med brunnscenariot D och långsammast med scenariot A.

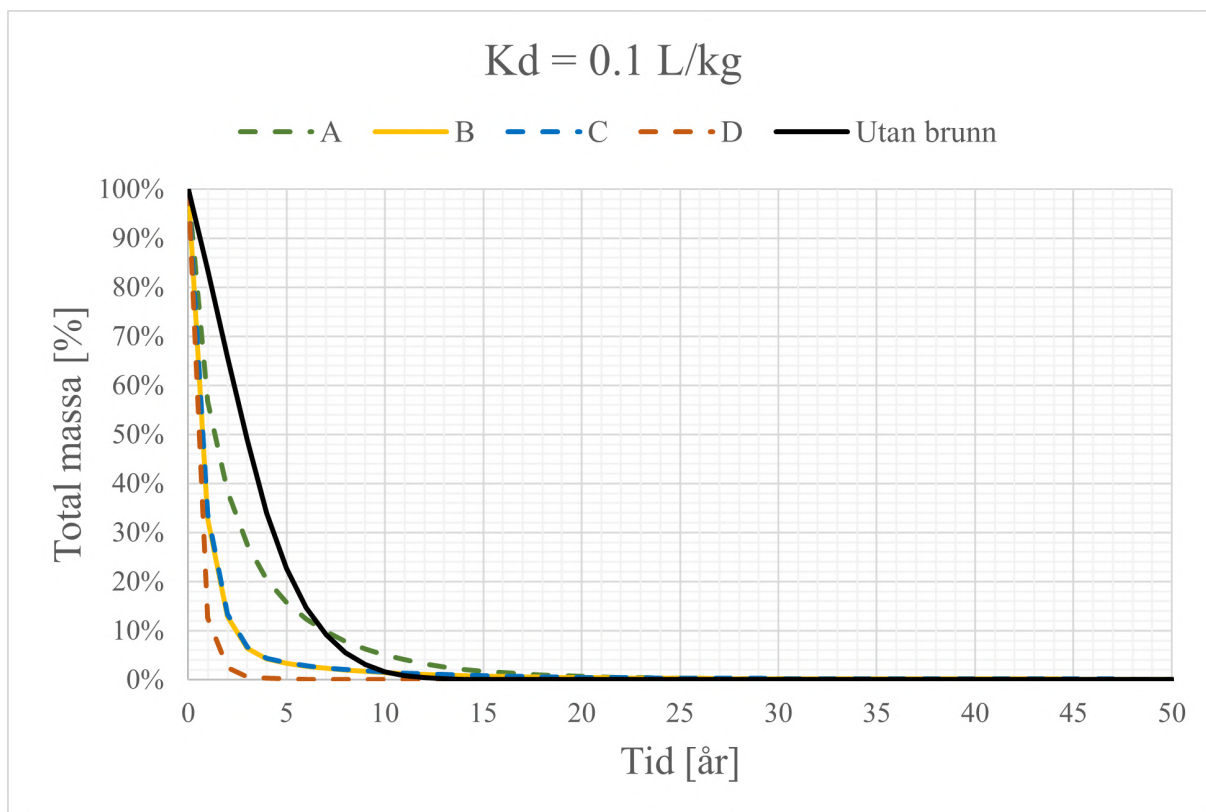
Utan brunnar når massan 10 % efter ca 33 år. Detsamma gäller för modell A. För scenariot B och C dröjer det omkring 12 år och för D endast 5 år.



Figur 5.33: Total massa PFAS [%] i modellerna A, B, C och D över en tidsperiod på 50 år för $K_d = 1 \text{ L/kg}$.

$K_d = 0,1 \text{ L/kg}$

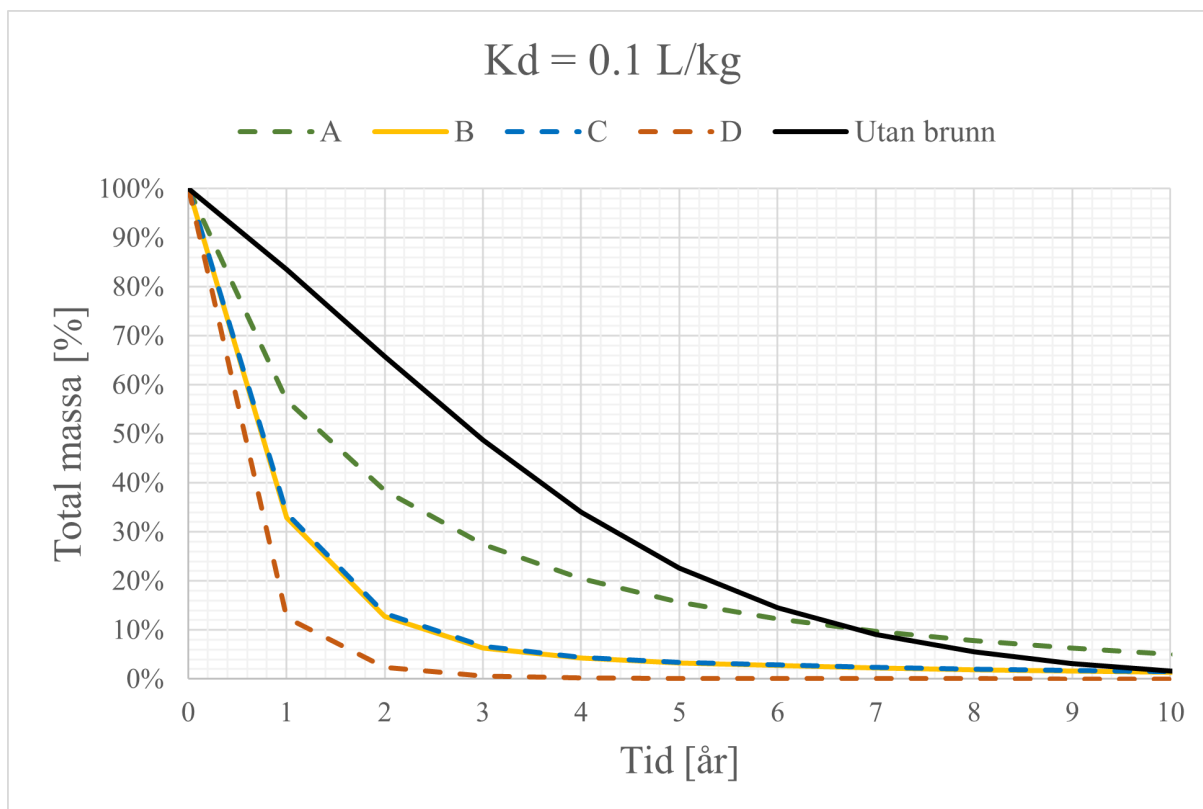
I figur 5.32 visas förändringen av total massa [%] för $K_d = 0,1 \text{ L/kg}$ över 50 år. Massminskningen är snabbare jämfört högre K_d -värden. En graf med kortare tidsaxel presenteras i figur 5.35 nedan.



Figur 5.34: Total massa PFAS [%] i modellerna A, B, C och D över en tidsperiod på 50 år för $K_d = 0,1 \text{ L/kg}$.

I figur 5.32 visas förändringen av total massa [%] för $K_d = 0,1 \text{ L/kg}$ över 10 år. Massan minskar snabbast med brunnscenario D och långsammast med scenario A. Linjerna för brunn B och brunn C är ligger mycket nära varandra, likt för de andra K_d -värdena.

Utan brunnar når massan 10 % efter knappt 7 år. Detsamma gäller för modell A. För scenario B och C dröjer det mellan 2–3 år och för D drygt 1 år.

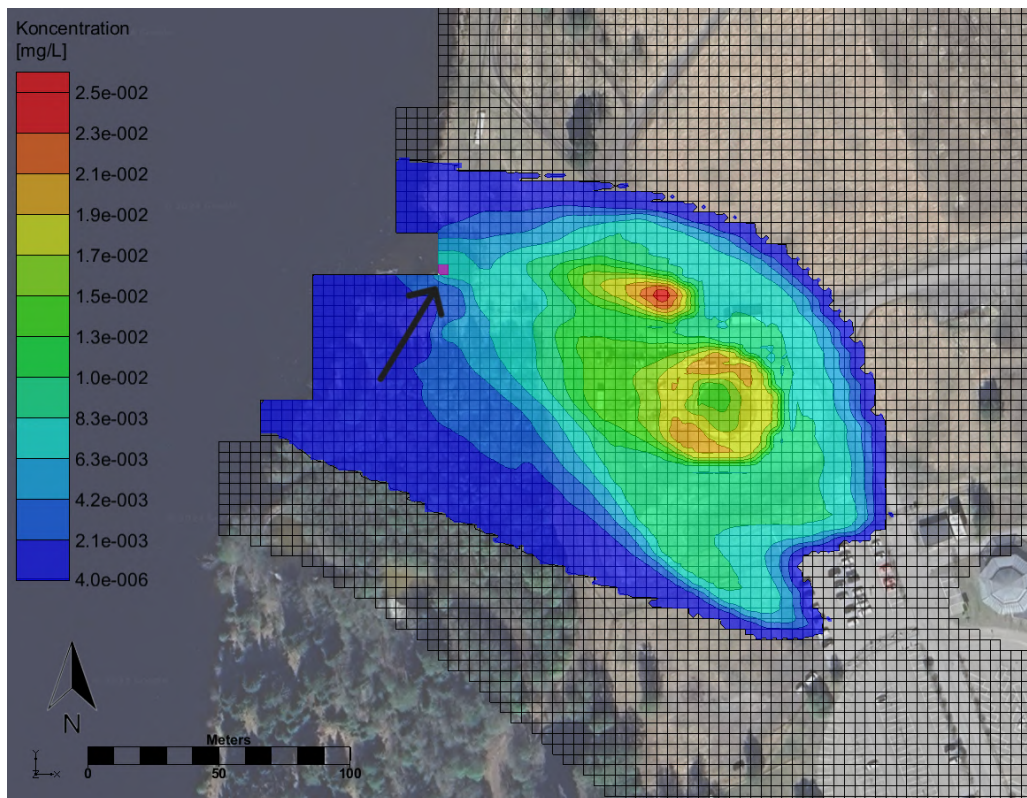


Figur 5.35: Total massa PFAS [%] i modellerna A, B, C och D över en tidsperiod på 10 år för $K_d = 0,1 \text{ L/kg}$.

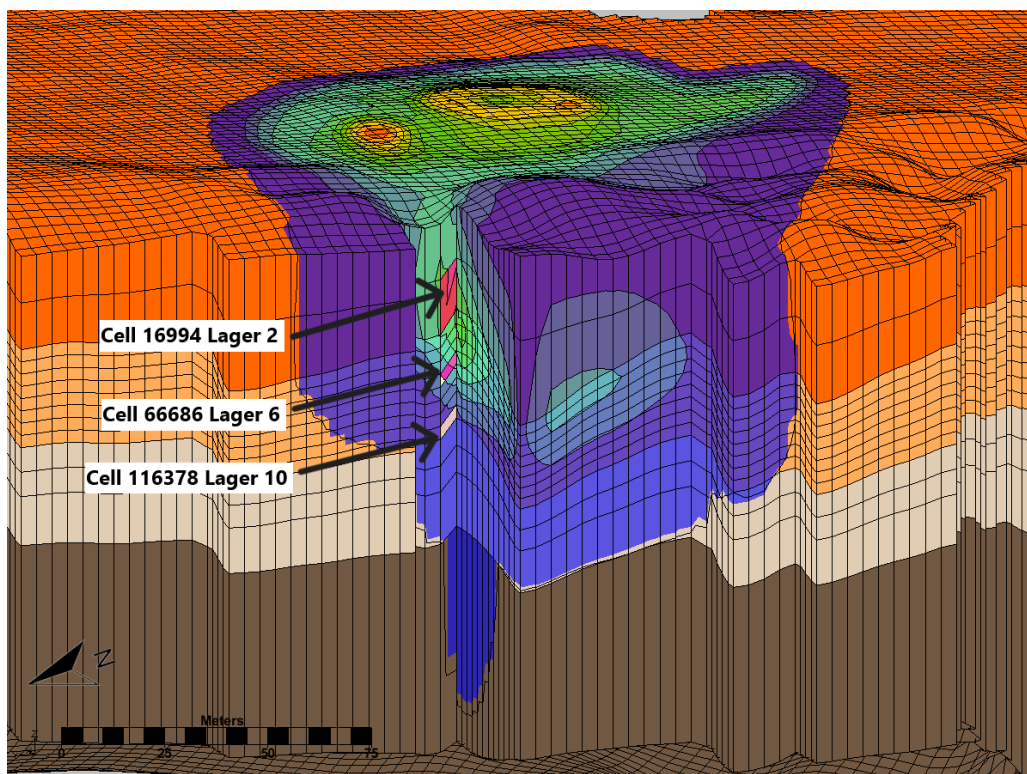
I det här avsnittet har massreduktionen i brunnscenarierna för varje separat K_d -värde undersökts. Samma sak har också undersökts omvänt, det vill säga för K_d -värdena i varje separat brunnscenario. I appendix avsnitt 9.5.2 återfinns figurer som illustrerar detta som total massa över tid uttryckt både i gram och procent. Dessa kan användas för att mer ingående undersöka skillnaderna mellan K_d -värden i ett och samma brunnscenario.

5.2.6 Koncentration på modellrand

I modell A undersöktes koncentrationen över tid på modellranden för $K_d = 1 \text{ L/kg}$. Detta gjordes dels för att kunna analysera plymens rörelse vid pumpning, dels för att undersöka storleken på koncentrationerna i grundvattnet intill Sörån. Detta gjordes i tre utvalda celler i lager 2, 6 respektive 10, se figur 5.37. I figuren visas plymen där den rinner ut i Sörån, med blick västerifrån. De valda cellerna är markerade med pilar. Cellernas position i rasternätet sett ovanifrån kan ses i figur 5.36.

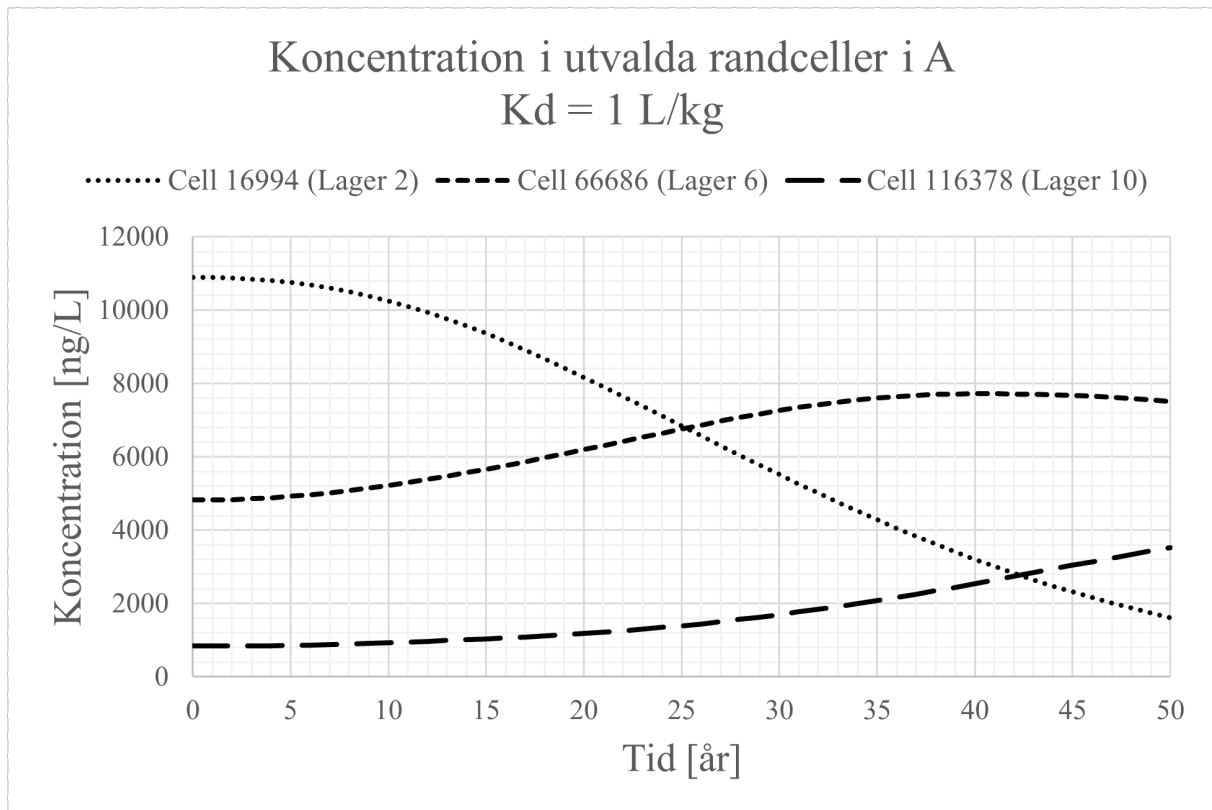


Figur 5.36: Pilen markerar var i rasternätet de utvalda cellerna finns, vilka användes för att undersöka koncentrationsförändringar över tid.



Figur 5.37: Utvalda celler i lager 2, 6 och 10 på den västra modellgränsen i modell A. som användes för att undersöka koncentrationsförändringar över tid.

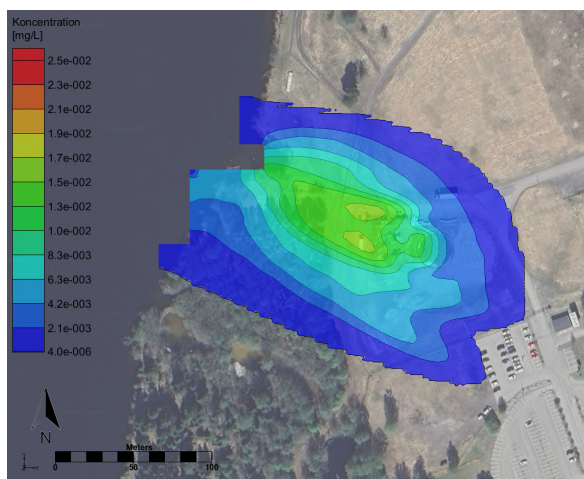
Koncentrationerna i dessa celler plottades över hela simuleringsperioden, se figur 5.38. Den högsta koncentrationen observeras i lager 2 i början av simuleringsperioden och uppgår till ca 11 000 ng/L. Den sjunker sedan under hela tidsperioden. I lager 6 ökar koncentrationen från ca 5000 ng/L till knappt 8000 ng/L efter 40 år. Sedan kan en svag minskning observeras under de resterande tio åren. I lager 10 ökar koncentrationen från knappt 1000 ng/L till ca 3500 ng/L efter 50 år.



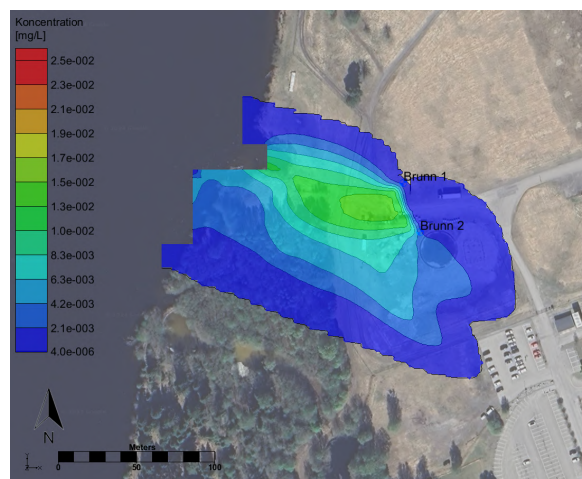
Figur 5.38: Koncentration PFAS [ng/L] i de utvalda cellerna på modellgränsen i modell A med brunnar.

Plymens rörelse

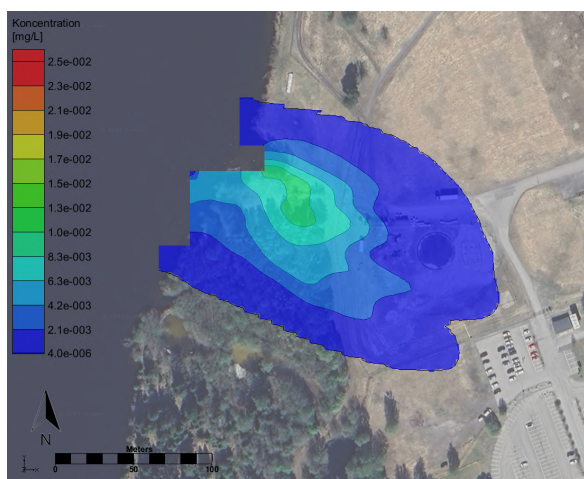
Figurer 5.39–5.44 visar en jämförelse av plymens utseende med eller utan grundvattenpumpning i olika tidssteg i den lokala modellen A. Till vänster visas koncentrationer av ämnet med K_d -värde 1 L/kg utan brunnar vid tid 5, 15 och 25 år. Till höger visas samma tider men från simuleringen med brunnar. Bilderna är från lager 2 i modellen.



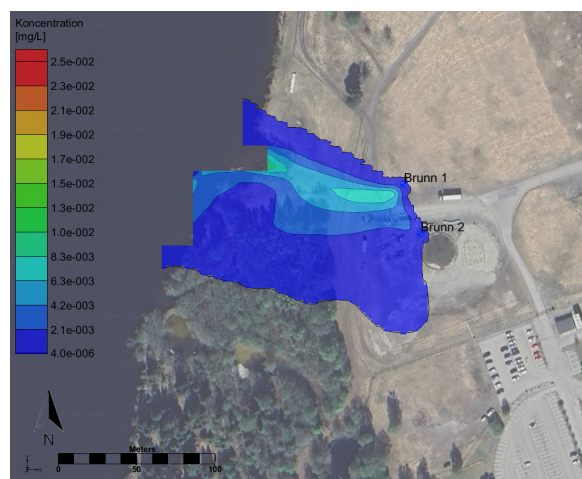
Figur 5.39: Koncentration PFAS [mg/L] med K_d -värde 1 L/kg i modell A. Figuren visar plymens utsträckning i lager 2 år 5 utan pumpning.



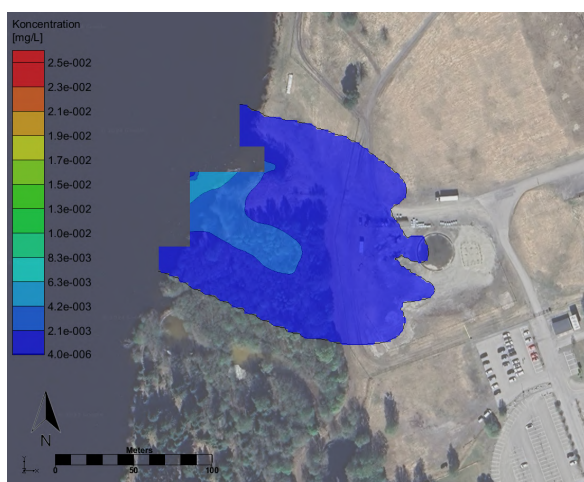
Figur 5.40: Koncentration PFAS [mg/L] med K_d -värde 1 L/kg i modell A. Figuren visar plymens utsträckning i lager 2 år 5 med pumpning.



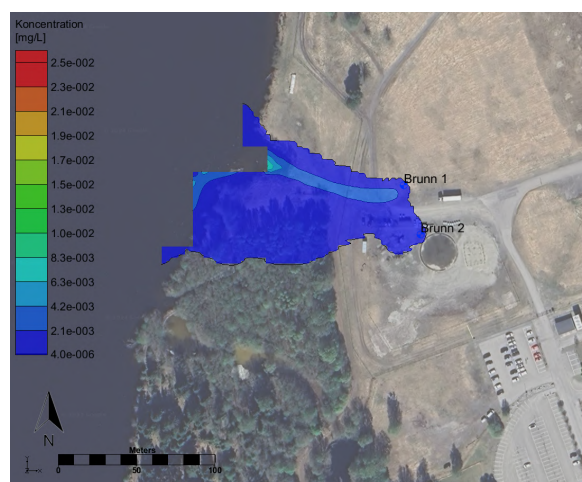
Figur 5.41: Koncentration PFAS [mg/L] med K_d -värde 1 L/kg i modell A. Figuren visar plymens utsträckning i lager 2 år 15 utan pumpning.



Figur 5.42: Koncentration PFAS [mg/L] med K_d -värde 1 L/kg i modell A. Figuren visar plymens utsträckning i lager 2 år 15 med pumpning.



Figur 5.43: Koncentration PFAS [mg/L] med K_d -värde 1 L/kg i modell A. Figuren visar plymens utsträckning i lager 2 år 25 utan pumpning.



Figur 5.44: Koncentration PFAS [mg/L] med K_d -värde 1 L/kg i modell A. Figuren visar plymens utsträckning i lager 2 år 25 med pumpning.

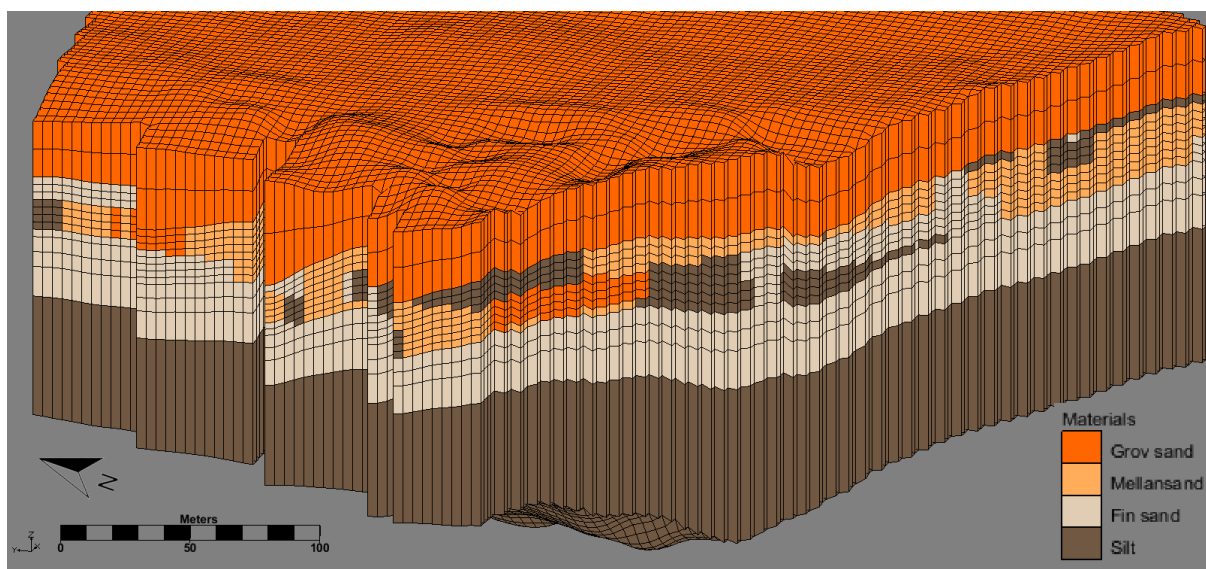
5.2.7 Geologiska heterogeniteter

I det här avsnittet presenterar grafer och figurer för jämförelse av homogena och heterogena marklager. Det görs inledningsvis genom presentera utseendet för de heterogena marklagren som genererades med T-PROGS för modell C2 och C3.

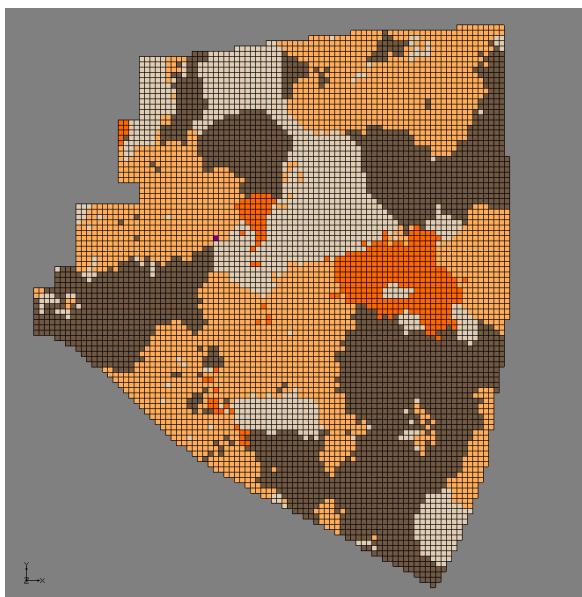
Sedan undersöks massreduktion för varje K_d -värde i modell C, C2 och C3. Det görs också en visuell jämförelse av skillnader i koncentration mellan homogena och heterogena marklager genom att jämföra modell C och C2. I anslutning till detta undersöks hur olika porositet påverkar koncentrationen PFAS i de heterogena marklagren genom att jämföra koncentrationsskillnader i modellerna C2 och C3.

Heterogena marklager

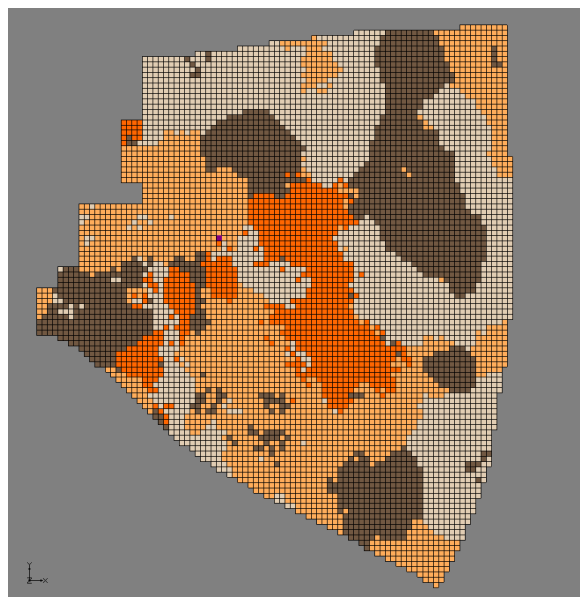
De heterogena marklagren skapades för lager 3–10. Figur 5.45 visar lagren från sidan. Lager 3, 5, 7 och 9 presenteras i figur 5.46–5.49. Mörk orange färg är definierat som grov sand, ljus orange som mellansand, beige som fin sand och silt visas i brunt.



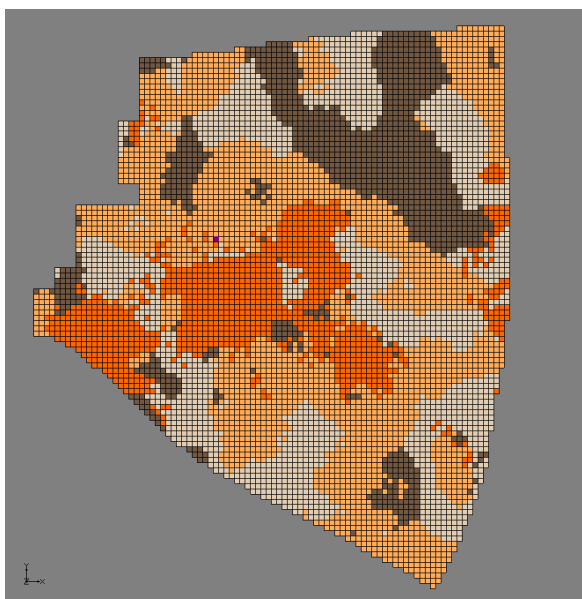
Figur 5.45: Modeller C2 och C3 med heterogeniteter sett från sidan. Heterogeniteter finns i lager 3–10. Mörk orange färg är definierat som grov sand, ljus orange som mellansand, beige som fin sand och silt visas i brunt.



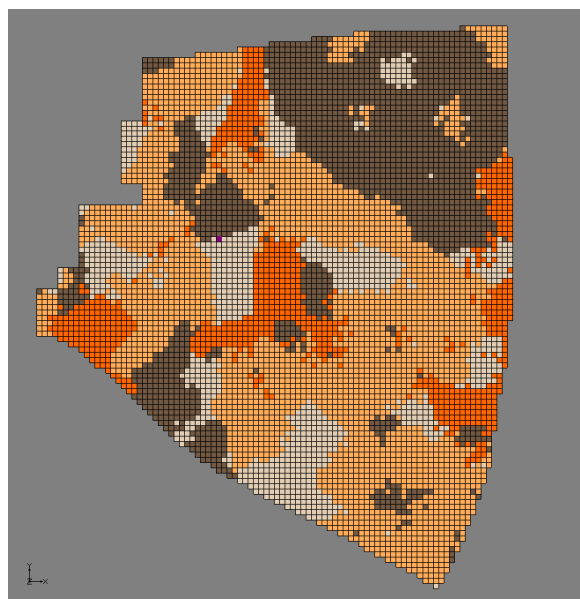
Figur 5.46: Lager 3 i modell C2 och C3. Färgerna representerar olika material: grov sand (mörk orange), mellansand (ljus orange), fin sand (beige) och silt (brun).



Figur 5.47: Lager 5 i modell C2 och C3. Färgerna representerar olika material: grov sand (mörk orange), mellansand (ljus orange), fin sand (beige) och silt (brun)



Figur 5.48: Lager 7 i modell C2 och C3. Färgerna representerar olika material: grov sand (mörk orange), mellansand (ljus orange), fin sand (beige) och silt (brun)



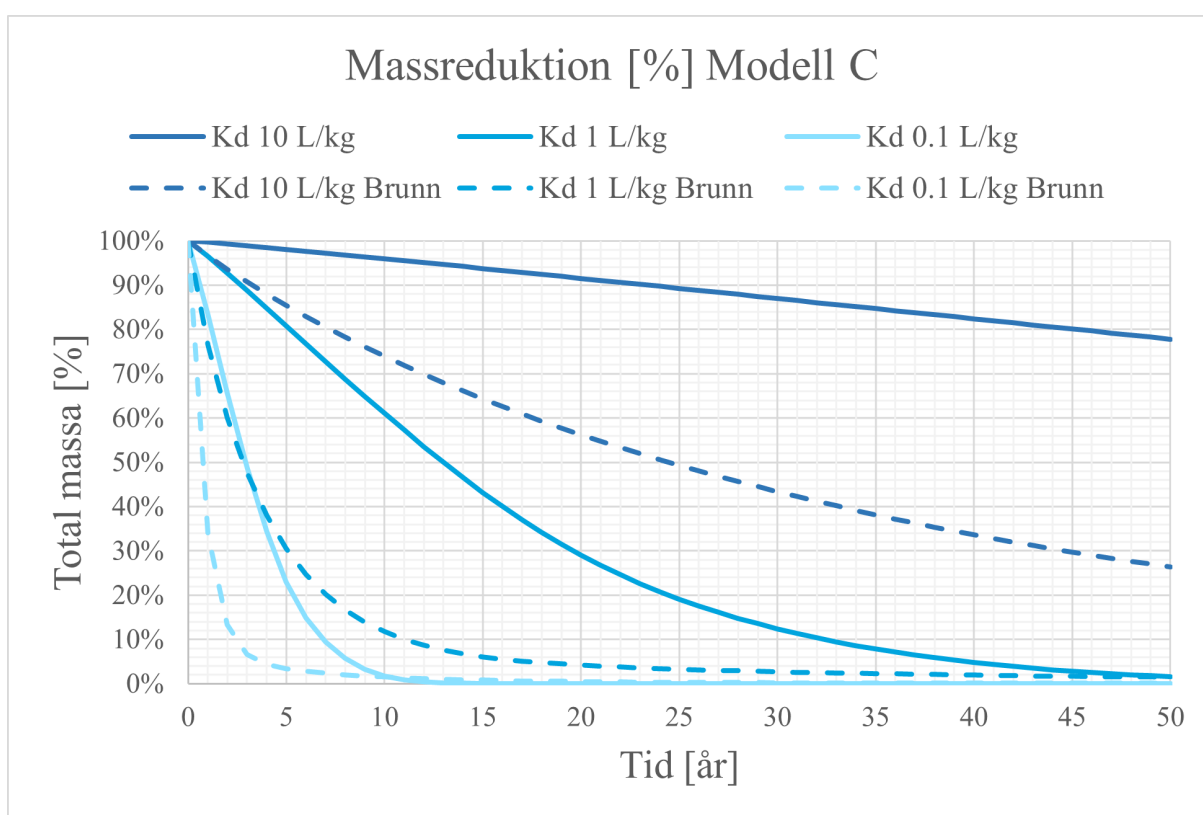
Figur 5.49: Lager 9 i modell C2 och C3. Färgerna representerar olika material: grov sand (mörk orange), mellansand (ljus orange), fin sand (beige) och silt (brun)

Massreduktion av PFAS

Nedan presenteras tre grafer gjorda för modell C, C2 och C3 (figur 5.50, 5.51 respektive 5.52). De illustrerar hur den totala massan PFAS i respektive modell med och utan brunnar förändras över tid. De kan användas för att jämföra hur snabbt PFAS försvinner ur modellen utan brunnar (heldragna linjer) och med en extraktionsbrunn med uttagshastigheten 2 L/s (streckade linjer). Notera att utan brunnar beror all massreduktion på att PFAS lämnar modellen över modellgränsen (det vill säga rinner ut i Sörån).

Modell C, C2 och C3 jämförs genom en visuell avläsning av massreduktionen för varje K_d -värde vid samma tidpunkt i de olika figurerna. $K_d = 10$ L/kg undersöks vid 25 år, $K_d = 1$ L/kg vid 10 år och $K_d = 0,1$ L/kg vid 5 år.

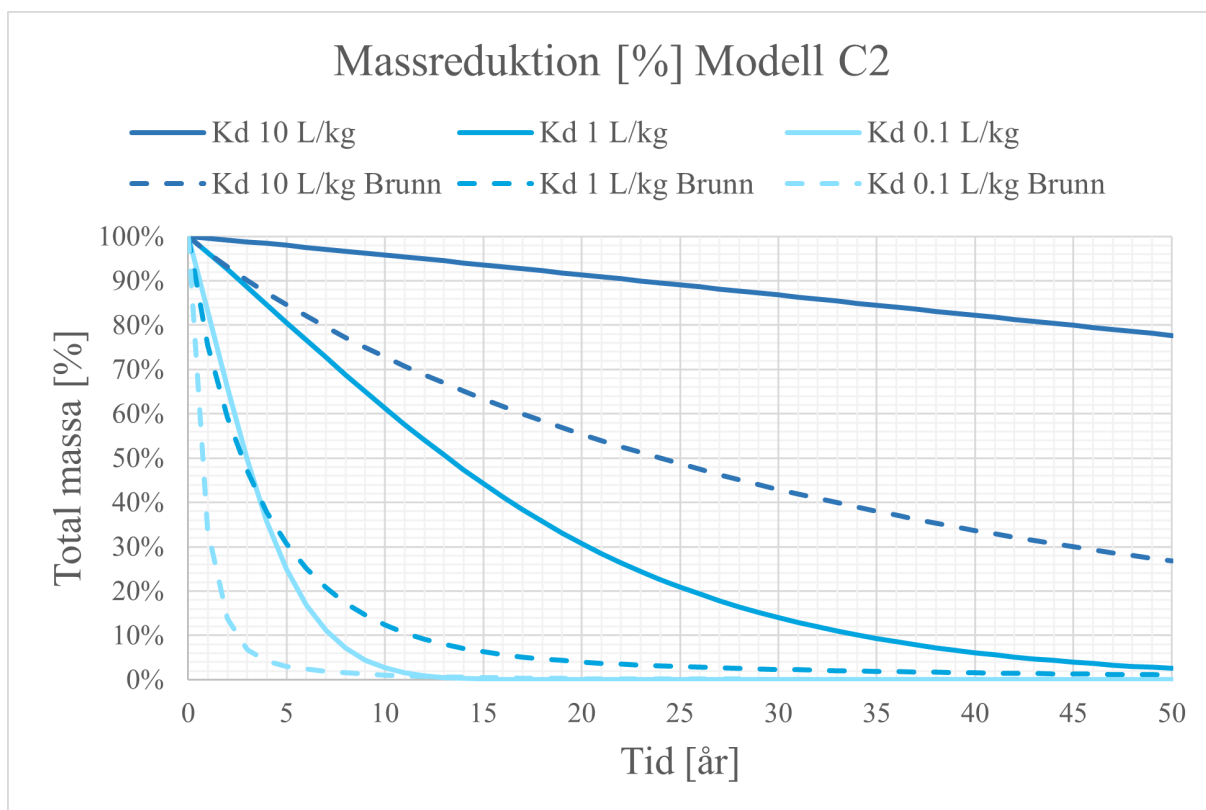
I figur 5.50 nedan presenteras resultatet från modell C med homogena marklager.



Figur 5.50: Förändring av total massa PFAS [%] i modell C med homogena marklager över simulerings-tiden 50 år för $K_d = 10$ L/kg (mörkblå), $K_d = 1$ L/kg (mellanblå) och $K_d = 0,1$ L/kg (ljusblå). Heldragna linjer representerar simulering utan brunnar, streckade linjer med brunnar.

- För $K_d = 10$ L/kg gäller att ca 90 % av massan är kvar i systemet efter 25 år utan pumpning. Med brunnar är det värdet istället ca 48 %.
- För $K_d = 1$ L/kg gäller att ca 60 % av massan är kvar i systemet efter 10 år utan pumpning. Med brunnar är det värdet ca 12 %.
- För $K_d = 0,1$ L/kg gäller att ca 22 % av massan är kvar i systemet efter 5 år utan pumpning. Med brunnar är det värdet ca 4 %.

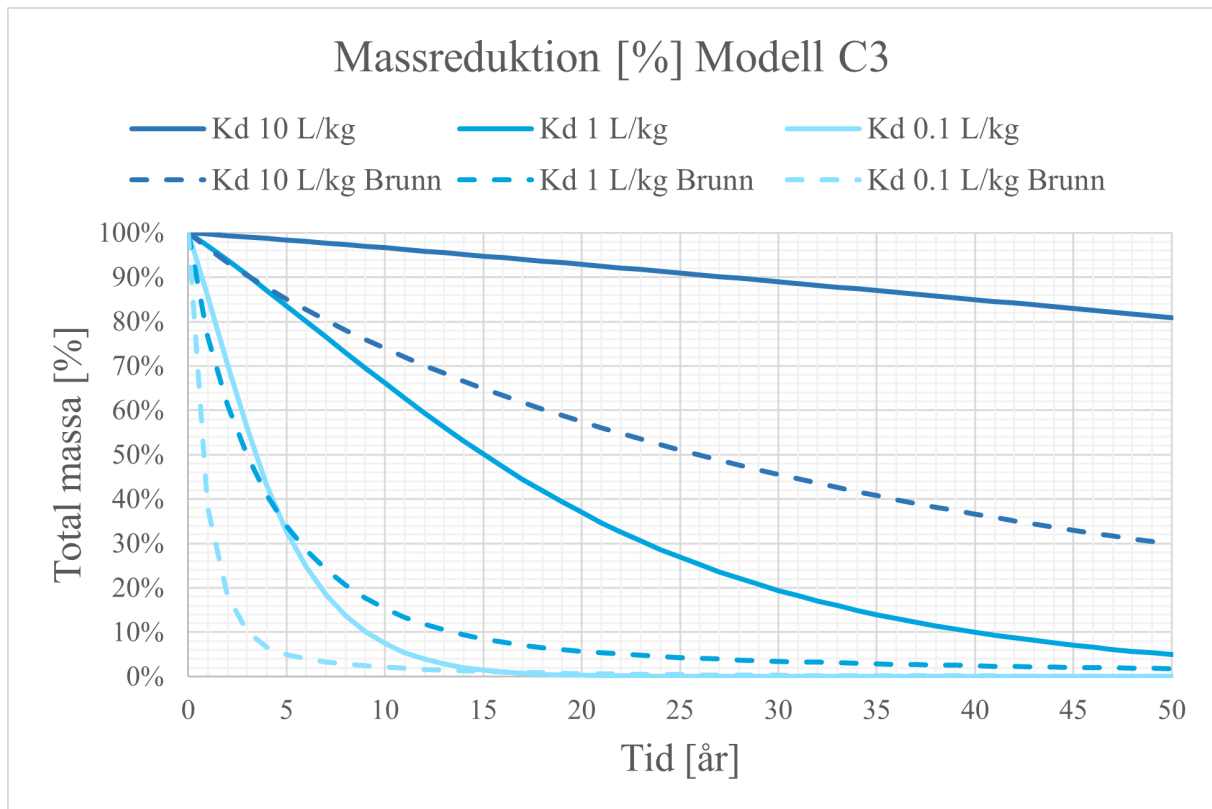
I figur 5.51 nedan presenteras resultatet från modell C2 med heterogena marklager med material med samma porositet som i modell C.



Figur 5.51: Förändring av total massa PFAS [%] i modell C2 med heterogena marklager över simulerings tiden 50 år. Porositeten är olika i de olika materialen. Heldragna linjer representerar simulering utan brunnar, streckade linjer med brunnar för $K_d = 10$ L/kg (mörkblå), $K_d = 1$ L/kg (mellanblå) och $K_d = 0,1$ L/kg (ljusblå).

- För $K_d = 10$ L/kg gäller att ca 90 % av massan är kvar i systemet efter 25 år utan pumpning. Med brunnar är det värdet istället ca 48 %.
- För $K_d = 1$ L/kg gäller att ca 62 % av massan är kvar i systemet efter 10 år utan pumpning. Med brunnar är det värdet ca 12 %.
- För $K_d = 0,1$ L/kg gäller att ca 25 % av massan är kvar i systemet efter 5 år utan pumpning. Med brunnar är det värdet ca 4 %.

I figur 5.52 nedan presenteras resultatet från modell C3 med heterogena marklager med material med porositet 30 %.



Figur 5.52: Förändring av total massa PFAS [%] i modell C3 med heterogena marklager under 50 år. Porositeten är 30 % i alla material. Heldragna linjer representerar simulering utan brunnar, streckade linjer med brunnar för $K_d = 10$ L/kg (mörkblå), $K_d = 1$ L/kg (mellanblå) och $K_d = 0,1$ L/kg (ljusblå).

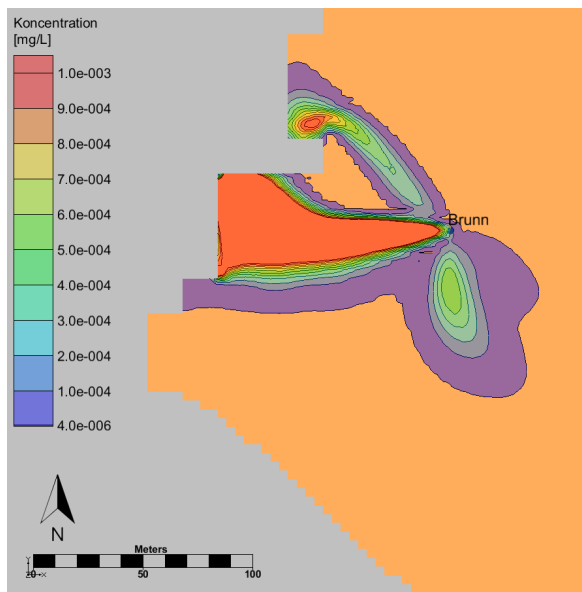
- För $K_d = 10$ L/kg gäller att ca 92 % av massan är kvar i systemet efter 25 år utan pumpning. Med brunnar är det värdet istället ca 52 %.
- För $K_d = 1$ L/kg gäller att ca 66 % av massan är kvar i systemet efter 10 år utan pumpning. Med brunnar är det värdet ca 15 %.
- För $K_d = 0,1$ L/kg gäller att ca 32 % av massan är kvar i systemet efter 5 år utan pumpning. Med brunnar är det värdet ca 5 %.

Vid jämförelse av figur 5.50 med figur 5.51 och 5.52 framkommer att massreduktionen i de olika modellerna inte skiljer sig särskilt mycket åt. Tiden det tar att reducera massan till en viss procent för respektive ämne är ungefär samma i alla modeller, om än något längre i modell C3.

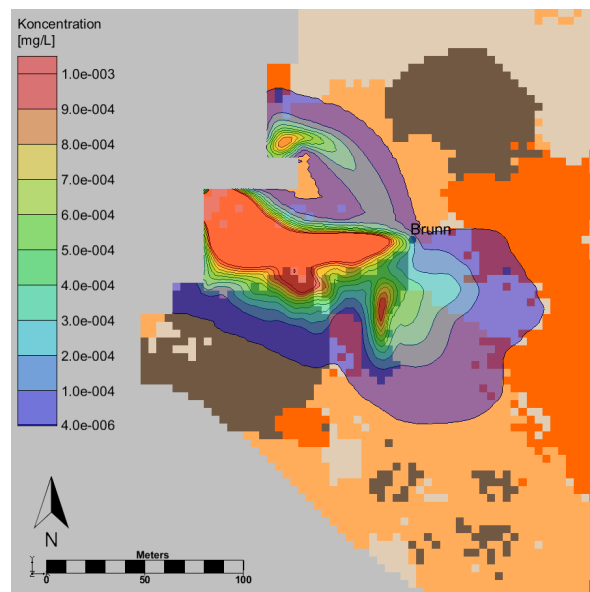
Jämförelse av koncentration

I detta avsnitt undersökt hur koncentrationen av PFAS i grundvattnet i marklagren påverkas av heterogeniteter. I figur 5.53 visas lager 4 i modell C med homogena marklager. Figuren visar koncentrationer av PFAS vid tiden 20 år efter påbörjad pumpning. Dessa kan jämföras mot koncentrationerna i samma lager vid samma tid i den heterogena modellen C2, se figur 5.54. Det är möjligt att se att området där plymen sträcker ut sig är större, samt att koncentrationen är högre i silten (brun färg) i den heterogena modellen.

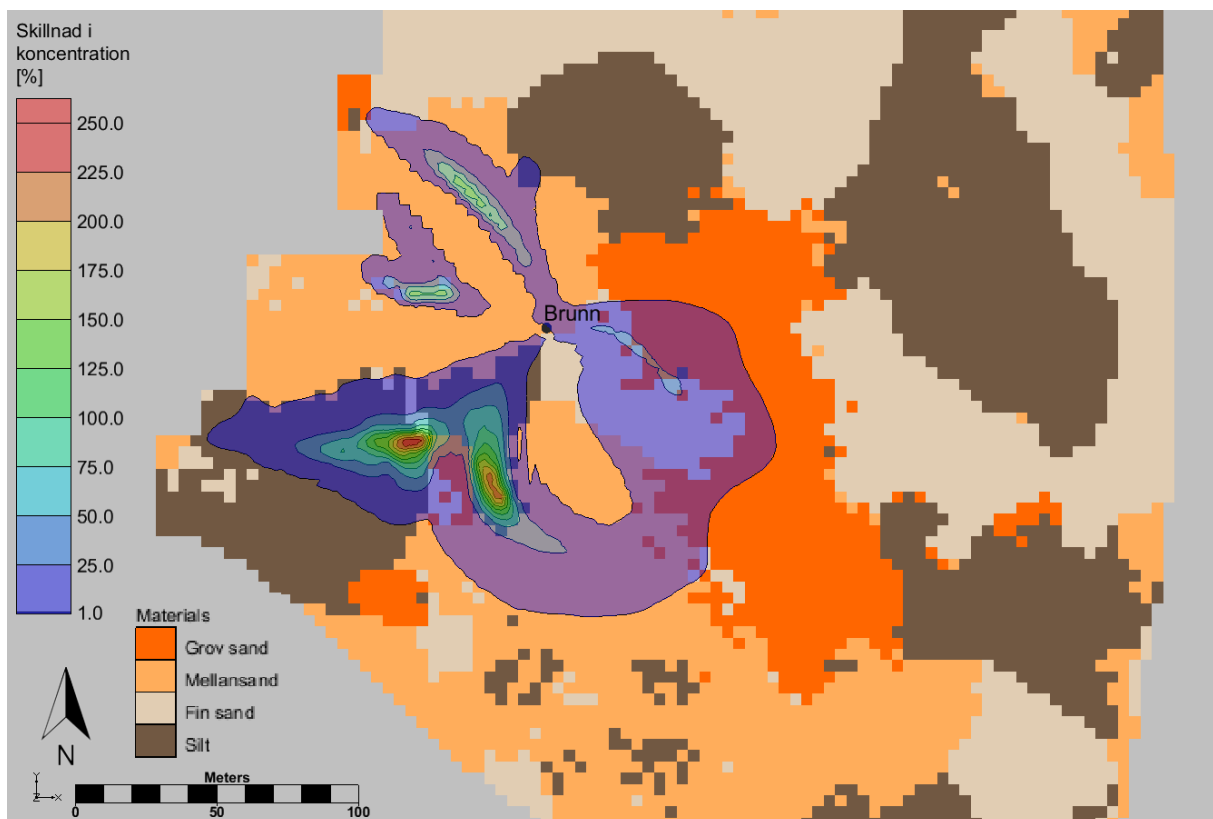
Vidare så undersöks den procentuella skillnaden i koncentration mellan den homogena och den heterogena modellen. I figur 5.55 illustreras procentuell skillnad mellan modell C och C2 i marklager 4 vid tid 20 år. Det går det att avläsa att skillnaden uppgår till 250 % i silten.



Figur 5.53: Koncentrationer PFAS [mg/L] i lager 4 i modell C vid tid 20 år. I detta lager är materialet mellansand, vilket representeras av bakgrundsfärgen ljus orange.

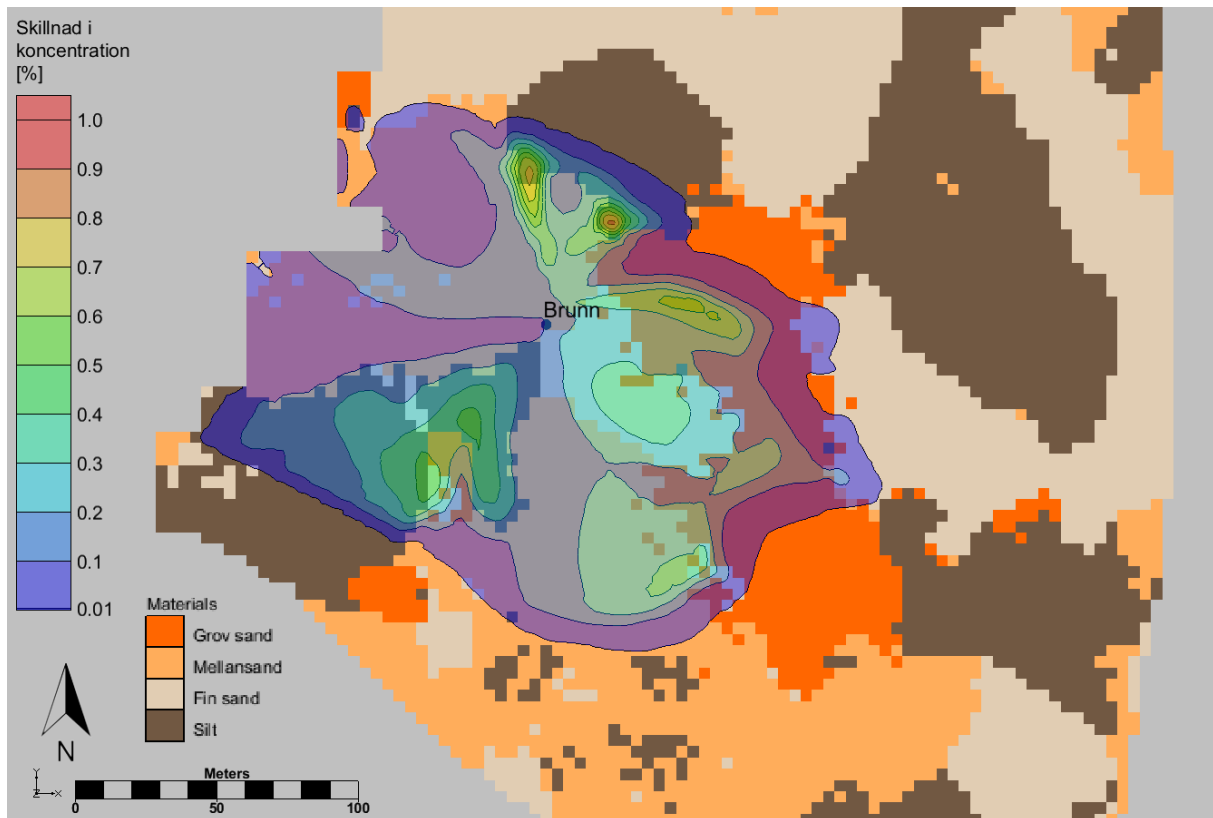


Figur 5.54: Koncentrationer PFAS [mg/L] i lager 4 i modell C2 vid tid 20 år. Materialen representeras av olika färger: grov sand (mörk orange), mellansand (ljus orange), fin sand (beige) och silt (brun).



Figur 5.55: Procentuell skillnad i koncentration mellan modell C och C2 i tidssteg 20 i lager 4. Materialen representeras av olika färger: grov sand (mörk orange), mellansand (ljus orange), fin sand (beige) och silt (brun).

För att jämföra koncentrationsskillnader mellan de två heterogena modellerna C2 och C3, med varierande porositet respektive samma porositet i alla material, har den procentuella koncentrationsskillnaden undersökts, se figur 5.56. Figuren visar lager 4 vid tid 20. Koncentrationsskillnaderna är i intervallet 0–1 %. De största skillnaderna finns i silt norr om brunnen och uppgår till 1 %. Söder om brunnen är skillnaderna i silten lägre, ca 0,2–0,5 %. Det går också att upptäcka koncentrationsskillnader i detta intervall även för grov sand, mellansand och fin sand.



Figur 5.56: Procentuell skillnad i koncentration mellan modell C2 och C3 i tidssteg 20 i lager 4. Materialen representeras av olika färger: grov sand (mörk orange), mellansand (ljus orange), fin sand (beige) och silt (brun).

6 DISKUSSION

6.1 BRUNNARNAS EFFEKT

I detta avsnitt diskuteras effekten av brunnarna i de olika scenarierna baserat på resultaten av undersökningen. Olika aspekter av hur brunnarna påverkar flöden av vatten och transport av PFAS diskuteras.

6.1.1 Grundvattenavsänkning

Under förutsättning att renat grundvatten inte pumpas ner i akviferen igen beräknades grundvattenavsänkningen för samtliga brunnscenarier i GMS. Detta gjordes i den regionala modellen för att kunna se brunnarnas hela påverkansområde och inte begränsas av de lokala modellgränserna. Dock begränsas beräkningarna av den regionala modellgränsen och de randvillkor som är definierade där, vilket går att se av den ovala formen på påverkansområdet, samt att brunnen befinner sig i den västra kanten av ovalen (istället för i mitten).

Vid jämförelse av grundvattenavsänkningen för de olika brunnarna kan man se att den skiljer sig åt mellan scenarierna. Störst påverkansområde är för brunnscenario D (figur 5.15), följt av A (figur 5.9). Avsänkningen i B och C är i princip lika (figur 5.11 respektive 5.13). Av detta resultat kan man dra slutsatserna att fler brunnar och högre pumpflöde innebär ett större område där grundvattennivån sjunker. Det är viktigt att ta hänsyn till hur grundvattennivån påverkas av pumpning vid utformning av åtgärd, och hur en avsänkning av denna kan påverka byggnader och anläggningar i området. Detta för att kunna förhindra oönskade effekter, till exempel sättningar. En sådan analys ingår dock inte i detta arbete, då det faller utanför arbetets syfte och mål.

6.1.2 Flöde över modellgräns, flödesriktning och masstransport

In- och utflöden över modellgränsen analyserades tillsammans med flödesriktningar för att dra slutsatser om brunnarnas påverkan hur PFAS transporteras i modellerna. Flödena över den västra modellgränsen undersöktes, vilket redovisas i tabell 5.1. Värdena anger flödet i alla yttre celler längs hela den västra modellgränsen. I frånvaro av brunnar flödar grundvattnet från öst till väst i alla modeller, vilket innebär att vatten och PFAS transporteras till Sörån. När brunnarna aktiveras förändras dock förhållandet mellan in- och utflöde över modellgränsen.

I modell A sker inget inflöde av vatten från Sörån vid pumpning, men utflödet minskar med cirka 77 % jämfört med utan pumpning. I scenarierna B och C kommer det däremot att ske ett intag av vatten, då vi ser en ökning från 0 till ca 0,2 L/s. Utflödet minskar med cirka 88 % i dessa scenarier. Resultaten indikerar att brunnarnas placering påverkar inflödet från Sörån, där närmare placeringar ökar intaget av vatten. Filterdjupet visade sig däremot inte påverka vattenintaget. För att bättre analysera hur antalet brunnar påverkar vattenintaget från Sörån skulle det ha krävts att en av brunnarna i scenario A placerats på samma plats som i de övriga scenarierna, eller att brunnen i B, C och D varit placerad i närheten av brunnarna i A. Därför är det inte möjligt att dra några säkra slutsatser om effekterna av en eller två brunnar i detta sammanhang.

En jämförelse mellan scenarierna C och D visar att högre pumpkapacitet ökar inflödet från Sörån. I scenario D sker inget utflöde från modellen; istället dras allt vatten in via brunnen. Detta innebär att allt vatten och PFAS som lämnar modellen transporteras via brunnen. Detta resultat bekräftas av tabell 5.1 och figur 5.30.

För scenarierna B och C är flödet in till modellen från Sörån av ungefär samma storlek som flödet ut. Tabell 5.1 redovisar dock inte vilka specifika celler längs modellranden som flödet passerar, detta kräver ytterligare analys. Genom att istället studera flödesriktningen (figur 5.28 och figur 5.29) kan det antas att utflödet i huvudsak sker i modellens norra och södra delar, medan inflödet sker närmast den gamla BÖP. Figur 5.19 visar att större delen av PFAS-plymen befinner sig inom det område där brunnarna tar upp vatten, medan plymens ytterkanter sträcker sig mot områden där flödespilarna pekar ut mot Sörån. Detta tyder på att större delen av PFAS som lämnar modellen transporteras via brunnarna, men att en mindre andel sannolikt riskerar att rinna ut i Sörån. Denna analys kan dock inte fastställa hur stor den utgående massan är.

I scenario A minskar utflödet över modellgränsen när brunnen aktiveras, utan att något vatten dras in från Sörån. En större del av PFAS-plymen ligger dessutom inom ett område där flödesriktningen är mot Sörån. Det innebär att en del av massan sannolikt rinner ut i Sörån, även om det inte går att kvantifiera hur stor denna andel är. En analys av massreduktionen kan ge ytterligare insikt om plymens beteende i scenario A. Detta diskuteras vidare i avsnitt 6.1.3.

Sammanfattningsvis resulterar högre pumphastighet i ett större inflöde av vatten från Sörån, och närmare placering av brunnarna i förhållande till vattendraget förstärker denna effekt. Filterdjupet har ingen observerad påverkan. Det är svårt att kvantifiera hur stor andel av massan som lämnar modellerna via brunnarna respektive över modellgränsen. För framtida studier vore en mer detaljerad analys av detta förhållande av intresse, till exempel genom att utnyttja funktioner i GMS för att mäta masstransport i observationspunkter. Detta var något som testades men inte lyckades i detta arbete.

6.1.3 Massreduktion

En central del av utvärderingen av brunnarnas effekt har utgjorts av en analys av reduktionen av total massa. Diskussionen i detta avsnitt baseras huvudsakligen på de figurer som presenteras i avsnitt 5.2.5, se figurer 5.32, 5.33, 5.34 och 5.35, vilka illustrerar procentuell kvarvarande total massa för respektive K_d -värde i modellerna A, B, C och D över tid.

Gemensamt för alla K_d -värden är att reduktionen av total massa sker snabbast i modell D. Detta indikerar att reningseffektiviteten ökar med högre pumpflöde. Ju mer vatten man tar bort, desto mer PFAS försvinner. Effekten av brunnarna i modellerna B och C är likvärdig, utan tydliga skillnader i graferna. Detta antyder att filterdjupet inte har någon avgörande betydelse för massreduktionen i dessa modeller.

Massreduktionen sker långsammast i modell A. Givet att det totala uttaget i brunnarna är detsamma som i scenarierna B och C är det intressant att diskutera möjliga orsaker till denna skillnad. En trolig orsak kan vara brunnarnas placering i förhållande till PFAS-plymen. I modell A är brunnarna placerade längre uppströms, med ett större avstånd till plymens ytterkanter jämfört med i modellerna B och C. Detta kan innebära att brunnarnas kapacitet i modell A är otillräcklig för att pumpa upp det PFAS-förorenade vattnet i dessa områden.

Vidare visade analysen av flödesriktningar och flöde över modellranden att en betydande del av plymen i modell A befinner sig inom områden där flödesriktningen är mot Sörån. Gradienten runt brunnarna är svag i närheten av ån, se figur 5.27. Detta skulle potentiellt kunna leda till en vattendelare som löper genom PFAS-plymen, och att det PFAS som finns i det området rör sig väldigt långsamt. Detta kan förklara att massreduktionen sker långsammare i modell A än de andra modellerna med samma pumpflöde. En möjlig förklaring till detta är att brunnarnas huvudsakliga effekt är att hindra plymens rörelse mot Sörån, snarare än att effektivt pumpa upp det förorenade vattnet. I graferna för samtliga K_d -värden är kurvan för A högre än kurvan som visar massreduktionen utan brunnar mot slutet av simuleringsperioderna. Detta skulle kunna tolkas som en kvarhållningseffekt. På så sätt stannar PFAS i modellen och massreduktionen blir mindre och reningseffektiviteten lägre jämfört med de andra brunnscenarierna. Det är dock svårt att avgöra om PFAS rör sig mot Sörån eller mot brunnarna baserat på denna typ av analys.

Ytterligare undersökningar är nödvändiga för att kunna fastställa plymens rörelser och dra slutsatser om hur mycket PFAS som lämnar modellen via brunnen respektive rinner ut i Sörån. En analys av plymrörelser görs i följande avsnitt 6.1.4.

6.1.4 Koncentration på modellrand

Ett alternativt sätt att analysera plymens rörelse i modell A är att studera förändringar i PFAS-koncentrationer i utvalda celler längs modellens västra gräns under pumpning. Tre celler i olika lager valdes där plymen passerar modellgränsen, se figur 5.36 och 5.37. Figur 5.38 visar koncentrationsförändringarna över tid i respektive cell för ett ämne med ett K_d -värde på 1 L/kg. Dessa kurvor ger möjlighet att närmare analysera plymens rörelse.

I början av simuleringsperioden observeras högre koncentrationer i de övre modellagren. I lager 2 är koncentrationen cirka 15 000 ng/L, medan den i lager 6 är cirka 5 000 ng/L och i lager 10 omkring 1 000 ng/L. Med tiden minskar koncentrationen i lager 2, medan den ökar i lager 6 och lager 10. Förändringarna sker dock relativt långsamt, särskilt i de djupare lagren.

Koncentrationsminskningen i lager 2 kan tolkas både som att PFAS transporteras ut till Sörån eller pumpas upp av brunnen. Däremot tyder koncentrationsökningarna i lager 6 och lager 10 på att plymen rör sig nedåt och samtidigt sprids ut mot Sörån över tid. Detta ger stöd för tolkningen att koncentrationsminskningen i lager 2 även beror på att PFAS lämnar modellen via den västra modellgränsen.

I avsnitt 5.2.6 presenteras figurer som illustrerar PFAS-koncentrationerna i lager 2 vid tre tidpunkter: 5 år, 15 år och 25 år (se figur 5.39–5.44). I dessa figurer ser det ut som att plymen med tiden delas upp på så sätt att en del PFAS transporteras mot brunnen, och en del PFAS samlas vid modellgränsen. Detta stödjer tolkningen att det PFAS som är längst bort från brunnarna inte pumpas upp, utan istället transporteras ut i Sörån, eller stannar vid modellgränsen.

6.2 EFFEKT AV K_d -VÄRDE

Ekvationen för retardation (5) innebär att ett högre K_d -värde ger större retardationseffekt. Denna effekt ser vi också i denna undersökning. Resultaten visar att högre K_d -värden förlänger tiden för massreduktion i samtliga scenarier. Ju högre värde, desto längre transporttider för samma flödes hastighet. Denna slutsats kan dras från att jämföra graferna 5.32-5.35 i avsnitt 5.2.5.

Ett sätt att undersöka effekten av K_d är genom att jämföra tiden att reducera massan till 10 % av den ursprungliga totala massan. För $K_d = 10$ L/kg är det endast brunnscenario D som uppnår detta inom 50 år. För $K_d = 1$ L/kg uppnås detta efter 5–33 år beroende på brunnscenario. För $K_d = 0,1$ L/kg krävs endast 1–7 år för att detta ska uppnås i samtliga scenarier.

Vid den gamla BÖP är PFOS det mest förekommande PFAS-ämnet. Av denna anledning är K_d -värdet hos PFOS av stor betydelse för att kunna dra slutsatser om saneringstiden i de olika brunnscenarierna. Detta diskuteras vidare under avsnitt 6.4.

6.3 EFFEKT AV HETEROGENITETER

Undersökningen av effekten av en heterogen geologi gjordes på två sätt. Dels genom att undersöka och jämföra massreduktionen för varje K_d -värde i modell C, C2 och C3. Dels genom att i GMS visuellt undersöka koncentrationsskillnader mellan homogena och heterogena marklager. Resultatet av dessa undersökningar diskuteras nedan.

När den totala massan för varje K_d -värde plottades över tid blev det tydligt att graferna för modell C och C2 har mycket liknande utseende, se figur 5.50 och 5.51. För att närmre undersöka skillnaden mellan dem jämfördes massan vid olika tider för samtliga K_d -värden, men skillnaderna är mycket små (se avsnitt 5.2.7). Det innebär att tiderna för reduktion av den totala massan i modellerna inte påverkas av en heterogen geologi. Detta resultat var något överraskande, då effekten förväntades vara större och tydligare. Av denna anledning valdes att vidare undersöka modellresultatet med avseende på koncentration.

För att bättre se effekten av områden med låg hydraulisk konduktivitet kan man istället undersöka koncentrationer av PFAS. Detta gjordes genom att titta på de modellerade värdena för $K_d = 1$ L/kg. Ett heterogent lager i modell C2 valdes ut vid tid 20 år, se figur 5.54. Koncentrationerna i detta lager kan jämföras mot de i modell C i samma lager vid samma tidpunkt, se figur 5.53. Man kan då se att plymens utbredning och koncentrationerna påverkas av de områden där det finns silt. I de områdena syns en effekt av att plymen fastnar och att koncentrationen PFAS är högre i de områdena. Detta syns också i figur 5.55, där den procentuella skillnaden mellan modellerade koncentrationer i modell C och C2 visas mot en bakgrund med heterogeniteter. En skillnad upp till 25 % kan ses i flera områden med olika material; grov sand, mellansand och fin sand. Men i silten ses skillnader upp till 250 %. Detta tyder på att PFAS kan fastna i områden med lägre hydraulisk konduktivitet och bidra till så kallad *back diffusion*, det vill säga att PFAS långsamt diffunderar ut till material med högre hydraulisk konduktivitet, där transporten i högre grad beror på grundvattnets rörelser.

Det är dock viktigt att påpeka att startkoncentrationerna av PFAS i cellerna har varit samma för modell C och C2 (och även C3), vilka genererades i modell C (utan heterogeniteter). Det är möjligt att plymen hade sett annorlunda ut om den skapats på nytt i modell C2. Det verkar vara så att PFAS i lägre grad transporteras ut ur material med lägre hydraulisk konduktivitet, vilket

kan innebära att PFAS också i lägre utsträckning transporteras in i sådant material. Av denna anledning kan det rimligen antas att startkoncentrationen i silten sett annorlunda ut om plymen skapats på nytt.

En annan begränsning är att den torra skrymdensiteten i modell C2 och C3 är definierad i modellagren på samma sätt som modell C, trots att heterogeniteter förekommer. Det antas dock att de valda värdena skiljer sig så pass lite att det inte har någon avgörande effekt på resultatet.

Sammanfattningsvis går det i den här modellen att se att PFAS kan fastna i områden med lägre konduktivitet. Effekten på massreduktionen var dock lägre än förväntat, då näst intill inga skillnader kunde urskiljas mellan den homogena och heterogena modellen. Vad detta beror på skulle behöva undersökas vidare genom andra typer av undersökningar eller annan modellutformning, till exempel undersökning av effekten av ändringar i hydraulisk konduktivitet i materialen eller mindre celler i rasternätet.

6.3.1 Modellens känslighet för ändring av porositet

Den initialt valda porositeten i materialen skilde sig mellan grov sand, mellansand, fin sand och silt, se tabell 4.1. Tillsammans med valda värden på hydraulisk konduktivitet innebar de valda värdena att partikelhastigheten var högre i silten än i den fina sanden (mot bakgrund av ekvation (4)). Det skulle kunna innebära att PFAS transporteras snabbare i silt än i sand, om man bortser från sorptionen. Enligt ekvation (5) för retardationsfaktorn motverkas dock denna effekt om man tar hänsyn till sorption och använder kinetisk porositet i ekvationen. I GMS är det den kinetiska porositeten som anges och den som används vid beräkning av retardationsfaktorn. Det ansågs intressant att undersöka hur känslig modellen är för olika val av porositet i materialen och hur resultatet kan påverkas av detta.

För att undersöka effekten av detta skapades modell C3. Den har samma heterogena marklager, men porositeten har definierats till 0,3 (30 %) i samtliga material. Flödes- och transportsimuleringar kördes på nytt i denna modell. Resultaten från modell C2 och C3 jämfördes mot varandra. Massreduktionen i modellerna visar endast små skillnader, se figur 5.51 och 5.52. Det tar något längre tid att uppnå samma grad av massreduktion i modell C3 för alla K_d -värden. För att vidare undersöka skillnader jämfördes istället koncentrationer.

I figur 5.56 presenteras den procentuella skillnaden i koncentration av ämnet med $K_d = 1$ L/s i lager 4 vid tiden 20 år. Den maximala koncentrationsskillnaden uppgår till 1 %. Detta i områden där det finns silt. Denna analys visar att koncentrationerna efter 20 år inte skiljer sig mer än 1 % mellan modell C2 och C3. PFAS lämnar siltlinserna i ungefär samma takt i båda modellerna. Detta tyder på att modellen inte är särskilt känslig för ändringar i värden på porositet. Istället verkar hydraulisk konduktivitet och fördelningskoefficienten ha större påverkan.

För att bättre förstå hur dessa modeller påverkas av valda parametervärden hade fler undersökningar behövts göras. Det hade varit av intresse att undersöka flödes- och transportsimuleringar i de olika materialen samt hur skillnaderna sett ut för olika K_d -värden. För en bättre jämförelse hade modellspecifika startkoncentrationer behövts skapas, det vill säga att plymen genereras enskilt i de olika modellerna, istället för att startkoncentrationerna från den homogena modellen också används i de heterogena modellerna.

Ytterligare en viktig aspekt att diskutera är att låga val av porositet i GMS innebär en låg an-

del extraherbart vatten, eftersom porositeten motsvarar den kinematiska porositeten. I denna modell tas ingen hänsyn till den totala porositeten, men detta hade kunnat göras med en två-porositetsmodell. Då skulle ett lågt värde på kinematiskt porositet innebära att andelen immobiliserade porer skulle vara stor, vilket skulle ha stor påverkan på extraherbarheten av PFAS. Detta är något som man hade kunnat använda för att vidareutveckla modellen.

6.4 TID FÖR SANERING

Tiden för att sanera den omättade zonen från PFAS beror på syftet med åtgärden. Exempelvis kan målet vara att reducera koncentrationerna i grundvattnet eller den totala massan av PFAS kring BÖP till en viss nivå. Ett annat mål kan vara att säkerställa att PFAS-koncentrationen i det vatten som rinner ut i Sörån understiger ett visst gränsvärde. Ett sådant mål behöver dock inte nödvändigtvis innebära en faktisk minskning av PFAS-halten eller -mängden, utan kan istället handla om att med hjälp av pumpning stoppa eller ändra riktningen på grundvattenflödet. Detta skulle dock innebära att pumpningen aldrig kan upphöra. Tidsramen för saneringen beror därmed på de specifika målen för åtgärden, vilket i sin tur kräver olika typer av undersökningar och bearbetning av resultaten från detta arbete. I denna undersökning har fokus legat på den totala mängden PFAS och dess förändring över tid. Slutsatserna om saneringstider är därför begränsade till detta mått.

Modelleringen som presenteras i detta arbete baseras på flera antaganden, inklusive fullständig sanering av den omättade zonen och linjär sorption, tillsammans med andra förenklingar. De faktiska förhållandena skiljer sig sannolikt avsevärt från dessa antaganden, vilket kan påverka de faktiska saneringstiderna. Tid för sanering kan bara diskuteras med dessa begränsningar i åtanke. Dessutom valdes det att begränsa simuleringsperioden till 50 år på grund av praktiska anledningar i modelleringsarbetet. Detta medför att det inte går att dra några säkra slutsatser om vad sker efter 50 år av grundvattenpumpning.

Det antas att det ämne som begränsar massreduktionen mest är det med högst fördelningskoefficient, eftersom ett högre K_d -värde innebär starkare bindning till marken och långsammare transport. En annan avgörande faktor är mängden av ämnet i fråga. Vid den gamla BÖP är PFOS det ämne som uppmätts i högst koncentrationer. Med antagandet att PFOS har ett K_d -värde på cirka 10 L/kg kan resultaten från denna studie användas för att uppskatta tiden som krävs för att reducera mängden PFOS i systemet till en viss nivå. För att uppnå en massreduktion på 90 % inom en period på 50 år krävs ett pumpflöde motsvarande det i brunnscenario D, det vill säga 4 L/s (se figur 5.32). Vid lägre pumpflöden krävs mer än 50 år innan en sådan reningsgrad kan uppnås. En reduktion på 90 % innebär att mängden PFOS efter 50 år skulle vara cirka 20 g, jämfört med knappt 210 g vid början av simuleringen (se figur 9.21). Med bakgrund av detta så är det viktigt att påminna om att K_d -värden är platsspecifika och beror på många olika faktorer. För att förbättra möjligheterna att använda denna studie för att dra slutsatser om effektiviteten av grundvattenpumpning just vid den gamla BÖP vid Sundsvall-Timrå Airport, är det av mycket stor betydelse att undersöka storleken av K_d -värdena för de olika förekommande PFAS-ämnena på just denna plats.

Resultaten i denna undersökning är i linje med tidigare studier och erfarenheter som visar att *pump-and-treat* av PFAS innebär att grundvatten behöver pumpas under många decennier för att uppnå en betydande massreduktion (Birnstingl och Wilson 2024; Hall et al. 2024; SGF u.å.[a]). Detta skulle innebära stora volymer vatten som behöver renas och kan leda till höga kostnader

(Birnstingl och Wilson 2024). Istället kan grundvattenpumpning användas för att snabbt hindra en föroreningsplym att nå känsliga recipienter (Hall et al. 2024; SGF u.å.[a]), i detta fall Sörån, i väntan på andra saneringsåtgärder.

6.5 MODELLUTFORMNING OCH METOD

6.5.1 Kalibrering och validering av flödesmodeller

För att kalibrera flödesmodellen i både den regionala och de lokala modellerna användes uppmätta grundvattennivåer (från olika tidpunkter) från området runt flygplatsen. En jämförelse mellan modellerade och uppmätta värden visar att majoriteten av datapunkterna ligger inom ett kalibreringsintervall på ± 25 cm. I området närmast den gamla BÖP är det endast en punkt som avviker med mer än 25 cm från det uppmätta värdet, vilket gäller både den regionala och de lokala modellerna. Med hänsyn till projektets syfte bedöms avvikelserna som framkom vid kalibreringen vara acceptabla och att eventuella effekter på transportmodelleringen inte är av avgörande karaktär.

Jämförelsen mellan kalibreringspunkterna i den regionala modellen och de lokala modellerna ger även insikter om övergången från regional till lokal modell. Resultaten från kalibreringen indikerar att metoden som användes för att skapa de lokala modellerna från den regionala flödesmodellen inte påverkade noggrannheten i de lokala flödessimuleringarna. Likheter mellan kalibreringspunkterna i den regionala och i de lokala modellerna stödjer denna slutsats.

6.5.2 Utformning av lokala modeller

Utformningen av de lokala modellerna är en annan aspekt som bör diskuteras. Metoden att gå från regional till lokal modell valdes för att kunna skapa modeller med rasternät med mindre cellstorlek men färre celler, för att förkorta tiden som krävdes för varje modellkörning. Att köra en flödessimulering med brunnar tillsammans med PFAS-transport i den regionala modellen hade inneburit väldigt långa körningar. Färre celler innebär kortare simuleringstider. Vidare är en liten cellstorlek önskvärd för att bättre kunna efterlikna naturliga förhållanden.

Modellområdena för de lokala modellerna definierades utifrån flödessimuleringar med brunnar i den regionala modellen, där modellgränserna anpassades för att följa ekvipotentiallinjerna. Denna utformning innebär att flödesriktningen i de lokala modellerna, när brunnar inte inkluderas i flödessimuleringen, kan vara påverkad av valda modellgränser och randvillkor. För att försöka motverka denna problematik justerades värdet på randvillkoret på den östra modellgränsen i simuleringar utan brunnar, för att öka överensstämmelsen med de initiala förhållandena. Trots dessa justeringar påverkar gränsernas utformning flödesriktningen och därmed även plymens utbredning i de lokala modellerna. Detta framgår vid jämförelse av plymens utsträckning, vilken är smalare i de lokala modellerna än i den regionala modellen. Genom att använda en alternativ metod, exempelvis ett ostrukturerat rasternät, hade det möjligen inte varit nödvändigt att skapa lokala modeller och denna effekt hade kunnat undvikas (att använda ostrukturerade rasternät hade dock kunnat innebära andra begränsningar och fel). För detta arbete bedöms dock de identifierade felen vara acceptabla, då det trots dem är möjligt att analysera skillnader mellan olika brunnsuppställningar och bedöma potentialen för PFAS-sanering.

6.5.3 PFAS-modellen

För modelleringen av PFAS-transport antogs en linjär sorptionsmodell. Detta innebär att sorptionen inte är beroende av koncentrationen, utan att PFAS adsorberar till jordmatrisen lika effektivt vid låga som vid höga koncentrationer. Vid den gamla BÖP har mycket höga koncentrationer av PFAS uppmätts, med nivåer upp till cirka 30 000 ng/L. Givet dessa förhållanden skulle en icke-linjär sorptionsmodell som tar hänsyn till höga koncentrationer, exempelvis Freundlich-modellen (Sparrenbom och Jeppson 2022, s. 116), kanske ge en mer realistisk representation av sorption och transport av PFAS på platsen. Det har också antagits att det inte sker någon nedbrytning eller omvandling av de definierade ämnena.

För att skapa PFAS-plymen användes en polygon med definierade koncentrationer i grundvattenbildningen inom ett område i närheten av den gamla BÖP. Polygonen har en oval form, baserat på antagandet att brandskum som använts under övningar har spridits med vindriktningen som vanligtvis råder på platsen. Inom ovalen definierades en mindre cirkel med högre koncentrationer, vilket motiveras av uppmätta värden samt närvaron av en tidigare infiltrationsanläggning i området. Denna anläggning, som nu är borttagen, har sannolikt bidragit till en högre koncentration av PFAS på denna plats genom infiltrering av vatten innehållande föroreningar, varför denna mindre cirkel med högre koncentrationer har definierats.

Samma polygon användes både i den regionala och i de lokala modellerna för att skapa PFAS-plymen. Vid jämförelse är dock plymens utbredning mindre i de lokala modellerna. Detta är troligen en effekt av att flödessimuleringen utan brunnar i de lokala modellerna har påverkats av utformningen av modellgränser som tidigare beskrivet, och att flödesriktningen därför är lite olika.

I denna studie undersöks endast PFAS i den mättade zonen. I transportmodelleringen med brunnar antas att den omättade zonen har genomgått fullständig sanering och att inget nytt PFAS tillförs grundvattnet. Detta antagande har gjorts mot bakgrund av hypotesen att en kontinuerlig tillsats av PFAS skulle försvåra arbetet med att tolka hur PFAS rör sig i modellerna. I verkligheten är det rimligt att anta att det är mycket svårt att uppnå fullständig sanering av den omättade zonen. Ett antagande om ofullständig sanering hade troligtvis avspeglats i resultaten som en långsammare minskning av massan PFAS över tid. Tiden att uppnå en viss procentuell massreduktion skulle förlängas, och massan skulle sannolikt stabiliseras på en plattå vid den tillförda mängden. Under sådana förhållanden skulle det vara omöjligt att reducera PFAS-massan till 0 % av den ursprungliga mängden. Det är emellertid rimligt att anta att detta kan vara svårt att göra i verkligheten, oavsett om källzonen har sanerats fullständigt eller inte.

I den regionala modellen sträcker sig PFAS-plymen ner till lager 14, vilket motsvarar ett djup omkring 20-30 m under markytan. Detta är djupare än vad som provtagits i den dynamiska grundvattenprovtagningen (jämför med figur 3.2) (Sellén & Filipovic 2023a), där grundvattenprover tagits endast ner till 10 m djup. Målet med simuleringen av plymen var att återskapa koncentrationer så som de är uppmätta i den dynamiska grundvattenprovtagningen, men modellen genererar en betydligt djupare plym. Dessutom avtar koncentrationerna långsammare med djupet i modellen jämfört med de uppmätta värdena, det vill säga att modellen genererar högre koncentrationer i de djupare lagren relativt uppmätta koncentrationer (jämför figur 5.46 och 5.47 med figur 3.2). Utöver hur materialegenskaperna har definierats kan skillnaden förklaras av modellens utformning och definierade randvillkor. Modellen är uppbyggd med homogena lager där alla lager har samma horisontella utsträckning. Dessutom definierades randvillkoret

med konstant grundvattennivå i de yttersta cellerna i samtliga lager, vilket innebär att grundvattenflödet vid modellranden alltid är vinkelrätt mot modellväggen. Denna utformning innebär att grundvattnet flödar direkt ut mot det som representerar den intilliggande Sörån, där vattendragets botten i modellen är lika djup som modellens djup. I verkligheten är gränsen mellan mark och vattendragets botten inte vertikal och vattendraget grundare är den totala tjockleken av marklagren. I verkligheten flödar grundvattnet sannolikt som en båge från området vid BÖP mot Sörån (Sparrenbom och Jeppson 2022, figur 3.86a s.125), vilket inte återspeglas i den använda modellen. Denna förenkling påverkar den simulerade plymens djup och utbredning.

För transportmodelleringen i de heterogena modellerna användes en annan lösningsmetod i MT3D-USGS än i övriga modeller (se avsnitt 4.3.5). Detta eftersom körningen avbröts med andra lösningsmetoder. Detta kan ha haft påverkan på resultatet av PFAS-simuleringen, men det är inte känt hur.

När PFAS-plymen på nytt skapades i de lokala modellerna valdes att halvera koncentrationerna jämfört med i den regionala modellen. Detta gjordes för att bättre motsvara de koncentrationer av PFOS som har uppmätts i den dynamiska grundvattenprovtagningen, där PFOS i genomsnitt står för ca 50 % av den totala koncentrationen av de 32 undersökta PFAS-ämnena. PFOS är det ämne som förekommer i högst koncentrationer vid den gamla BÖP. Omskalningen av plymen gjordes baserat på antagandet att PFOS är det begränsande ämnet vid sanering grundvattenpumpning. Detta eftersom det förekommer i höga halter, men också för att det generellt sett har ett högre K_d -värde jämfört med andra PFAS-ämnena som förekommer i höga halter vid brandövningsplatsen (till exempel PFHxS).

I detta arbete valdes det att arbeta med generella K_d -värden i ett intervall av tiopotenser (0,1; 1 och 10). Det är dock värt att göra en jämförelse mellan modellerade och ämnesspecifika K_d -värden. Enligt Pettersson et al. (2024) bör ett värde omkring 14 L/kg användas för PFOS, men detta värde kan också vara lägre på grund av mättade förhållanden i grundvattenzonen. Av denna anledning kan det anses rimligt att anta att modelleringsresultaten från K_d -värdet 10 L/kg motsvarar beteenden hos PFOS.

6.5.4 Marklager och materialegenskaper

Marklagrens tjocklek definierades tidigt i modelleringsprocessen och detta gjordes som en mycket grov uppskattning av lagertjocklek baserat på de två HPT-punkterna som finns vid den gamla BÖP. Senare skapades materialen som är baserade på en tolkning av de uppmätta värdena på hydraulisk konduktivitet i samma HPT-punkter. Materialen tolkades som grov sand, mellansand, fin sand och silt, och dessa fördelades efter bästa förmåga över de 14 modellagren. Markmodellen hade kunnat förbättras genom noggrannare definition och fördelning av tjocklek och material i lagrena. Detta arbete innebär också att markmodellens egenskaper är baserade på endast två mätpunkter, vilket kan betraktas som otillräckligt. Detta bedöms dock vara en rimlig utgångspunkt i avsaknad av mer omfattande data.

De HPT-mätningar som användes för att skapa de homogena marklagren låg även till grund för simuleringen med T-PROGS, som gjordes för att generera heterogena marklager. Statistiskt sett kan det vara svårt att motivera att skapa en modell med rimlig korrelation baserad på enbart två mätpunkter. I avsaknad av ytterligare data ansågs dock detta tillvägagångssätt vara godtagbart inom ramen för detta arbete.

De skapade heterogeniteterna är inte avsedda att exakt återspegla verkliga förhållanden utan ska istället tolkas som ett hypotetiskt scenario. Syftet med detta scenario var att undersöka hur heterogeniteter kan påverka effektiviteten av grundvattenpumpning som saneringsmetod, snarare än att öka överensstämmelsen med verkliga förhållanden. Trots begränsningen av två mätpunkter tyder HPT-mätningarna på att det förekommer siltlinser och områden med låg hydraulisk konduktivitet. Dessa egenskaper inkluderas i modellen med heterogeniteter och möjliggör en analys av deras potentiella inverkan på flödes- och transportprocesserna.

Ett beslut fattades om att begränsa de heterogena marklagren till de tunnaste lagren, det vill säga lager 3–10. Beslutet grundades på intentionen att efterlikna tunna geologiska linser samt på den praktiska motiveringen att brunnen i modellen sträcker sig ned till lager 10. Senare identifierades det dock att det hade varit av intresse att inkludera en modell där samtliga lager, inklusive de under brunnfiltren, hade en heterogen geologi. En sådan modell skulle kunna ge en mer omfattande förståelse för hur heterogeniteter i djupare lager påverkar flödes- och transportprocesserna.

6.6 FORTSATTA STUDIER

Den modell som använts i detta arbete har potential att vidareutvecklas och tillämpas för ytterligare analyser som kan bidra till en fördjupad förståelse för modellens funktion och resultatens innebörd. Det finns flera aspekter i den modell som använts i detta arbete som skulle kunna utvecklas. Det finns även möjligheter att med samma modell utföra alternativa analyser som kan ge ökad kunskap om varför resultaten ser ut som de gör.

Det hade varit mycket intressant att vidare undersöka hur PFAS lämnade modellen i de olika brunnscenarierna. Detta innebär att hitta en metod för att undersöka massflödet genom brunnarna, något som testades i detta arbete men inte lyckades. Vidare är det intressant att på samma sätt undersöka koncentrationer av PFAS i det vatten som lämnar modellen, särskilt det vatten som lämnar modellen vid modellgränsen. Sådan information kan användas för att upptäcka samband mellan koncentrationerna i det uppumpade vattnet och koncentration i den mättade zonen, samt kan ge ökad förståelse för hur PFAS från brandövningsplatsen påverkar den omgivande miljön.

Modellen för PFAS kan vidareutvecklas genom att inkludera koncentrationsberoende sorption. Detta skulle ge en mer realistisk representation av de processer som styr ämnets transport i den omättade zonen. Det vore även intressant att undersöka hur interaktioner mellan olika ämnen påverkar resultatet, för att få bättre förståelse för den komplexa föroreningssituation som råder på platsen.

En annan intressant utvecklingsmöjlighet är att utvärdera fler brunnsuppställningar och brunns-egenskaper. För att underlätta sådana analyser föreslås en metod där ostrukturerade rasternät används. Detta skulle möjliggöra högre upplösning i rasternätet i området kring brunnarna och det förorenade området, samtidigt som simuleringarna kan genomföras i den regionala modellen. Detta tillvägagångssätt skulle kunna innebära minskad arbetsbörda jämfört med att skapa en separat lokal modell för varje brunnscenario, vilket var metoden som användes i detta arbete.

Vidare undersöktes effekten av geologiska heterogeniteter i detta arbete enbart för ett ämne med K_d -värde 1 L/kg med avseende på koncentration. Det skulle vara intressant att undersöka om de observerade effekterna gäller även för andra ämnen med andra fördelningskoefficienter. Det skulle kunna innebära ökad förståelse för hur hydraulisk konduktivitet och K_d -värde påverkar

saneringsmöjligheterna. Generellt sett hade fler undersökningar behövts för att undersöka anledningen till varför massreduktionen av samtliga ämnen inte påverkades nämnvärt av den heterogena geologiska modellen.

Fortsättningsvis kan det finnas ett värde i att utveckla modellen till en transient modell, för att se hur systemet påverkas av t.ex. kraftiga regn eller årstidsvariationer. Att vidareutveckla modellen i takt med att mer data blir tillgänglig skulle också kunna förbättra modellens tillförlitlighet och ge en djupare förståelse för hur grundvattenpumpning kan användas som sanerings- eller skyddsåtgärd på platsen.

Avslutningsvis är det värt att betona vikten av ett stort och detaljerat dataunderlag i allt modelleringsarbete. Detta för att kunna skapa modeller som på bästa sätt representerar verkligheten. I takt med att fler undersökningar görs och kännedomen om platsen ökar finns det goda möjligheter att utveckla modellerna och bygga vidare på detta arbete. Det rekommenderas att platsspecifika K_d -värden för förekommande PFAS-ämnen undersöks och att resultaten från detta projekt tolkas tillsammans med dessa. Detta för att bättre kunna dra slutsatser om tidsperspektiven för att sanera PFAS från grundvattnet.

7 SLUTSATSER

I detta arbete har undersökningar genomförts kring hur olika brunnsegenskaper, fördelningskoefficienter och geologiska förhållanden påverkar effekten av grundvattenpumpning för sanering av PFAS vid den tidigare brandövningsplatsen vid Sundsvall-Timrå Airport.

Resultatet av denna undersökning visar att reningseffekten med avseende på massreduktion ökar med ökat pumpflöde. Ju mer vatten som pumpas, desto snabbare sanering. Det innebär dock större intag av vatten från Sörån och större grundvattenavsänkning i området. Resultaten visar att större massreduktion uppnås av att en brunn är placerad längre nedströms jämfört med två brunnar längre uppströms i plymen. Filterdjupet har i denna undersökning inte visat sig ha någon stor betydelse för resultaten.

Vidare har fördelningskoefficienten stor betydelse för möjligheten att pumpa upp PFAS. Ju högre värde, desto längre saneringstider. Med valda K_d -värden och geologiska och hydrologiska förhållanden, visar denna undersökning att det krävs omkring 50 år av pumpning för att reducera massan PFAS i den omättade zonen till 10 % av de initiala mängderna. Detta gäller endast vid ett pumpflöde på 4 L/s, vilket ger ett större intag av vatten från Sörån. För mindre pumpflöden krävs längre tid för sanering. Detta bygger på att den omättade zonen saneras fullständigt. Dessutom finns det risk att saneringstiderna förlängs ytterligare av förekomst av mycket siltlinser vid en mer heterogen geologi. Resultaten av undersökningen antyder att PFAS fastnar inne i material med låg hydraulisk konduktivitet och kan vara svår att avlägsna med grundvattenpumpning.

Avslutningsvis är det viktigt att betona att resultaten bygger på flera antaganden och ett begränsat dataunderlag. Det är därför väsentligt att platsen fortsatt undersöks och att resultaten från detta arbete kombineras med nyförvärvad kunskap. Detta för att förbättra tolkningarna om möjligheterna för grundvattenpumpning vid den gamla brandövningsplatsen vid Sundsvall-Timrå Airport.

8 REFERENSER

- Aquaveo (2014). *GMS:What Is GMS*. https://www.xmswiki.com/wiki/GMS:What_Is_GMS [2024-10-18].
- Aquaveo (2016a). *Example of a calibration target*. [Illustration]. <https://www.xmswiki.com/index.php?curid=6727> [2025-01-14].
- Aquaveo (2016b). *Observation target error bars*. [Illustration]. <https://www.xmswiki.com/index.php?curid=20991> [2025-01-14].
- Aquaveo (2020). *GMS: T-PROGS*. <https://www.xmswiki.com/index.php?title=GMS:T-PROGS&oldid=147084> [2025-01-09].
- Birnstingl, J. och Wilson, J. (2024). A Cost Comparison of Pump-and-Treat and In Situ Colloidal Activated Carbon for PFAS Plume Management. *Remediation Journal* 351, e70005. DOI: 10.1002/rem.70005.
- Brusseau, M.L. (2023). Differential Sorption of Short-Chain versus Long-Chain Anionic Per- and Poly-Fluoroalkyl Substances by Soil. *Environments*. 10 (10), 175. DOI: 10.3390/environments10100175.
- Brusseau, M.L., Anderson, R.H. och Guo, B. (2020). PFAS concentrations in soils: Background levels versus contaminated sites. *Science of The Total Environment*. 740 (2020), 140017. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2020.140017.
- Carle, S.F. (1999). *T-PROGS: Transition Probability Geostatistical Software*. Version 2:1. University of California, Davis.
- Earon, R. (2024). *Stabilization of PFAS at Sundsvall-Timrå Airport. Experience from a governmental assignment in-situ pilot study*. Powerpointpresentation. SGI (24-09-03).
- ECHA (u.å.). *Per- och polyfluoralkylsubstanser (PFAS)*. <https://echa.europa.eu/sv/hot-topics/perfluoroalkyl-chemicals-pfas> [2024-11-05].
- Fenton, S.E., Ducatman, A., Boobis, A., DeWitt, J.C., Lau, C., Ng, C., Smith, J.S. och Roberts, S.M. (2021). Per- and Polyfluoroalkyl Substance Toxicity and Human Health Review: Current State of Knowledge and Strategies for Informing Future Research. *Environmental Toxicology and Chemistry* 40(3), s. 606–630. DOI: <https://doi.org/10.1002/etc.4890>.
- Fetter, C.w. (2001). Chapter 3: Properties of Aquifers. *Applied Hydrology, Fourth Edition*. Pearson Education, s. 97.
- Gauthier, J.R. och Mabury, S.A. (2024). Experimentally Determined Aqueous Diffusion Coefficients of PFAS Using ¹⁹F NMR Diffusion-Ordered Spectroscopy. *ACS ES&T Water* 410, s. 4615–4624. DOI: 10.1021/acsestwater.4c00631.
- Glüge, J., Scheringer, M., Cousins, I.T., DeWitt, J.C., Goldenman, G., Herzke, D., Lohmann, R., Ng, C.A., Trier, X. och Wang, Z. (2020). An overview of the uses of per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS). *Environmental Science: Processes & Impacts*. 22 (12), s. 2345–2373. DOI: 10.1039/D0EM00291G.
- Gustafsson, L-G. och Refsgaard, A. (2007). *Datormodeller för förorenings-spridning fas 2*. (Rapport 5676). Naturvårdverket.
- Hall, L.C., Wilson, J.T. och Birnstingl, J.G.A. (2024). Pandora’s PFAS box: Life cycle exposure considerations of treatment options for PFAS in groundwater. *Remediation Journal* 342, e21775. DOI: 10.1002/rem.21775.
- Harbaugh, A.W. (2005). *MODFLOW-2005 : the U.S. Geological Survey modular ground-water model—the ground-water flow process*. (Techniques and Methods 6-A16). USGS. DOI: 10.3133/tm6A16.

- Helldén, J., Juvonen, B., Liljedahl, T., Broms, S. och Wiklund, U. (2006). *Åtgärdslösningar – erfarenheter och tillgängliga metoder*. (Rapport 5637). Naturvårdverket.
- Jonasson, S., Brömssen, M. von, Gunnemyr, L. och Lindstrand, O. (2007). *Modeller för transport och spridning av föroreningar fas 2*. (Rapport 5692). Naturvårdverket.
- Kemikalieinspektionen (2021). *Kunskapssammanställning om PFAS*. (PM 1/21). Kemikalieinspektionen.
- Kemikalieinspektionen (2024). *PFAS*. <https://www.kemi.se/en/chemical-substances-and-materials/pfas> [2024-11-05].
- Lantmäteriet (2023). *Topografi 1M. SWEREF 99 TM (EPSG:3006), SWEREF 99 lokala zoner (EPSG:3007-3018)*. [23-02-28].
- McGarr, J.T., Mbonimpa, E.G., McAvoy, D.C. och Soltanian, M.R. (2023). Fate and Transport of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) at Aqueous Film Forming Foam (AFFF) Discharge Sites: A Review. *Soil Systems*. 7 (2), 53. DOI: 10.3390/soilsystems7020053.
- Mercer, J.W., Skipp, D.C. och Giffin, D. (1990). *Basics of Pump-and-Treat Ground Water Remediation Technology*. (EPA-600/8-90/003). U.S. Environment Protection Agency.
- Miljöinstitutet, IVL Svenska (2023). *Stoppar mängden PFAS i omlopp*. <https://www.ivl.se/varterbjudande/forskning/kemikalier/spridningen-av-pfas-amnen-fran-brandovningsplatser.html> [2025-01-29].
- Naturvårdsverket (2024). *Högfluorerade ämnen i miljön, PFAS*. <https://www.naturvardsverket.se/amnesomraden/miljoforoeningar/organiska-miljogifter/hogfluorerade-amnen-i-miljon-pfas/> [2024-11-04].
- Niras (2020a). *PM-Jordprovtagning under betongplatta, analys av PFAS samt TOP-analys. Sundsvall Timrå-Airport*. Trafikverket.
- Niras (2020b). *PM-Miljöteknisk markundersökning. Version utan bilagor. Sundsvall Timrå-Airport*. Trafikverket.
- OECD (2021). *Reconciling Terminology of the Universe of Per- and Polyfluoroalkyl Substances: Recommendations and Practical Guidance*. (Series on Risk Management No. 61). OECD Publishing.
- Pettersson, M., Montelius, M., Back, P-E., Ohlsson, Y., Berggren Kleja, D. och Johansson, M. (2024). *Ämnesspecifika data för fyra perfluorerade ämnen*. SGI.
- Rasmusson, K. och Fagerlund, F. (2024). Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) as contaminants in groundwater resources – A comprehensive review of subsurface transport processes. *Chemosphere* 362, s. 142663. ISSN: 0045-6535. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2024.142663.
- Ruyle, B.J., Thackray, C.P., Butt, C.M., LeBlanc, D.R., Tokranov, A.K., Vecitis, C.D. och Sunderland, E.M. (2020). Centurial Persistence of Forever Chemicals at Military Fire Training Sites. *Environmental Science & Technology*. 57 (21), s. 8096–8106. DOI: 10.1021/acs.est.3c00675.
- Sellén & Filipovic (2023a). Data från dynamisk grundvattenprovtagning. [Opublicerat material].
- Sellén & Filipovic (2023b). Data från HPT-sondering. [Opublicerat material].
- Sellén & Filipovic (2024). *Rapport Dynamisk grundvattenprovtagning avseende PFAS vid Sundsvall-Timrå Airport 2023*. Utkast. [Opublicerat material].
- SGF (2023). *PFAS-prekursorer*. <https://www.foroenadomraden.se/index.php/aemnen/pfas/grupper/pfas-prekursorer> [2024-10-02].
- SGF (2025). *Ordlista. Stripping*. <https://atgardsportalen.se/ordlista/#stripping> [2025-02-18].
- SGF (u.å.[a]). *Grundvattenpumpning och behandling – fördjupning*. <https://atgardsportalen.se/gvpump-fordjupn/> [2024-10-23].

- SGF (u.å.[b]). *Grundvattenpumpning och behandling – översikt*. <https://atgardsportalen.se/metod-1/> [2024-10-24].
- SGI (2023). *Luftinjektering- Air sparging*. <https://www.sgi.se/sv/om-sgi/vart-samhallsuppdrag/regeringsuppdrag/uppdrag-om-forskning-och-okad-kunskap-om-pfas-fororenade-omraden/luftinjektering--air-sparging/> [2025-02-20].
- SGI (2024a). *Stabilisering*. <https://www.sgi.se/sv/om-sgi/vart-samhallsuppdrag/regeringsuppdrag/uppdrag-om-forskning-och-okad-kunskap-om-pfas-fororenade-omraden/in-situ-stabilisering/> [2025-01-30].
- SGI (2024b). *Uppdrag om forskning och ökad kunskap om PFAS-förorenade områden*. <https://www.sgi.se/sv/om-sgi/vart-samhallsuppdrag/regeringsuppdrag/uppdrag-om-forskning-och-okad-kunskap-om-pfas-fororenade-omraden/> [2025-01-29].
- SGU (2019). *Jorrdjupsmodell 10x10m. Koordinatsystem i plan: SWEREF99TM (EPSG:3006). Koordinatsystem i höjd: RH 2000 (EPSG:5613)*. Dataformat TIFF, ESRI Shape [2019-04-03].
- SGU (2023a). *Kartvisaren Jordarter 1:25 000–1:100 000. SWEREF 99 TM*. [25-01-16]. <https://apps.sgu.se/kartvisare/kartvisare-jordarter-25-100.html>.
- SGU (2023b). *Kartvisaren Jorrdjup. SWEREF 99 TM*. [25-01-16]. <https://apps.sgu.se/kartvisare/kartvisare-jorrdjup.html>.
- SGU (2024). *PFAS – gränsvärden och tillståndsklasser*. <https://www.sgu.se/anvandarstod-for-geologiska-fragor/bedomningsgrunder-for-grundvatten/grundvattnets-kvalitet--organiska-amnesgrupper/pfas/pfas--gransvarden-och-tillstandsklasser/> [2024-11-05].
- SLU (2023). *Stoppar mängden PFAS i omlopp*. <https://www.slu.se/forskning/kunskapsbank/a2023/stoppa-mangden-pfas-i-omlopp/> [2025-01-29].
- Sparrenbom, C. och Jeppson, H. (2022). *Grundvattenboken*. Studentlitteratur, s. 76–78.
- StructX (u.å.). *Hydraulic Conductivity Ranges of Various Soil Types*. https://structx.com/Soil_Properties_007.html [2025-01-13].
- Sundsvall-Timrå Airport (2024). *Om Sundsvall Timrå Airport*. <https://www.sdlairport.se/om-flygplatsen.html> [2024-11-20].
- Sweco (2018). *Samrådsunderlag. Tillståndsansökan Sundsvall-Timrå Airport*. Sweco Environment (2018-05-14).
- Sweco (2019). *Bilaga B3 hydrologisk och hydrogeologisk beskrivning. Tillståndsansökan Sundsvall-Timrå Airport*. Sweco Environment (2019-04-03).
- Tatsuoka, F., T., Iwasaki, Tokida, K-I., Yasuda, S., Hirose, M., Imai, T. och Kon-No, M. (1980). Standard Penetration Tests and Soil Liquefaction Potential Evaluation. *Soils and Foundations* 204, s. 95–111. ISSN: 0038-0806. DOI: doi.org/10.3208/sandf1972.20.4_95.
- USGS (2022). *MODFLOW-NWT: A Newton Formulation for MODFLOW-2005*. <https://www.usgs.gov/software/modflow-nwt-a-newton-formulation-modflow-2005> [2025-01-16].
- USGS (u.å.[a]). *MNW2 - Multi-Node Well Package*. <https://water.usgs.gov/ogw/modflow/MODFLOW-2005-Guide/mnw2.html> [2025-02-19].
- USGS (u.å.[b]). *Summary of MT3D-USGS*. https://water.usgs.gov/water-resources/software/MT3D-USGS/Summary_MT3D-USGS.txt [2025-01-23].
- Winston, R.B. (2023). *Getting Started with MODFLOW*. The Groundwater Project. DOI: 10.21083/978-1-77470-030-3.
- Woessner, W.W. och Poeter, E.P. (2020). 3.2 Effective Porosity. *Hydrogeologic Properties of Earth Materials and Principles of Groundwater Flow*. The Groundwater Project. DOI: doi.org/10.21083/978-1-7770541-2-0.
- WSP (2012). *Swedavia AB Sundsvall Härnösand Airport. Kompletterande utredning av PFOS vid brandövningsplatser*. Rapport (2012-04-17).

- WSP (2015). *PFOS i omättad jordzon. Redovisning av markprovtagning Sundsvall Timrå Flygplats hösten 2013*. Rapport (2015-05-28).
- WSP (2019). *Fördjupad miljöundersökning avseende PFAS Sundsvall Timrå Airport*. Rapport (2019-02-19).
- Zhang, C. (2020). 7. Pump-and-Treat Systems. *Soil and Groundwater Remediation - Fundamentals, Practices, and Sustainability*. John Wiley & Sons, s. 187–224. ISBN: 978-1-11939-3-153.
- Zheng, C., Hill, M.C., Cao, G. och Ma, R. (2012). MT3DMS: Model use, calibration, and validation. *Transactions of the ASABE* 55, s. 1549–1559. DOI: 10.13031/2013.42263.

9 APPENDIX

9.1 HYDRAULISK KONDUKTIVITET OCH MATERIAL

I tabell 9.1 redovisas de median- och medelvärden som beräknades i djupintervall om 5 m på uppmätta värden av hydraulisk konduktivitet från den dynamiska grundvattenprovtagningen (Sellén & Filipovic 2023a) för HPT-punkt 38.

Tabell 9.1: Beräknade median- och medelvärden av hydraulisk konduktivitet för HPT 38.

HPT 38	Hydraulisk konduktivitet [m/d]	
Djup [m]	<i>Median</i>	<i>Medel</i>
0–5	24,1	23,6
5–10	16,2	14,9
10–15	7,3	6,3

I tabell 9.2 redovisas de median- och medelvärden som beräknades i djupintervall om 5 m på uppmätta värden av hydraulisk konduktivitet från den dynamiska grundvattenprovtagningen (Sellén & Filipovic 2023a) för HPT-punkt 104.

Tabell 9.2: Beräknade medianvärden av hydraulisk konduktivitet för HPT 104.

HPT 104	Hydraulisk konduktivitet [m/d]	
Djup [m]	<i>Median</i>	<i>Medel</i>
0–5	23,2	22,6
5–10	17,1	16,6
10–15	11,9	10,4
15–20	5,2	5,0

I tabell 9.3 redovisas förhållandet mellan hydraulisk konduktivitet och valt material för djupintervall om 5 m för de två HPT-punkterna. Den hydrauliska konduktiviteten är ett medelvärde av medianvärdet inom respektive djupintervall från HPT-38 och HPT-104.

Tabell 9.3: Förhållande mellan hydraulisk konduktivitet inom definierade djupintervall i HPT-mätningar och definierat material i modellen.

Djup [m]	Hydraulisk konduktivitet [m/d]	Motsvarande material
	<i>Avr. medelvärde av median från HPT 38 och 104</i>	
0–5	23,5	Grov sand
5–10	16,5	Mellansand
10–15	9,5	Fin sand
15–20	5,0	Silt

9.2 GRUNDVATTENBILDNING

Tabell 9.4 redovisar värden på grundvattenbildningen som de är definierade i modellen. Olika värden har antagits inom olika områden (polygoner). Områdena har specifika ID-nummer och namn i modellen. Lokaliseringen för dessa områden presenteras med ID-nummer i figurerna 9.1, 9.2 och 9.3 nedan.

Tabell 9.4: Antaganden för grundvattenbildning [mm/år] för varje ID-nummer som motsvarar ett specifikt definierat område i modellen.

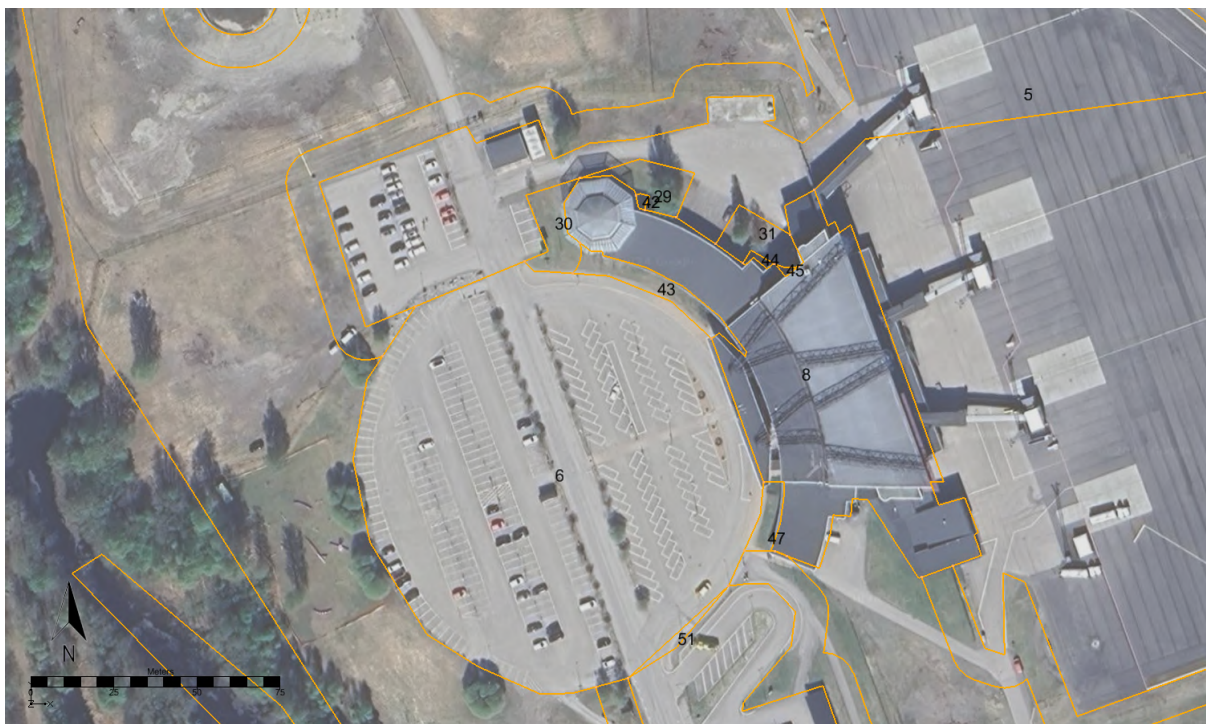
ID	Namn	Grundvattenbildning [mm/år]
1	Paved	0
2	Paved	0
3	Paved	0
4	Paved	0
5	Paved	0
6	Paved	0
7	Paved	0
8	Bldg	0
9	Paved	0
10	Paved	0
11	Paved	0
12	Forrest	271,2
13	Forrest	271,2
14	Forrest	271,2
15	Forrest	271,2
16	Buffer	1105,1
17	Buffer	693,8
18	Buffer	678,5
19	Buffer	678,5
20	Buffer	678,5
21	Buffer	678,5
22	Sandig_falt	372,9
23	Infil_avr	339,0
24	Sandig_falt	339,0
25	Forrest	271,2
26	Forrest	271,2
27	Buffer	406,8
28	Buffer	678,5



Figur 9.1: Polygon-ID för grundvattenbildningen, övre halvan av Skeppsholmen.



Figur 9.2: Polygon-ID för grundvattenbildningen, undre halvan av Skeppsholmen.



Figur 9.3: Polygon-ID för grundvattenbildningen omkring flygplatsbyggnaden.

9.3 REGIONAL MODELL: KALIBRERINGSDATA

I tabell 9.5 presenteras de grundvattenmätningar som använts för kalibrering av grundvattenmodellen. Tabellen är direkt skapad efter data i GMS, varpå de engelska benämningarna har valts att behållas. *Obs. Head* är uppmätt grundvattennivå [m ö.h.] i varje observationspunkt. *Obs. Head Interval* [m] motsvarar det kalibreringsintervall som valdes för samtliga observationspunkter. *Computed Head* är modellerad grundvattennivå [m ö.h.] för flödessimuleringen utan brunnar och *Residual Head* är skillnaden mellan det modellerade och det uppmätta värdet [m].

Tabell 9.5: Observationspunkter och de uppmätta värdena samt kalibreringsintervallet för samtliga punkter i den regionala modellen. I de två kolumnerna till höger presenteras de modellerade grundvattennivåerna (*Computed head*) och skillnaden till det uppmätta värdet (*Residual head*).

Name	Obs. Head	Obs. Head Interval	Computed Head	Residual Head
B107-091	0.24	0.25	0.24	-0.013
B107-092	0.29	0.25	0.29	0.035
B107-121	0.19	0.25	0.19	-0.043
B107-122	0.22	0.25	0.22	-0.014
B107-123	0.23	0.25	0.23	-0.003
V110-4	0.36	0.25	0.36	0.067
V110-10	0.27	0.25	0.27	-0.040
V110-14	0.24	0.25	0.24	0.006
V110-2	0.18	0.25	0.18	-0.026
V110-5	0.26	0.25	0.26	-0.007
V110-8	0.19	0.25	0.19	-0.016
V110-9	0.31	0.25	0.31	0.027
V110-13	0.26	0.25	0.26	0.003
V110-112	0.05	0.25	0.05	-0.280
möjligt M0903	0.22	0.25	0.22	-0.033
20-Nov	0.01	0.25	0.01	-0.213
21-Nov	0.00	0.25	0.00	-0.194
24-Nov	0.18	0.25	0.18	-0.016
25-Nov	0.23	0.25	0.23	0.024
26-Nov	0.20	0.25	0.20	-0.007
28-Nov	0.24	0.25	0.24	-0.013
29-Nov	0.22	0.25	0.22	-0.021
30-Nov	0.12	0.25	0.12	-0.119
02-Nov	0.29	0.25	0.29	0.072
03-Nov	0.22	0.25	0.22	0.026
04-Nov	0.18	0.25	0.18	-0.018
05-Nov	0.24	0.25	0.24	0.051
06-Nov	0.52	0.25	0.52	0.310
08-Nov	0.37	0.25	0.37	0.188
09-Nov	0.11	0.25	0.11	-0.028
10-Nov	0.31	0.25	0.31	0.169
18W01	0.46	0.25	0.46	0.268
18W02	0.39	0.25	0.39	0.226
18W03	0.40	0.25	0.40	0.177
18W05	0.26	0.25	0.26	0.108
18W06	0.26	0.25	0.26	0.091
18W07	0.34	0.25	0.34	0.047
18W08	0.29	0.25	0.29	-0.019
18W10	0.28	0.25	0.28	0.002
18W11	0.28	0.25	0.28	-0.009
18W12	0.24	0.25	0.24	0.065
18W13	0.26	0.25	0.26	0.031
18W1105	0.45	0.25	0.45	0.216
18W1107	0.29	0.25	0.29	-0.024
GW16	0.59	0.25	0.59	0.172
Referensrör	1.15	0.25	1.15	0.824
Vindstrut	0.91	0.25	0.91	0.486
NyaBrand	1.20	0.25	1.20	0.689

9.4 T-PROGS

Nedan presenteras utsnitt av samtliga inställningar och valda värden i T-PROGS som användes för att generera de heterogena marklagren.

I figur 9.4 visas att samtliga material (HGUs) användes och att mellansand användes som bakgrund.

T-PROGS Materials

Simulation name: TPROGS

Materials

☒ Use all HGUs
☐ Use one HGU: Silt

Material	From Boreholes	Background
Silt	☒	☐
Mellansand	☒	☒
Fin sand	☒	☐
Grov sand	☒	☐

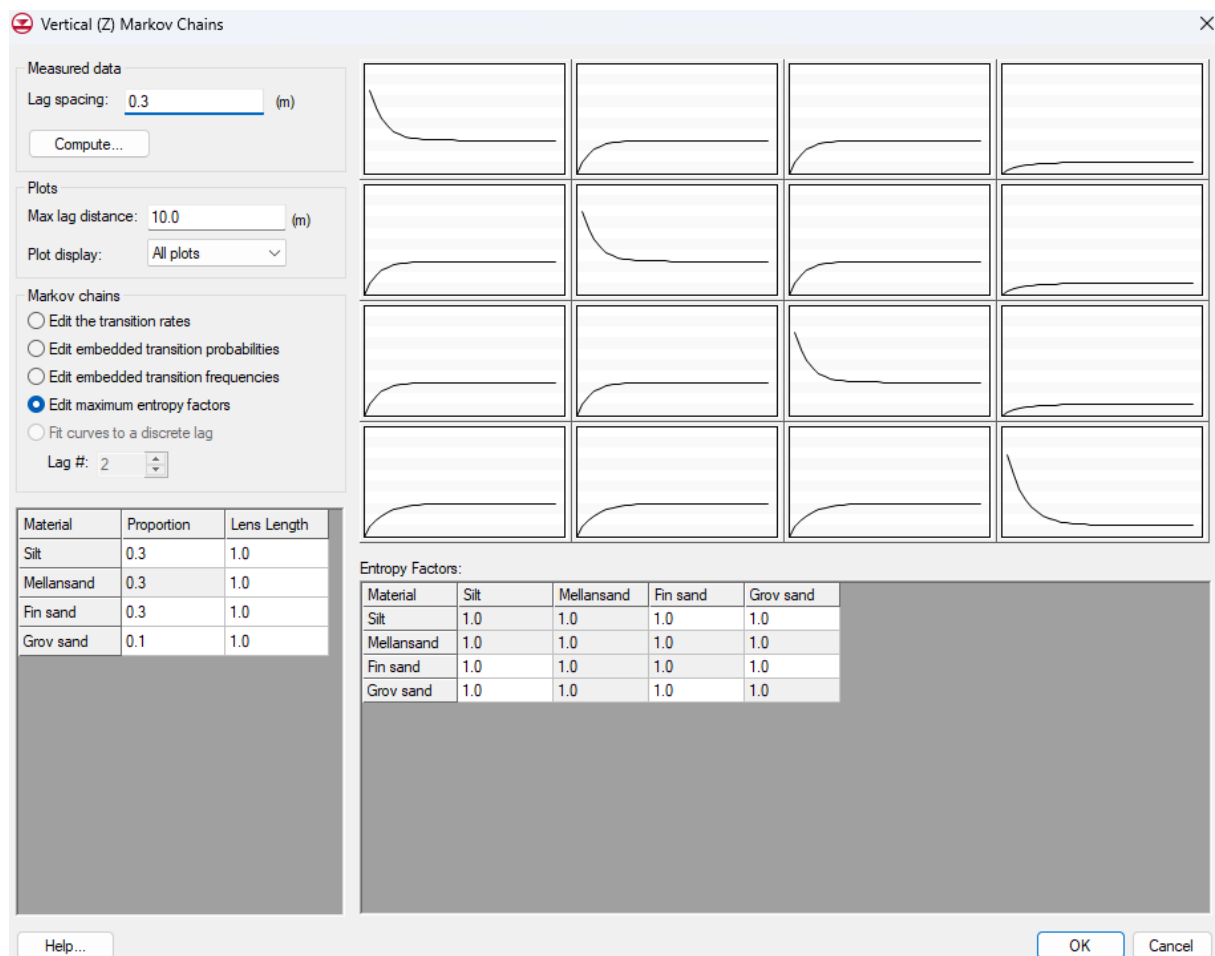
Materials Editor...

Azimuth: 0.0

Help... OK Cancel

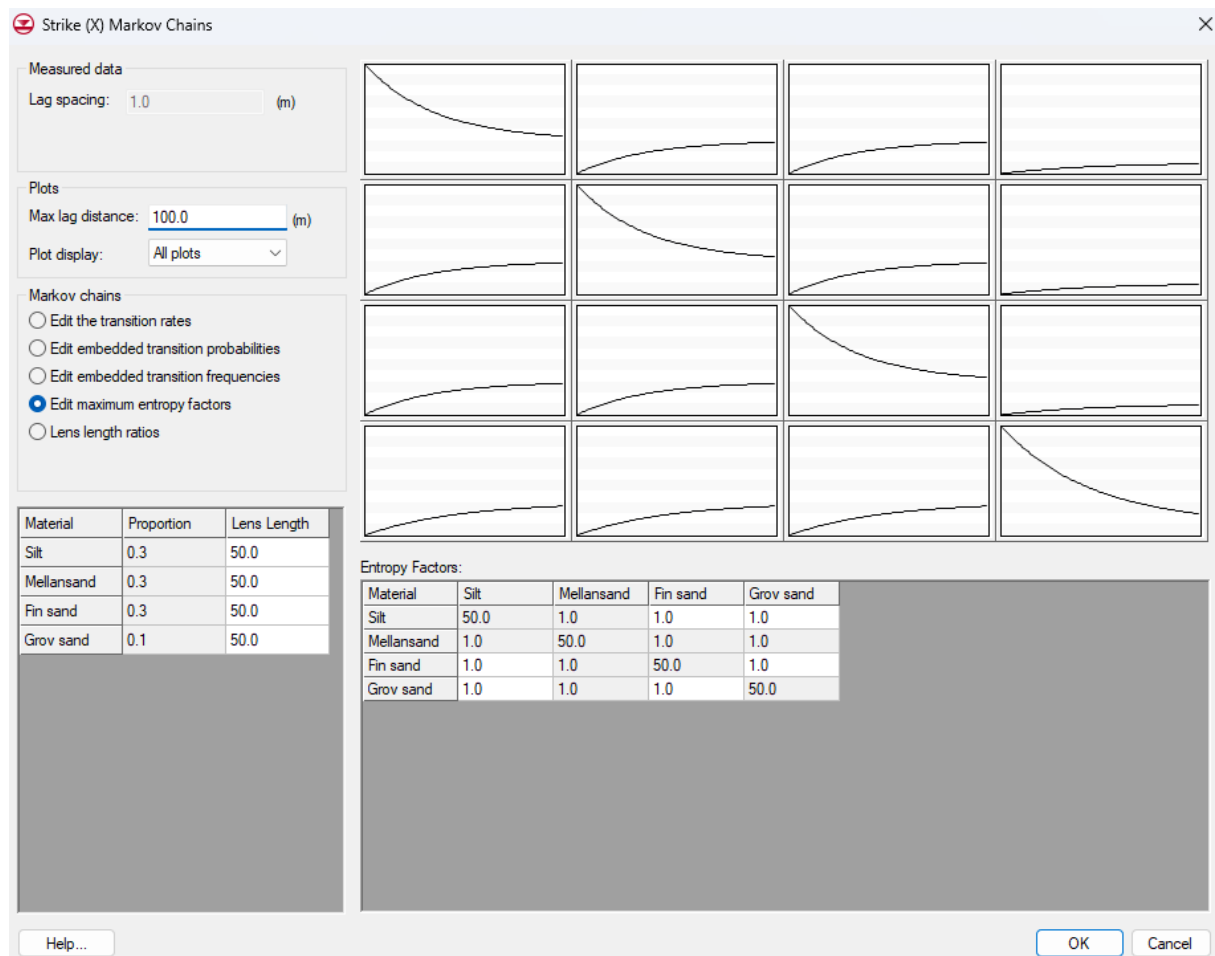
Figur 9.4: Utsnitt från dialogrutan T-PROGS Materials i GMS. Mellansand valdes är valt som bakgrunds-material.

I T-PROGS definieras hur stora linser som statistiskt ska genereras. Detta görs genom att definiera linslängd (*lens length*) i alla material i z-, x- och y-led. I z-led valdes linslängden (linstjockleken) till 1 m för samtliga material, se figur 9.5. Proportionerna sattes till 30 % silt, 30 % fin sand och 10 % grov sand mot en bakgrund av mellansand (resterande 30 %). Dessa värden valdes som en grov uppskattning av materialfördelningen baserat på HPT-punkterna. Detta innebär att T-PROGS statistiskt genererar ett materialdataset med önskade proportioner och dimensioner.

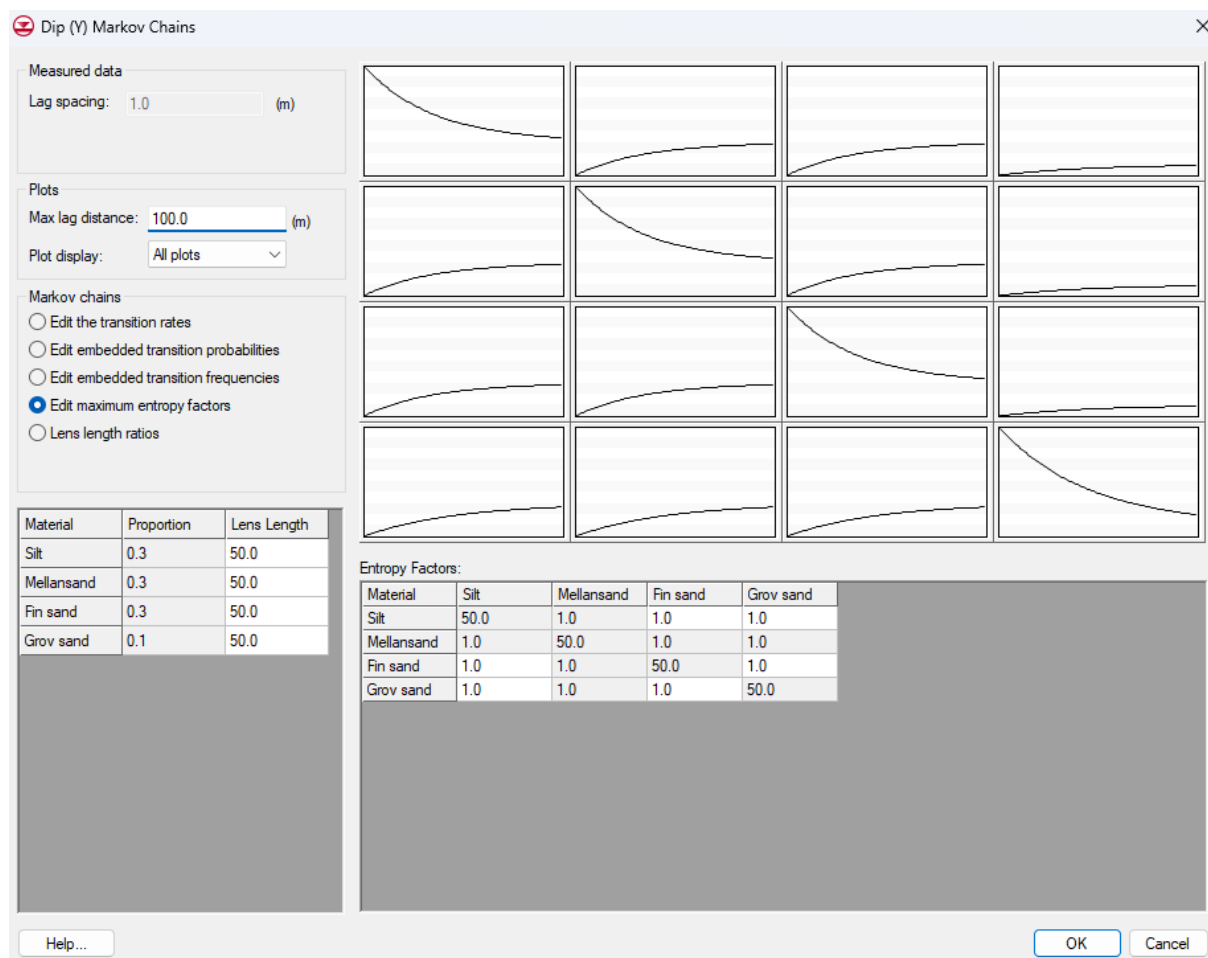


Figur 9.5: Utsnitt från dialogrutan Vertical (Z) Markov Chains i T-PROGS i GMS. Andelar av materialen är definierade under *Proportion*. Linstjockleken är vald till 1 m i samtliga material.

I x - och y -led valdes materiallinsernas utbredning till 50 m, se figur 9.6 och 9.7. Detta innebär att T-PROGS statistiskt genererar materiallinser av storleken 50 x 50 m.



Figur 9.6: Utsnitt från dialogrutan Strike (X) Markov Chains i T-PROGS i GMS. Andelar av materialen är definierade under *Proportion* och är överförda från valda värden i *z*-led. Linsstorleken är vald till 50 m i *x*-led i samtliga material.



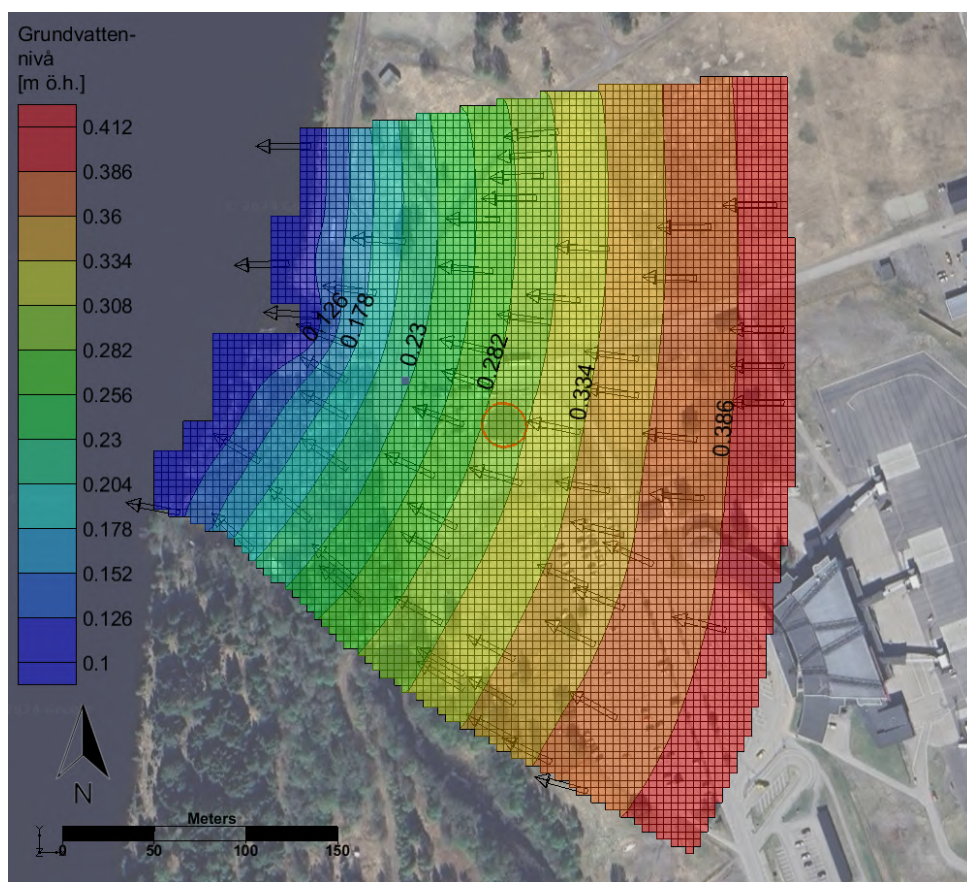
Figur 9.7: Utsnitt från dialogrutan Dip (Y) Markov Chains i T-PROGS i GMS. Andelar av materialen är definierade under *Proportion* och är överförda från valda värden i *z*-led. Linsstorleken är vald till 50 m i *y*-led i samtliga material.

9.5 LOKALA MODELLER

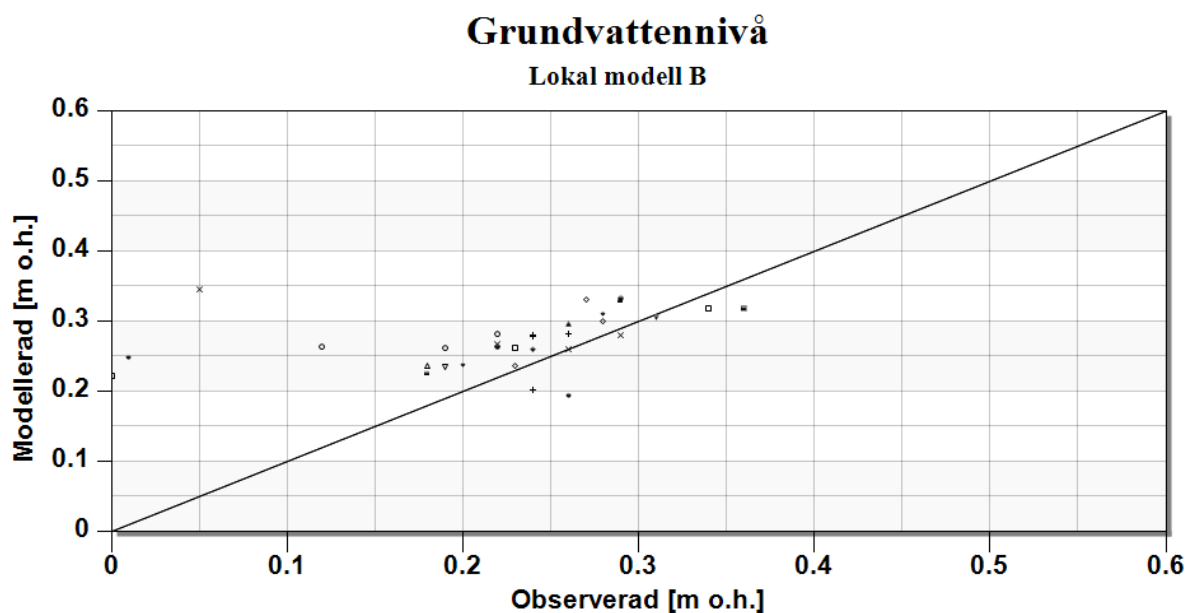
9.5.1 Flödessimuleringar utan brunnar

I detta avsnitt presenteras figurer av modellerade grundvattennivåer och flödesriktning för modell B, C och D i flödessimuleringar utan brunnar. I anslutning dessa presenteras även de kalibreringsgrafer med uppmätta värden plottade mot modellerade värden. För modell C2 och C3 presenteras endast kalibreringsgrafer.

Modell B

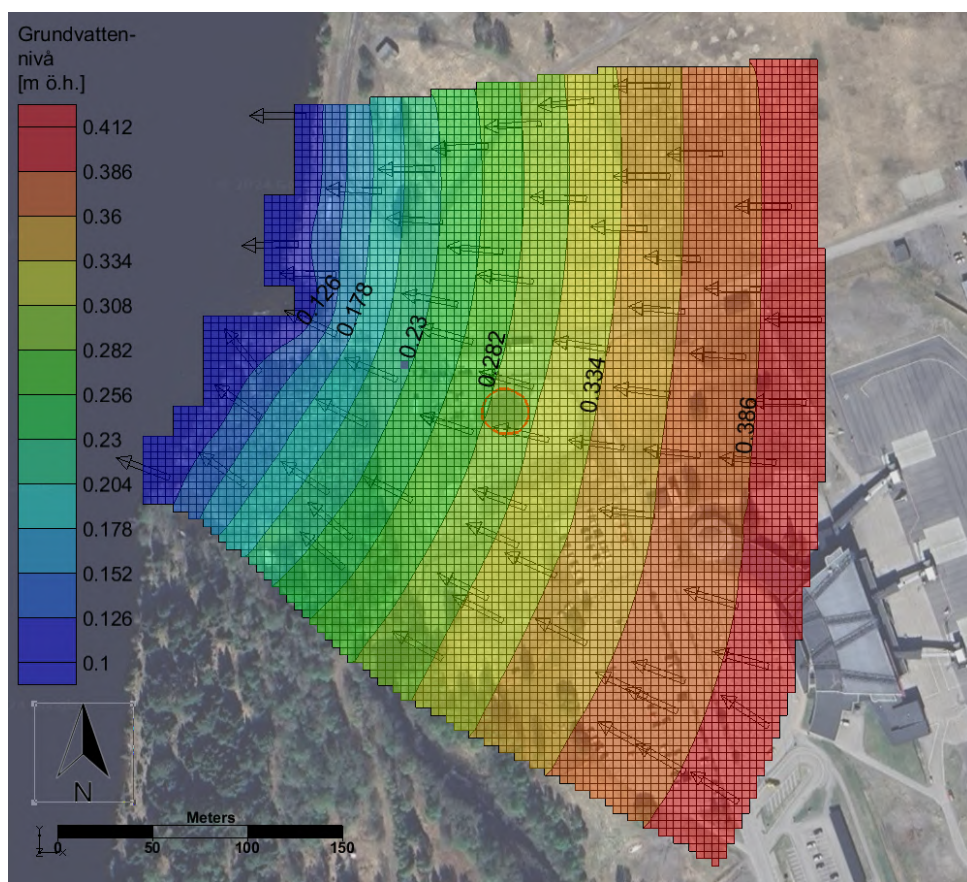


Figur 9.8: Modellerad grundvattennivå i flödessimulering utan brunnar i den lokala modellen B.

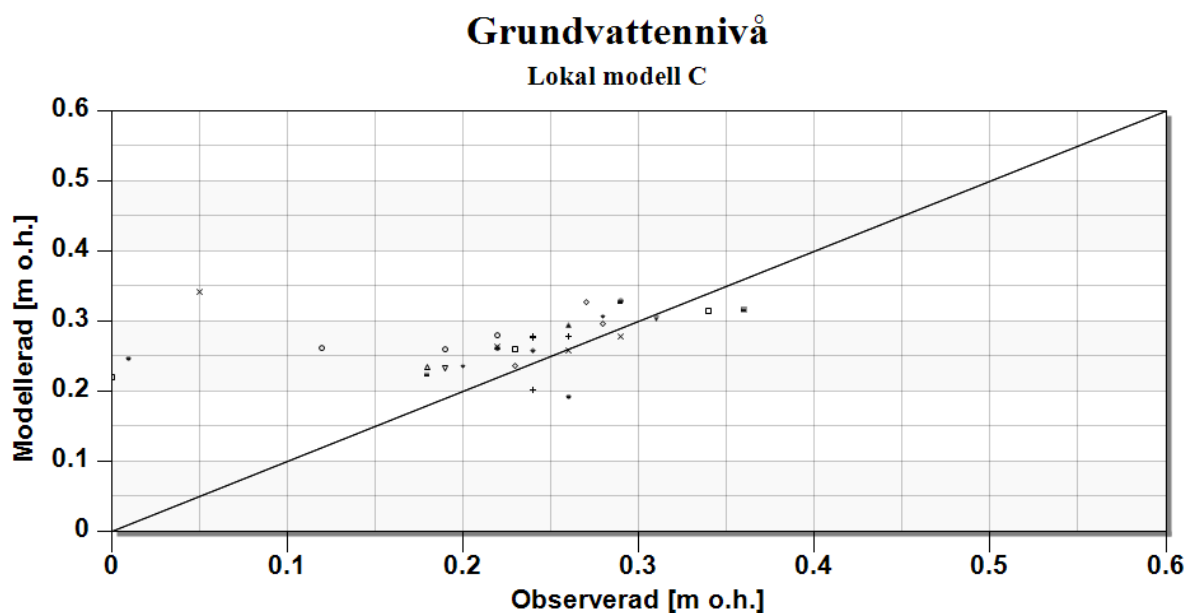


Figur 9.9: Kalibreringsgraf för modell B för flödessimuleringen utan brunnar. Linjen motsvarar modellerade värden och prickarna uppmätta grundvattennivåer.

Modell C

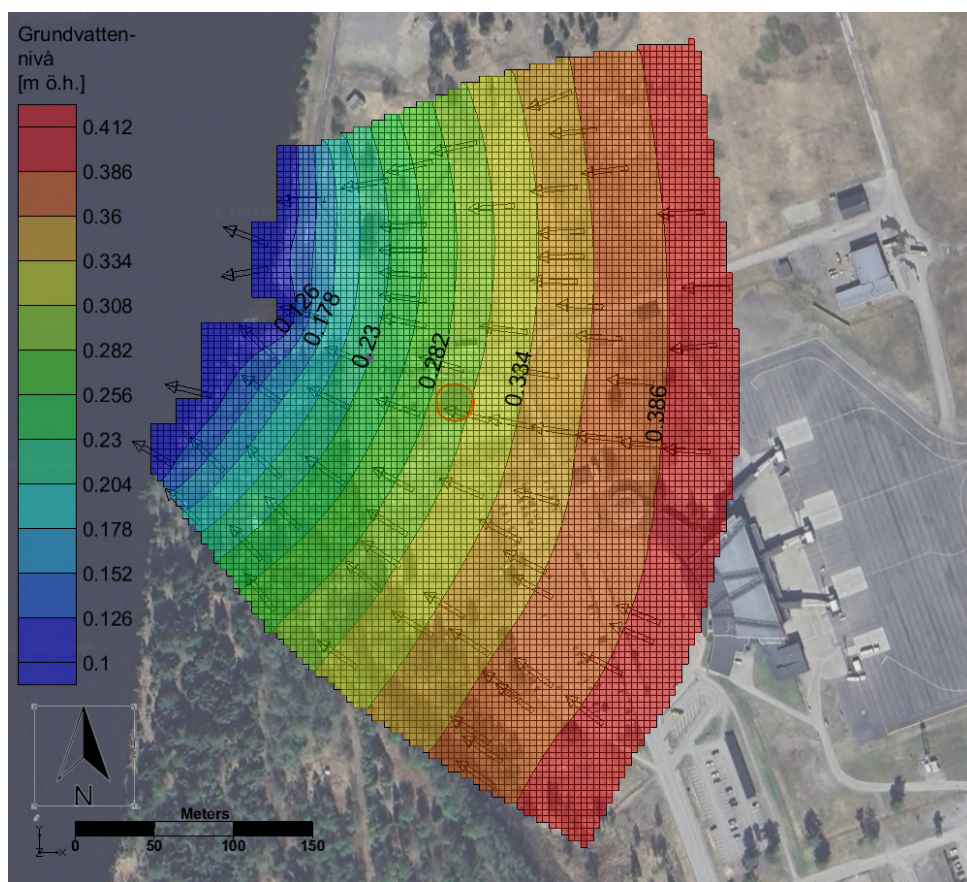


Figur 9.10: Modellerad grundvattennivå i flödessimulering utan brunnar i den lokala modellen C.

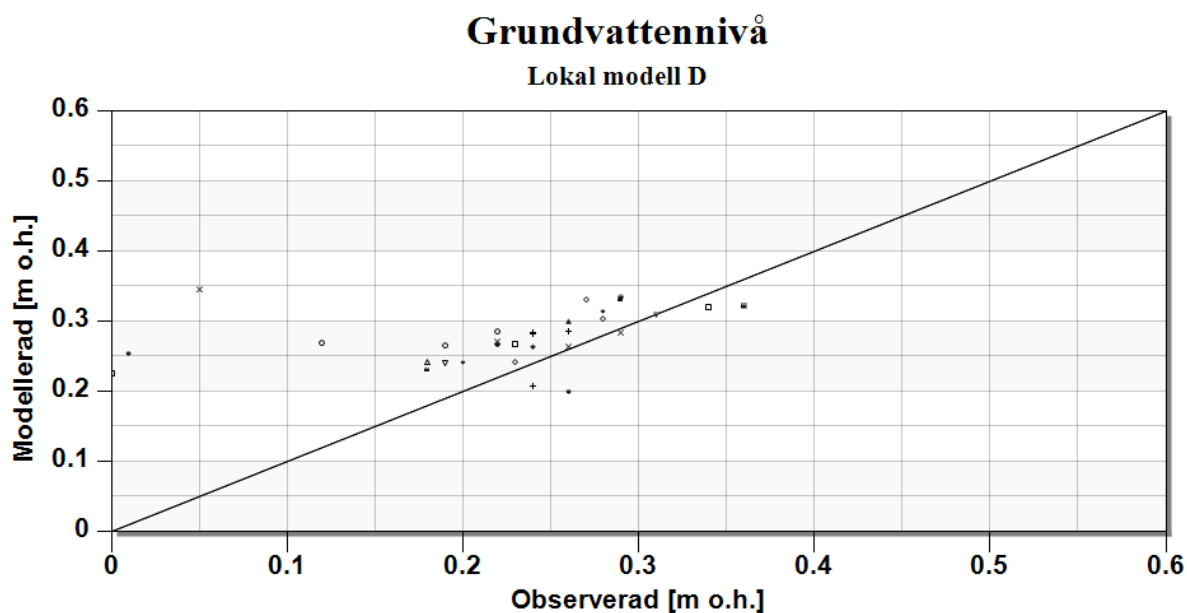


Figur 9.11: Kalibreringsgraf för modell C för flödessimuleringen utan brunnar. Linjen motsvarar modellerade värden och prickarna uppmätta grundvattennivåer.

Modell D

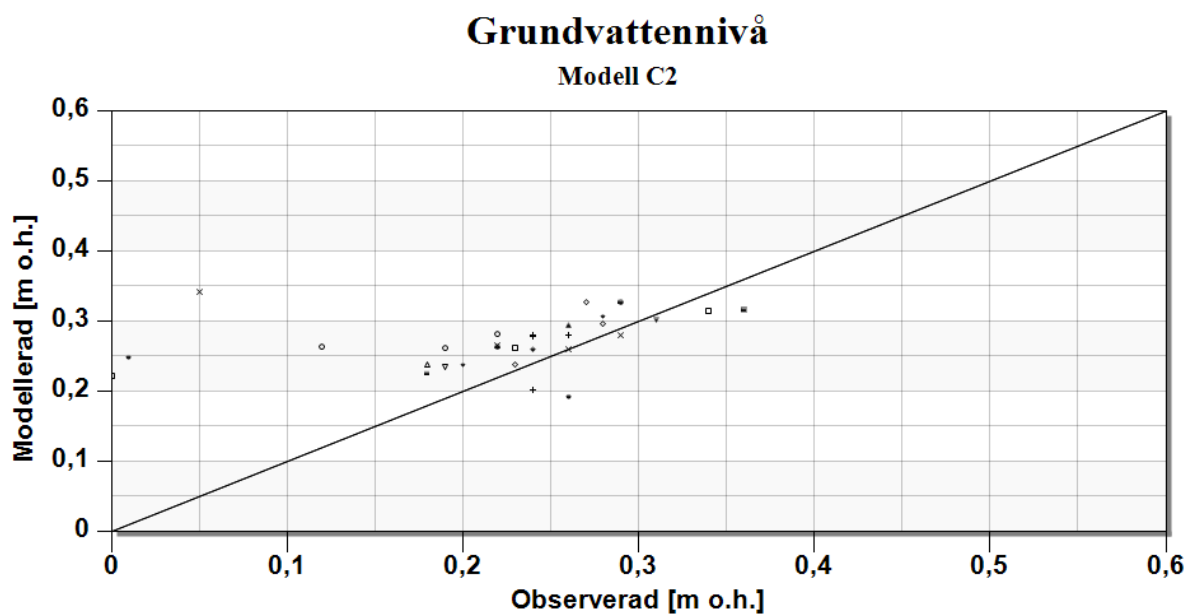


Figur 9.12: Modellerad grundvattennivå i flödessimulering utan brunnar i den lokala modellen D.



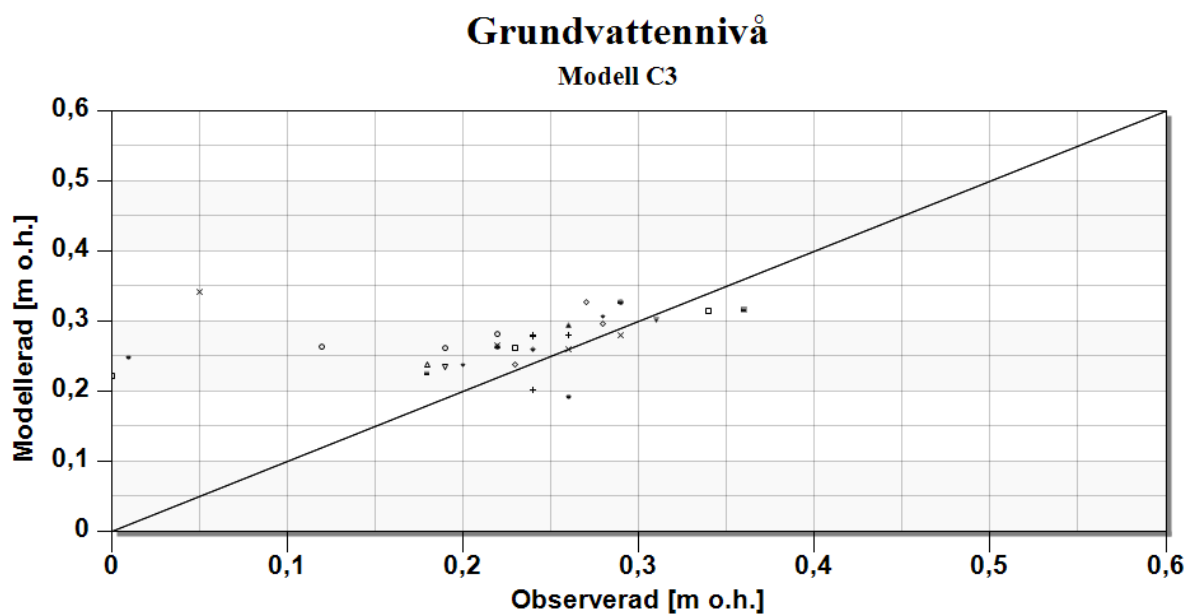
Figur 9.13: Kalibreringsgraf för modell D för flödessimuleringen utan brunnar. Linjen motsvarar modellerade värden och prickarna uppmätta grundvattennivåer.

Modell C2



Figur 9.14: Kalibreringsgraf för modell C2 för flödessimuleringen utan brunnar. Linjen motsvarar modellerade värden och prickarna uppmätta grundvattennivåer.

Modell C3



Figur 9.15: Kalibreringsgraf för modell C3 för flödessimuleringen utan brunnar. Linjen motsvarar modellerade värden och prickarna uppmätta grundvattennivåer.

Sammanfattning av fel

I tabell 9.6 sammanfattas olika statistiska mått på de modellerade felen för varje lokal modell. Tabellen visar fel i simuleringarna mot de uppmätta grundvattennivåer som definierats i observationspunkter i modellerna.

Tabell 9.6: Sammanfattning av statistiska mått på det modellerade felet i flödessimuleringar utan brunnar.

	A	B	C	D	C2	C3
Mean Residual (Head) [m]	-0,045	-0,048	-0,046	-0,052	-0,047	-0,047
Mean Absolute Residual (Head)	0,059	0,060	0,059	0,062	0,060	0,060
Root Mean Squared Residual (Head)	0,089	0,091	0,090	0,093	0,090	0,090

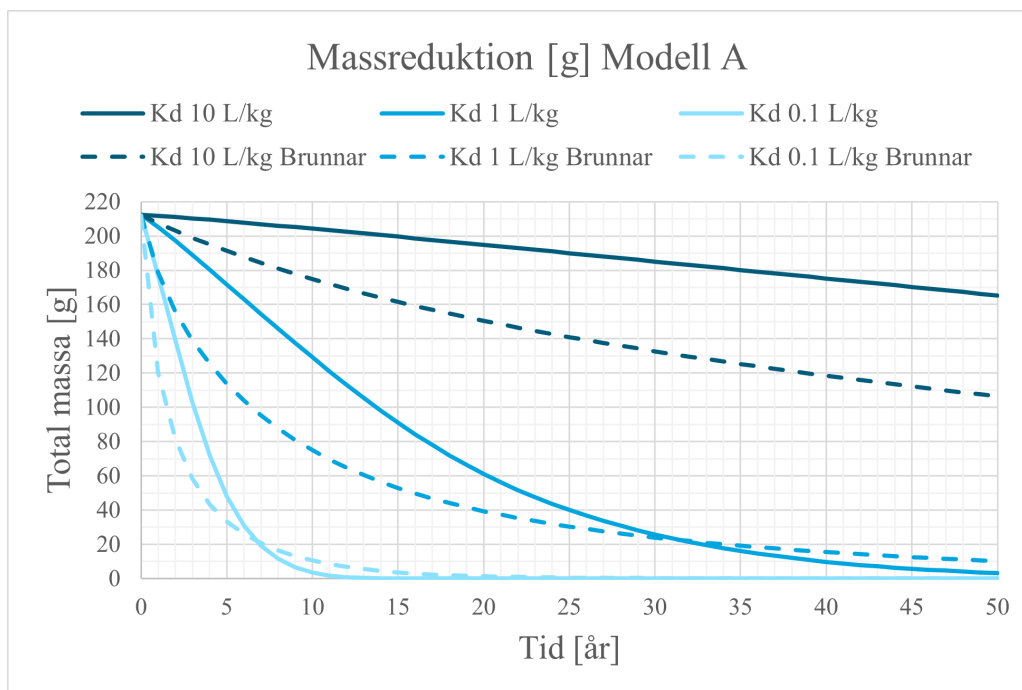
9.5.2 Massreduktion av PFAS per brunnscenario

För varje brunnscenario plottades den totala massan i systemet för varje definierat ämne ($K_d = 10$, $K_d = 1$ och $K_d = 0,1$ L/kg) med och utan brunnar över simuleringstiden 50 år. Den totala massan plottades både i enheten gram och i enheten procent.

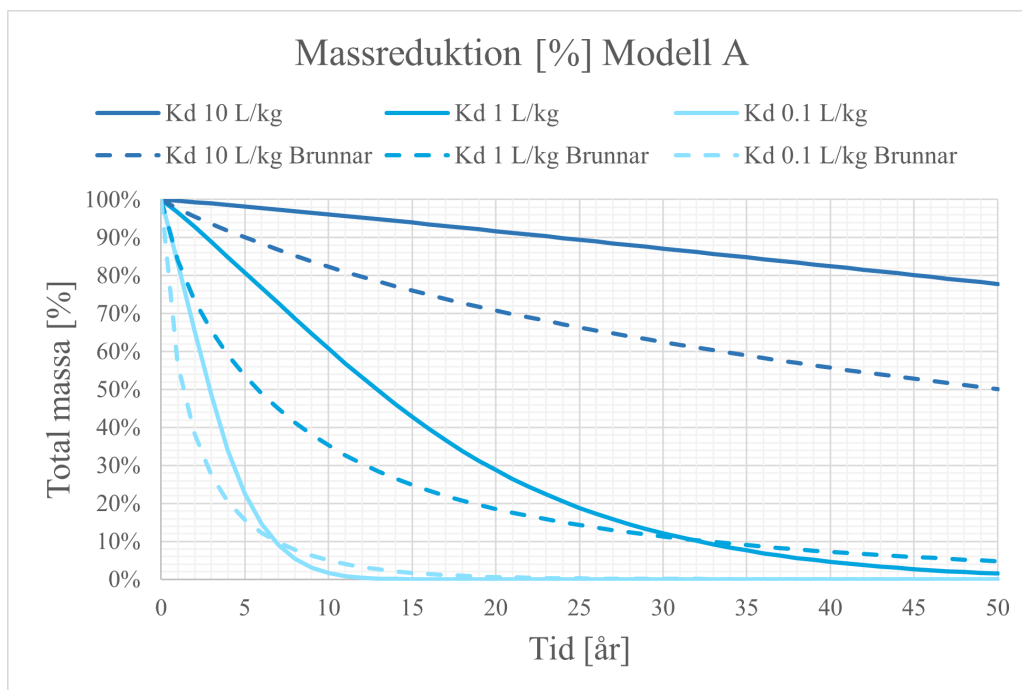
Modell A

I figur 9.16 presenteras massreduktionen i gram i modell A. Streckade linjer visar de simuleringar som gjordes med brunnar, heldragna linjer visar de simuleringar som gjorts utan brunnar. Massan minskar snabbare med brunnar jämfört med utan brunnar för samtliga K_d -värden. Den minskar snabbast för $K_d = 0,1$ L/kg och långsammast för $K_d = 10$ L/kg.

Den procentuella förändringen av massa över tid i modell A presenteras i figur 9.17. I början av simuleringsperioden är massan 100 % och minskar sedan gradvis. Den minskar snabbast för $K_d = 0,1$ L/kg och långsammast för $K_d = 10$ L/kg. Minskningen går snabbare med brunnar i jämförelse med utan brunnar.

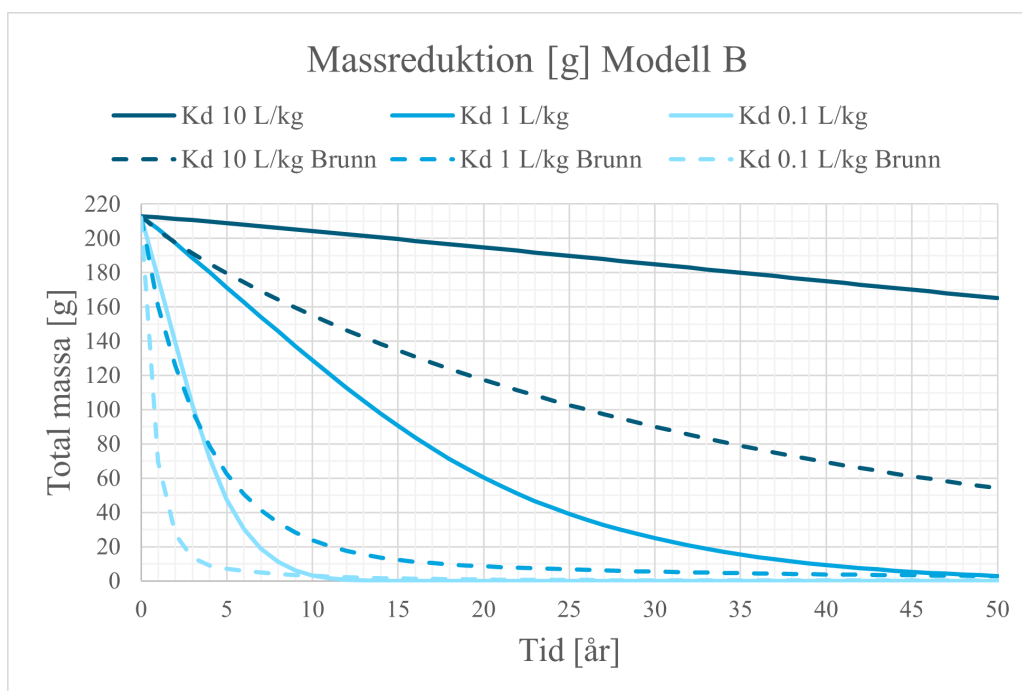


Figur 9.16: Förändring av total massa PFAS [g] i modell A över simuleringstiden om 50 år för $K_d = 10$ L/kg, $K_d = 1$ L/kg och $K_d = 0,1$ L/kg. Heldragna linjer representerar simulering utan brunnar, streckade linjer med brunnar.

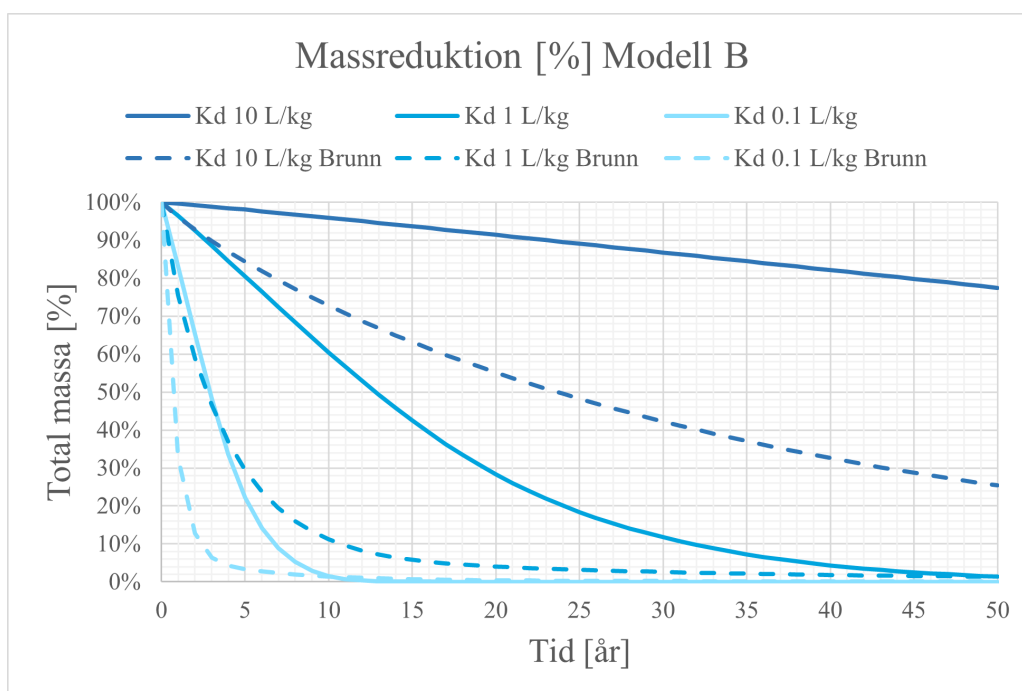


Figur 9.17: Förändring av total massa PFAS [%] i modell A över simuleringstiden om 50 år för $K_d = 10$ L/kg (mörkblå), $K_d = 1$ L/kg (mellanblå) och $K_d = 0,1$ L/kg (ljusblå). Heldragna linjer representerar simulering utan brunnar, streckade linjer med brunnar.

Modell B

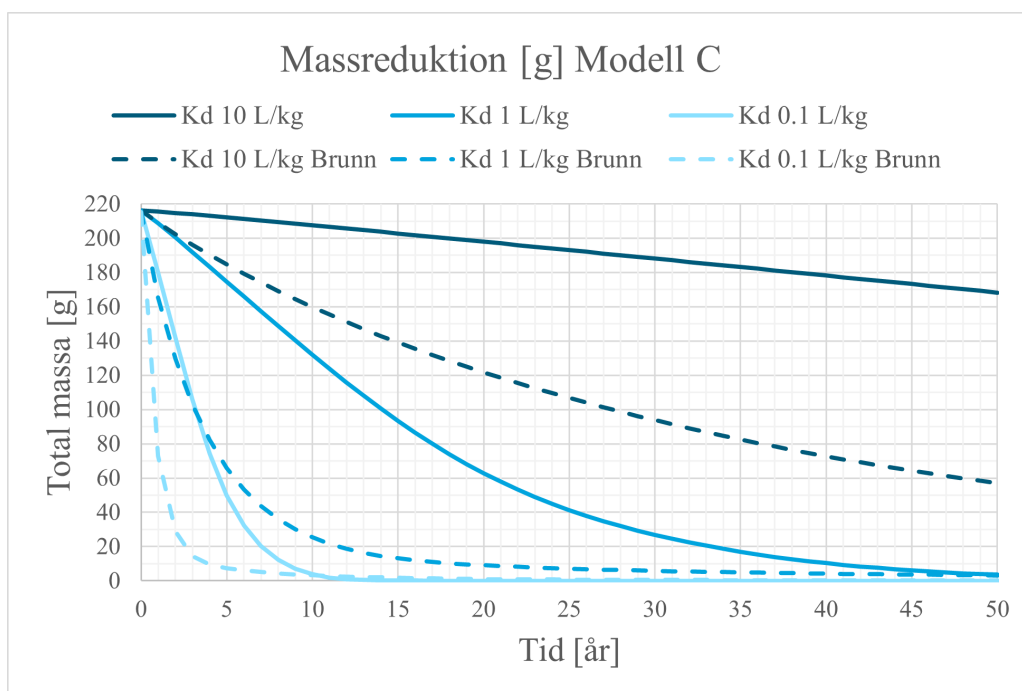


Figur 9.18: Förändring av total massa PFAS [g] i modell B över simuleringstiden om 50 år för $K_d = 10$ L/kg, $K_d = 1$ L/kg och $K_d = 0,1$ L/kg. Heldragna linjer representerar simulering utan brunnar, streckade linjer med brunnar.



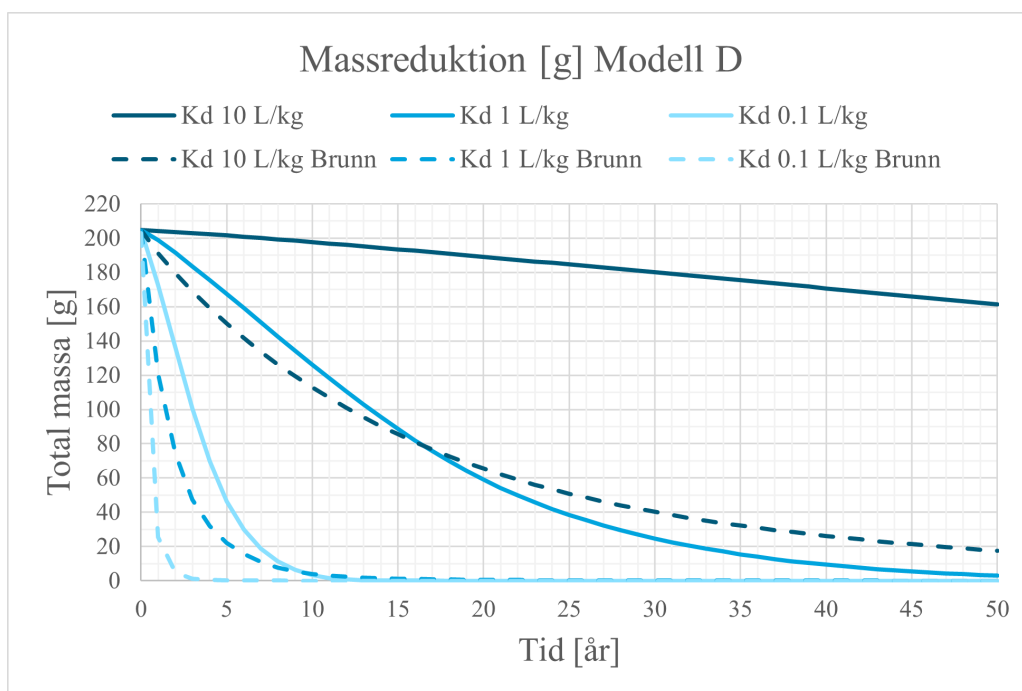
Figur 9.19: Förändring av total massa PFAS [%] i modell B över simuleringstiden om 50 år för $K_d = 10$ L/kg (mörkblå), $K_d = 1$ L/kg (mellanblå) och $K_d = 0,1$ L/kg (ljusblå). Heldragna linjer representerar simulering utan brunnar, streckade linjer med brunnar.

Modell C

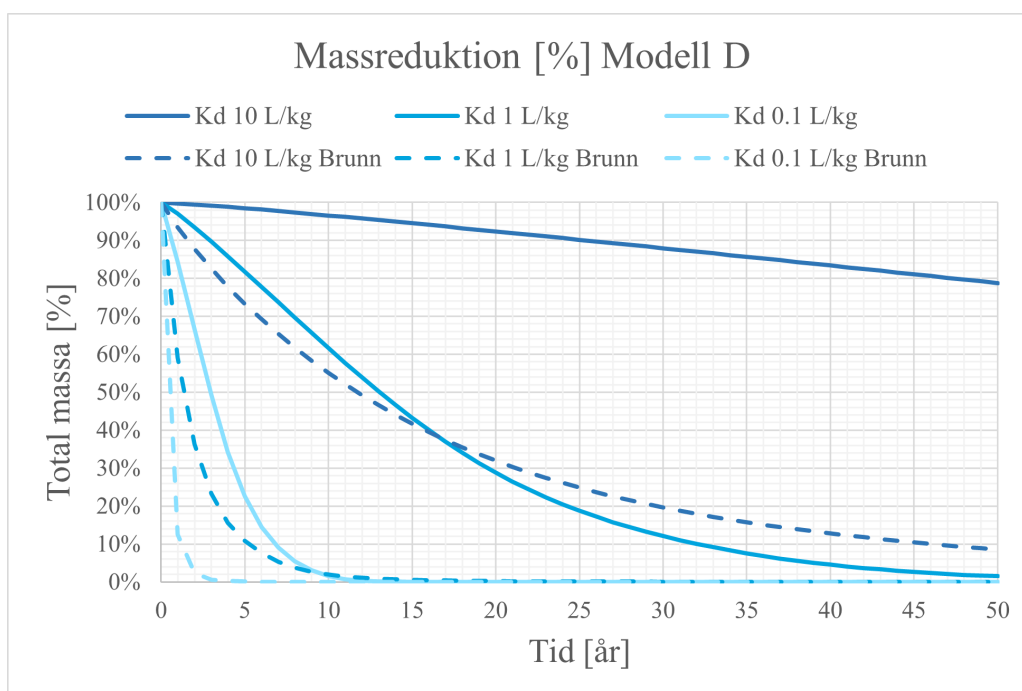


Figur 9.20: Förändring av total massa PFAS [g] i modell C över simuleringstiden om 50 år för $K_d = 10$ L/kg, $K_d = 1$ L/kg och $K_d = 0,1$ L/kg. Heldragna linjer representerar simulering utan brunnar, streckade linjer med brunnar.

Modell D

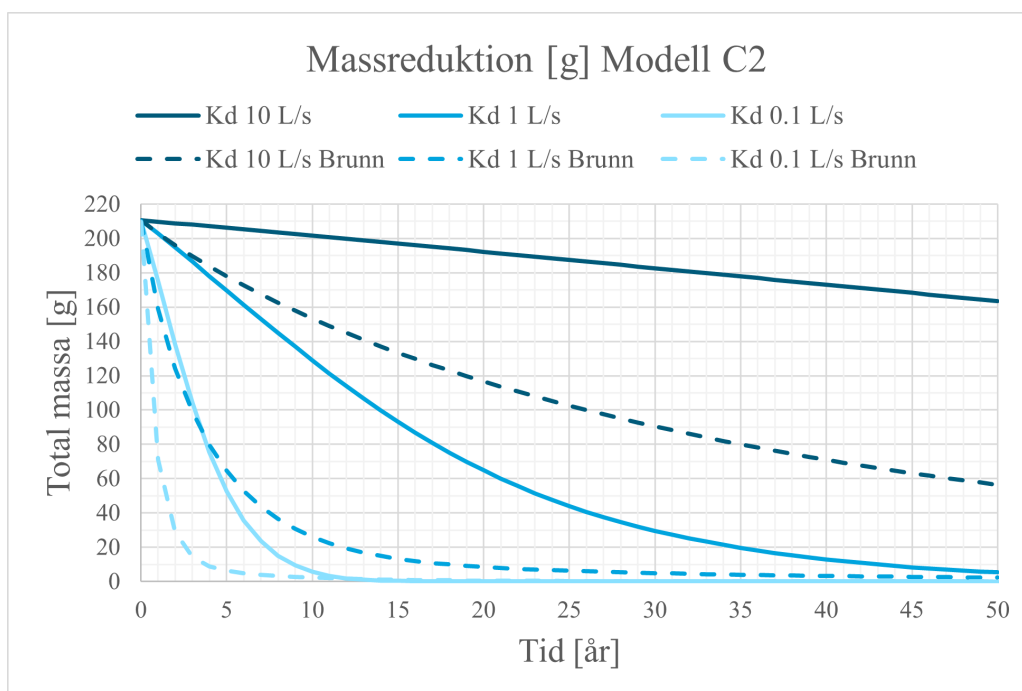


Figur 9.21: Förändring av total massa PFAS [g] i modell D över simuleringstiden om 50 år för $K_d = 10$ L/kg, $K_d = 1$ L/kg och $K_d = 0,1$ L/kg. Heldragna linjer representerar simulering utan brunnar, streckade linjer med brunnar.



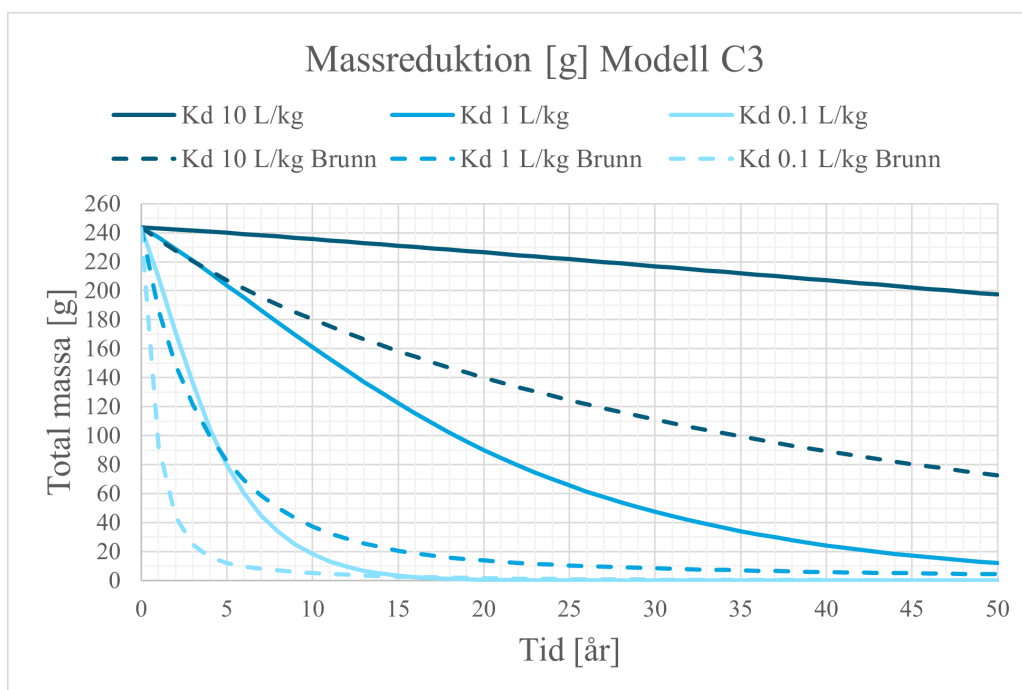
Figur 9.22: Förändring av total massa PFAS [%] i modell D över simuleringstiden om 50 år för $K_d = 10$ L/kg (mörkblå), $K_d = 1$ L/kg (mellanblå) och $K_d = 0,1$ L/kg (ljusblå). Heldragna linjer representerar simulering utan brunnar, streckade linjer med brunnar.

Modell C2



Figur 9.23: Förändring av total massa PFAS [g] i modell C2 över simuleringstiden om 50 år för $K_d = 10$ L/kg, $K_d = 1$ L/kg och $K_d = 0,1$ L/kg. Heldragna linjer representerar simulering utan brunnar, streckade linjer med brunnar.

Modell C3



Figur 9.24: Förändring av total massa PFAS [g] i modell C3 över simuleringstiden om 50 år för $K_d = 10$ L/kg, $K_d = 1$ L/kg och $K_d = 0,1$ L/kg. Heldragna linjer representerar simulering utan brunnar, streckade linjer med brunnar.