R-10-43

Storregional grundvattenmodellering – en känslighetsstudie av några utvalda konceptuella beskrivningar och förenklingar

Lars O. Ericsson, Lars O. Ericsson Consulting AB

Johan Holmén, Golder Associates

December 2010

Svensk Kärnbränslehantering AB Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co

Box 250, SE-101 24 Stockholm Phone +46 8 459 84 00



ISSN 1402-3091 SKB R-10-43

Storregional grundvattenmodellering – en känslighetsstudie av några utvalda konceptuella beskrivningar och förenklingar

Lars O. Ericsson, Lars O. Ericsson Consulting AB

Johan Holmén, Golder Associates

December 2010

Nyckelord: SKBdoc 1257155, Regionalt grundvattenflöde, Grundvattenmodellering.

Denna rapport har gjorts på uppdrag av SKB. Slutsatser och framförda åsikter i rapporten är författarnas egna. SKB kan dra andra slutsatser, baserade på flera litteraturkällor och/eller expertsynpunkter.

En pdf-version av rapporten kan laddas ner från www.skb.se.

Förord

Omfattande utredningsinsatser om grundvattnets in- och utströmningsförhållanden i storregionalt perspektiv har genom åren genomförts av kärnavfallsorganisationer i olika länder. I Sverige har diskussionen framför allt handlat om avfallslagrets lokalisering med avseende på avståndet till kustområden och betydelsen av tänkbara storregionala flödesmönster.

Mot bakgrund av Statens strålskyddsinstituts (SSI) och Statens kärnkraftsinspektions (SKI) gemensamma bedömningar från granskningen av SKB:s redovisning av storregional grundvattenmodellering för östra Småland, har SKB låtit genomföra en utredning som ska ses som en komplettering till "Ericsson L O, Holmén J, Rhén I, Blomquist N, 2006. Storregional grundvattenmodellering – fördjupad analys av flödesförhållanden i östra Småland: Jämförelse av olika konceptuella beskrivningar. SKB R-06-64, Svensk Kärnbränslehantering AB".

Utredningen har genomförts av en projektgrupp bestående av Lars O. Ericsson (Lars O. Ericsson Consulting AB), Johan Holmén (Golder Associates), Jan-Olof Selroos (SKB) och Johan Andersson (J A Streamflow). Beställarens ombud har varit Anders Ström (SKB). Projektets metodik och resultat har diskuterats vid SKB:s arbetsgrupp för platsspecifik hydrogeologisk modellering, den s k HydroNetgruppen.

Stockholm i december 2010

Lars O. Ericsson

Innehåll

Samn	nanfattning	7
Execu	utive summary	23
1 1.1 1.2 1.3 1.4	Inledning och syfte Bakgrund Syfte Omfattning Rapportens disposition	39 39 40 40 41
2	Det storregionala området	43
3 3.1 3.2 3.3	Beräkningskod och konceptuell modell Den nya modellen och den tidigare modellen – en jämförelse Formell matematisk modell Topografiska vattendelare, modellområdets avgränsning och modellområdets	47 47 48
3.4 3.5	Beräkningsnät Rand- och initialvillkor 3.5.1 Randvillkor vid modellens sidor 3.5.2 Randvillkor vid modellens botten 3.5.3 Randvillkor vid modellens övre yta	50 53 53 53 54 54
3.6 3.7 3.8 3.9 3.10 3.11 3.12 3.13	 3.5.4 Randvillkor vid simuleringar av densitetsberoende flöde Kvartära avlagringar Litologiska enheter Deformationszoner Diabasgångar Genombrottstid, transportmotstånd och porositet Lokal heterogenitet Dispersionslängd och diffusivitet Metod för beräkning av flödesvägar 	55 58 59 61 63 64 65 65 65
4 4.1 4.2 4.3 4.4	Frågeställningar och beräkningsfallens egenskaper Flödesvägarnas egenskaper Frågeställningarna Beräkningsfall Basfallet	
5 5.1 5.2 5.3	Topprandvillkorets betydelse Bakgrund Beräkningsfall och materialegenskaper Simuleringar och resultat	
6 6.1 6.2 6.3	Betydelsen av modellens djupgående och densitetsdrivet flödeBakgrundBeräkningsfallSimuleringar och resultat6.3.1Längder6.3.2Genombrottstider6.3.3Specifika flödet vid startpunkterna6.3.4Största djup som de virtuella partiklarna når under flödesvägarna6.3.5Salinitet vid startpositionerna6.3.6Salinitet längs med flödesvägarnaSlutsats	81 81 81 82 83 83 83 84 84 84 84

7	Initialvillkorets betydelse (glacial simulering)				
7.1	Bakgrund Beskrivning av beräkningsmetod och simulering av glacial tidsperiod				
7.3	Simule	ring och jämförelse med resultat från ursprungligt initialvillkor	93		
7.4	Slutsat	3	98		
8	Betyde	lsen av modellens vertikala randvillkor	99		
8.1	Bakgru	nd ingefall	99		
8.3	Simule	ringar och resultat	100		
8.4	Slutsat	5	104		
9	Ofullständiga och konceptuellt osäkra flödesvägar				
9.1	Bakgru	nd	105		
9.2 9.3	Simule	ringar och resultat	106		
10	Flödes	vägar från ett fördelaktigt tolkat område och från Laxemar	111		
10.1	Bakgru	nd	111		
10.2	De stuc	lerade områdena	111		
10.3	Simule	ingsiall ringar och resultat	114		
10.5	Slutsat	S	115		
11	Betyde	lsen av heterogenitet i materialegenskaper	119		
11.1	Bakgru	nd	119		
11.2	Beräkn Simule	ingstall ringar och resultat	119		
12	Dotydo	lson av strandlinioförskiutning	120		
12.1	Bakgru	nd	123		
12.2	Strandl	injeförskjutning, landhöjning	125		
12.3	Beräkn	ingsfall	127		
12.4	Beräkn	ingsmetodik för analysen av flödesvägarna	129		
12.6	Resulta	it	131		
12.7	Flödes	vägarnas förändringshastighet kontra hastigheten för det djupa	142		
12.8	Slutsat	s	142		
13	Visuali	sering av beräknade flödesvägar och salinitet	145		
14	Slutsat	ser	151		
14.1	4.1 Specifika slutsatser				
14.2	Overgripande slutsatser		153		
15	Refere	nser	155		
Appendix A		Metod för att generera lokal heterogenitet			
Appe	ndix B	Visualisering av salinitet för basfallet	163		
Appendix C		Dispersion coefficient			
Appendix D		Densitetsdrivet flöde och flödesvägar i vertikala sektioner			

Sammanfattning

Bakgrund

Grundvattnets in- och utströmning har varit föremål för såväl SKB:s utredningsverksamhet som de granskande myndigheternas intresse. Från granskningen av SKB:s redovisning av storregional grundvattenmodellering och mot bakgrund av SSI:s och SKI:s gemensamma bedömningar /SSI-SKI 2007/ samt SSI:s Rapport 07:11 /Dverstorp 2007/, har SKB låtit genomföra ett projekt som ska ses som en komplettering till "Ericsson L O, Holmén J, Rhén I, Blomquist N, 2006. Storregional grundvattenmodellering – fördjupad analys av flödesförhållanden i östra Småland: Jämförelse av olika konceptuella beskrivningar. SKB R-06-64, Svensk Kärnbränslehantering AB".

Från den nämnda SKB-rapporten och med den metodik som tillämpades, drogs följande generella slutsatser avseende det regionala flödesmönstret:

- Störst betydelse för det regionala flödesmönstret från förvarsdjup har topografin. Utströmningsområdena förekommer främst i topografins lägre delar och längs med dalgångar. Inströmningsområdena förekommer på höjderna. Den topografiska undulationen är av större betydelse än
 konduktivitetsfältets egenskaper. Olika litologiska enheter, regionala deformationszoner, lokal
 heterogenitet, kvartära avlagringar etc är av mindre betydelse än topografins undulation.
- Grundvattnets flödesmönster, för områden som beskrivs och analyseras med mest realistiska förutsättningar, kan beskrivas som en huvudsakligen lokal flödesprocess. Medianlängden på flödesvägarna är enligt rapporten av storleksordningen 2 km och andelen storregionala flödesvägar (längre än 10 km) är mycket liten.
- Om den hydrauliska konduktiviteten avtar mot djupet erhålls flödesceller med mer begränsad utsträckning än om så inte vore fallet.
- Anisotropi i konduktivitetsfältet, med större horisontell hydraulisk konduktivitet än vertikal, ger relativt sett större flödesceller och långa flödesvägar förlängs.
- Anisotropi i konduktivitetsfältet, med större vertikal hydraulisk konduktivitet än horisontell, ger relativt sett mer mindre flödesceller och flödesmönstret blir mer lokalt.
- Djupavtagande och horisontell anisotropi dominerar över litologiska enheters, deformationszoners, diabasgångars och kvartära avlagringarnas påverkan på flödesmönstret.
- Deformationszoner och diabasgångar har betydelse för det lokala flödesmönstret men liten betydelse för det regionala.
- Storregionala horisontella deformationszoner är ej tillräckligt hydrauliskt betydelsefulla för att påverka det storskaliga flödesmönstret.
- Modeller med lokal heterogenitet (i ett regionalt perspektiv) uppvisar samma allmänna flödesmönster som modeller utan lokal heterogenitet, men bedöms innebära att flödesvägar och genombrottstider ökar med cirka 30 % (denna ökning varierar med analysens skala).

I SKB-rapporten /Ericsson et al. 2006/ gavs en generell konklusion att förvarsområden i inlandet inte nödvändigtvis har längre genombrottstider, längre flödeslängder eller mindre specifika flöden än förvarsområden närmare kustlinjen. Studien visade sammanfattningsvis att ökad konceptuell komplexitet, mer verklighetstrogna förhållanden, ger ökad tendens till att mer lokala flödesceller utvecklas. De genomförda modelleringarna visade inte att ett inlandsförvar skulle vara lämpligare än ett kustnära när verklighetens geohydrologiska förutsättningar vägs in i beräkningarna. Grund-vattenflödets storlek beror t ex i hög utsträckning på den lokala vattengenomsläppligheten. Vattengenomsläppligheten varierar inom vida gränser och ger sannolikt, lokalt sett, mycket större flödesvariationer än vad de olika systemegenskaperna gav i studien.

Vissa förvarsområden med potentiellt intressanta flödesmönster kunde i studien /Ericsson et al. 2006/ identifieras med viss konfidens, men om också grundvattenflödets storlek ska inkluderas i en analys blir osäkerheterna betydligt större. Grundvattenflödet beror, enligt nämnda studie, i hög utsträckning på den lokala vattengenomsläppligheten, vilken måste bestämmas i förvarsplatsens lokala perspektiv genom borrhålsundersökningar. Statens strålskyddsinstituts Rapport 07:11 /Dverstorp 2007/ utvecklade och sammanfattade myndigheternas granskningssynpunkter på SKB:s storregionala grundvattenmodellering för östra Småland /Ericsson et al. 2006/. Granskningen genomfördes inom det samråd som SKB enligt ett regeringsbeslut har hållit med SSI och Statens kärnkraftinspektion (SKI) (efter 2008-07-01, Strålsäkerhetsmyndigheten) om platsundersökningarna för ett kärnbränsleförvar. Detta har inneburit att synpunkterna i myndighetsgranskningen har betraktats som ett allmänt råd till SKB. SSI:s bedömning var "att SKB:s studie var väl genomförd och att den bidrar till en ökad förståelse för olika faktorer av betydelse för grundvattnets strömningsmönster. SSI ansåg dock att utvärderingen av beräkningsresultaten var otillräcklig för att kunna dra entydiga slutsatser om betydelsen av storregional grundvattenströmning som lokaliseringsfaktor för ett slutförvar" /Dverstorp 2007/.

Myndigheternas viktigaste invändning var att SKB:s studie /Ericsson et al. 2006/ inte utvärderade och jämförde specifika platser/regioner i modellvolymen. SSI identifierade i sin granskning /Dverstorp 2007/ vissa antaganden och modellförenklingar som skulle kunna påverka andelen beräknade långa transportvägar och transporttider och ansåg att dessa faktorer borde utredas ytter-ligare för att stärka trovärdigheten i beräkningsresultaten. De antaganden och modellförenklingar som man önskade belysta var: modelldjup, topografins betydelse, grundvattenytans läge, modellens sidoränder, diskretisering, representation av geologiska strukturer samt bestämningar av flödesvägar. SSI önskade också en diskussion om det finns uppenbara lokala platsegenskaper som skulle kunna "förstöra" en, i ett regionalt perspektiv, plats med goda egenskaper och om dessa platsegenskaper kan identifieras utifrån tillgängliga data.

Studiens mål

Föreliggande rapport har som mål att:

• Redovisa en kompletterade och fördjupad utvärdering av vissa konceptuella förenklingar, beskrivningar och modellosäkerheter vid regional grundvattenmodellering, som i första hand gäller modelldjup, topografi, grundvattenytans läge och modellränder.

Genomförandet har baserats på geovetenskapligt tillgängliga datasammanställningar från Smålandsregionen men där olika konceptuella antaganden analyserats.

Vidare har projektet haft som mål att:

• Redovisa en jämförelse av hydrogeologiska förhållanden mellan specifika platser inom förstudiekommunerna Oskarshamn och Hultsfred genom utökad utvärdering av befintliga beräkningsresultat från analysen av regionala flödesförhållanden i östra Småland /Ericsson et al. 2006/.

Följande frågeställningar har analyserats:

- Topprandvillkoret och flödesvägarnas egenskaper.
- Modellens djup, densitetsdrivet flöde och flödesvägarnas egenskaper.
- Alternativt initialvillkor: Betydelsen av att använda ett initialvillkor som baseras på en approximativ simulering av en glacial cykel.
- Betydelsen av modellens vertikala randvillkor (täta väggar) vid simulering av flödesvägar.
- Modellens transienta beteende, konceptuellt osäkra flödesvägar och ofullständiga flödesvägar.
- Jämförelse av egenskaper för (i) flödesvägar från ett utvalt och tolkat som fördelaktigt område med egenskaper för (ii) flödesvägar från det regionala undersökningsområdet vid Laxemar, Oskarshamns kommun.
- Analys av variationen i flödesvägarnas egenskaper från olika förvarsområden.
- Strandlinjeförskjutning och flödesvägar från utvalda områden.
- En visualisering av salinitet och flödesvägar inom det storregionala området.

Ovanstående aspekter har studerats i ett antal olika beräkningsfall med avseende på varierande modellegenskaper. De studerade aspekterna med varierade modellegenskaper framgår i tabell S-1.

Tabell S-1. Nedanstående matris visar vilka modellegenskaper som varierats i respektive studerad aspekt.

	 Stationära förhållanden 	 Transienta förhållanden 	Homogen modell med djupavtagande genom- släpplighet	Basfallet. (fall 51)	Lokal hetero- genitet med avseende på genom- släpplighet
	 Inga densitets- effekter. Ingen strandlinje- förskjutning 	 Densitets- effekter. 		Olika litologiska enheter och olika kvartära avlagringar	
Studerad aspekt		 Strandlinje- förskjutning 			
Topprandvillkor. Kap 5	Х		Х	х	
Modellens djup. Kap 6	Х	Х		Х	
Alt. initialvillkor. Kap 7		Х		Х	
Modellens sidor. Vertikala randvillkor. Kap 8		Х	Х		
Ofullständiga och konceptuellt osäkra flödesvägar. Kap 9		Х		Х	
Jämförelse av två områden. Kap 10		Х		Х	Х
Heterogenitet i flödesvägar- nas egenskaper. Kap 11		Х		Х	Х
Strandlinjeförskjutning och flödesvägarnas egenskaper. Kap 12	х			Х	
Visualisering av flödesvägar och salinitet. Kap 13	Х	Х		Х	
Visualisering av salinitet. Appendix B.		Х		х	

Liksom i den tidigare studien, /Ericsson et al. 2006/, har jämförelser gjorts mot ett basfall eller referensfall. Modellens basfall (benämnt fall 51) har i studien definierats som:

- En stationär modell utgör referens. Vissa variationsfall med densitetsstyrda flöden utgör kompletterande transienta referensfall.
- Undulerande topografi enligt höjddatabas med en upplösning av 50 m.
- Modellbotten på –6 000 m ö h.
- Olika litologiska enheter är inkluderade med djupavtagande hydraulisk konduktivitet K. Vid djupet 67 m (och ovanför) är K-värdet lika med medelvärdet i SGU:s brunnsarkiv för varje studerad litologisk enhet. Trend för djupavtagande enligt platsundersökningarna vid Laxemar, Oskarshamn.
- Deformationszoner med djupavtagande K-värden enligt platsundersökningarna vid Laxemar, Oskarshamn.
- Diabasgångar med egenskaper som deformationszonerna.

Det som skiljer basfallet i denna studie från den tidigare /Ericsson et al. 2006/ är att flödesrandvillkor (infiltration) tillämpas i stället för topografistyrda gradienter som topprandvillkor. Basfallets modelldjup är 6 000 m i stället för tidigare studiens modelldjup av 2 500 m.

Det studerade området

Det aktiva området i den numeriska modellen utgörs liksom i den tidigare studien, /Ericsson et al. 2006/, av fem avrinningsområden i östra Småland. Dessutom inkluderar modellen ett stycke av havet (havsbotten) utanför kustlinjen. Grundvattenmodellen representerar ett mycket stort område, utbredningen är i riktning nord-syd cirka 79 km och i riktning öst-väst cirka 133 km. Se figur S-1.



Figur S-1. Höjdmodell över det storregionala området (ur GSD-Höjddatabasen © Lantmäteriverket Gävle 2001, Medgivande M2001/5268). Av sekretesskäl redovisas inte batymetrin.

Den matematiska modell som använts i denna studie är direkt baserad på den modell som användes i den tidigare studien av det regionala flödesmönstret i östra Småland. Samma område studeras, samma topografi, samma deformationszoner, samma litologiska enheter, samma kvartärgeologiska enheter, samma genomsläpplighet och porositet etc. Se figur S-2. För en detaljerad presentation av bakgrundsdata till den upprättade modellen hänvisas till rapport /Ericsson et al. 2006/.

Numerisk beräkningmodell

De nya modellerna är upprättade med modellkoden Geoan /Holmén 2010/. De tidigare modellerna upprättades med modellkoden DarcyTools. Båda koderna använder sig av samma grundläggande matematiska formulering, finita differenser med en beräkningsnod i centrum av varje beräkningscell. Eftersom den grundläggande matematiska formuleringen är densamma i de båda beräkningskoderna är en överföring av modellegenskaper mellan de båda koderna en relativt okomplicerad operation. Geoan valdes huvudsakligen av fyra skäl: (i) Det ansågs önskvärt att använda den metod som finns i Geoan för att beräkna den fria vattenytans position, när topprandvillkoret är ett flödesrandvillkor med ytvattenflöden; (ii) Beräkningsnätet i Geoan behöver inte vara definierat med strikt horisontala lager (som i den tidigare modellen), i den övre delen av den nya modellen följer beräkningsnätets lager topografins undulation, vilket är en fördel när den fria vattenytans position ska beräknas; (iii) Geoan innehåller rutiner för att effektivt beräkna flödesvägar, och kan dessutom separera mellan numeriskt välbestämda och numeriskt ofullständiga flödesvägar, och kan dessutom inkludera de numeriskt ofullständiga flödesvägarna i analysen; (iv) Alla rutiner för att statistiskt analysera flödesvägarna finns dessutom i Geoan.



Figur S-2. Modellens geometriska form och horisontal utbredning av litologiska enheter som de är definierade i modellen. Färger och koderna (K-group) representerar olika litologiska enheter. I legenden ovan så står koden till höger om färgen. Koderna förklaras i tabell 2-1 i rapportens huvudtext.

I denna studie analyseras flödesvägarna genom grundvattensystemet med hjälp av simulerade virtuella partiklar. Dessa partiklar följer grundvattenflödena genom modellen (s k partikelspårning). Flödesvägarna som skapats i modellen representerar endast advektiv transport. I nedanstående sektioner redovisas i sammanfattande form genomförandet och resultaten av analyserna av frågeställningarna enligt tabell S-1.

Topprandvillkoret och flödesvägarnas egenskaper

I den tidigare modellen /Ericsson et al. 2006/ definierades trycket utifrån modellens topografi och inga ytvattenflöden förekom, dvs ett tryckrandvillkor. I den tidigare modellen antogs vidare att grundvattenytans position kan approximeras till markytans topografi med undantag för områden med glacifluviala sediment och under havet. Ett flödesrandvillkor med infiltration och ytvattenflöden på toppen av modellen är dock att föredra framför ett tryckrandvillkor, eftersom ett flödesrandvillkor är en bättre approximation av systemets verkliga beteende. Med flödesrandvillkor i den upprättade modellen så beräknar modellen grundvattenytans position, grundvattenbildning och ytvattenflöden utifrån modellens genomsläpplighet, topografi och potentiella grundvattenbildning.

Vid en jämförelse mellan modeller med tryckrandvillkor och flödesrandvillkor erhålls följande generella slutsatser med de utförda simuleringarna:

- Flödesvägarnas längder ökar något då topprandvillkoret är ett flödesrandvillkor.
- Flödesvägarnas genombrottstider ökar något då topprandvillkoret är ett flödesrandvillkor.
- Specifika flödet vid flödesvägarnas startpunkter i förvaret minskar något då topprandvillkoret är ett flödesrandvillkor.



Figur S-3. Förändring av medianen av flödesvägarnas genombrottstider då topprandvillkoret ändras från tryckrandvillkor till flödesrandvillkor, som funktion av den totala horisontala transmissiviteten i de översta 50 m av flödesmedia (i modellen). (Den röda punkten representerar ett referensfall (fall 51) som motsvarar ett basfall i rapport /Ericsson et al. 2006/.)

Jämförelsen mellan tryck- och flödesrandvillkorens modelleringsresultat är beroende av hur genomsläpplighetsegenskaperna ansätts i modellens översta delar (kvartära avlagringar och berggrunden). Figur S-3 exemplifierar förändringen i medianen av flödesvägarnas genombrottstider som funktion av den totala horisontala transmissiviteten i de översta 50 m, om topprandvillkoret ändras från tryckrandvillkor till flödesrandvillkor. För den studerade storregionala modellen, med den topografi som förekommer, är de simulerade förändringarna i genombrottstid större än 10 % om den totala horisontala transmissiviteten i de översta 50 m är större än cirka $1 \cdot 10^{-4}$ m²/s. För referensfallet (fall 51), som också motsvarar basfallet i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/, är emellertid medianvärdet för den totala horisontala transmissiviteten i de översta 50 m lika med 9,1·10⁻⁶ m²/s, vilket är tydligt mindre än det värde då förändringar i flödesvägarnas egenskaper är större än 10 %.

Modellens djup, densitetsdrivet flöde och flödesvägarnas egenskaper

Det tunga saltvattnet på nivåer djupare än förvarsdjup förhindrar till stor del grundvattnets omsättning från att ingå i vidsträckta flödesceller till stora djup. En storregional saltvattenmodell (med densitetsdrivet flöde) som ska användas för att simulera flödesvägar från förvarsdjup behöver därför inte vara 6 km djup (vid en topografi liknande östra Smålands), mycket likartade resultat erhålls för en modell med cirka 3 km djup (se figur S-4).

Det förekommer i modellen att flödesvägar når ner till mycket stort djup, ända ned tills modellens bottennivå (6 km) Dessa flödesvägar utgör dock en mycket ringa andel av alla flödesvägar. För simuleringarna med densitetsdrivet flöde når 99 % av flödesvägarna aldrig djupare än 1 800 m (se figur S-5).

Om syftet är att analysera de allra längsta flödesvägarna, flödesvägar som ligger över den 99 percentilen, blir modellens djup av betydelse eftersom dessa flödesvägar ofta når ned till mycket stora djup. Sådana flödesvägar har emellertid befunnits vara påverkade av en konceptuell och numerisk osäkerhet. Detta diskuteras vidare längre fram i sektionen "Modellens transienta beteende, ofullständiga flödesvägar och konceptuellt osäkra flödesvägar". En rimlig generell slutsats för den storregionala modellen är att flödesvägar som når djupt ner i saltvattnet bör betraktas som mycket osäkra.



Figur S-4. Analys av modeller med olika basnivåer. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas genombrottstider vid olika modelldjup visar likartat beteende.



Figur S-5. Flödesvägar från förvarsdjup utmed ett öst-västlig tvärsnitt för en transient modellering med saltvatten och densitetseffekter (fall 51si1). Flödessituationen avser tiden 2000 AD. Flödesvägarnas startpunkter bildar ett regelbundet mönster på djupet 515 m. Antalet flödesvägar i figuren är 10 000. Dessutom visas i figuren en iso-yta (grön) som representerar salinitet av 4,1 %. Andelen flödesvägar ovanför iso-ytan är 99 %.

Ett alternativt initialvillkors påverkan av flödesvägarnas egenskaper vid transient modellering

I den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/ användes ett initialvillkor vid transient modellering med densitetsstyrda flöden där saliniteten baserades på observerade salthalter i djupa borrhål. Nivån för övergången mellan sött och salt grundvatten relaterades dessutom till topografins nivå, så att lägre nivåer för gränsskiktet erhålls då den topografiska nivån ökar.

Ett antagande om initialtillståndet bör betraktas som en uppskattning av ett okänt tillstånd vid en viss tidpunkt, t ex 10 000 år före nutid. Initialtillståndet är sannolikt inte ett stationärt tillstånd, eftersom det kan vara påverkat av den föregående Weichselnedisningen och dess hydrogeologiska förutsättningar.

En alternativ uppskattning av den initiala situationen vid en modellering av förhållandena från 10 000 år sedan och framåt kan vara att låta modelleringsstarten föregås av en hel föregående glacial period. En sådan starkt förenklad simulering av en nedisning har utförts i denna studie, enbart med syftet att utgöra en känslighetsstudie av en alternativ initial situation för en transient modellering.

Simuleringar av flödesvägar från förvarsdjup har alltså utförts med olika initialvillkor: (i) ett ursprungligt tillämpat initialvillkor och (ii) ett alternativt glacialt initialvillkor. Därefter jämfördes flödesvägarnas statistik. En slutsats som kan dras av jämförelsen av flödesvägarnas statistik är att simuleringar baserade på båda studerade initialvillkoren producerar likartade resultat, dock med följande skillnad. De allra längsta flödesvägarna (över 95 percentilen) blir längre och går något djupare med det alternativa glaciala initialvillkoret, och därmed blir de längsta genombrottstiderna också något längre med det alternativa initialvillkoret.

Följande konceptuella iakttagelse gjordes vid den glaciala simuleringen och med densitetsstyrda flöden: För att det tunga saltvattnet ska ligga på rimligt djup under en glacial simulering, måste transport av salt via den hydrodynamiska dispersionen (hydromekanisk dispersion och diffusion) i den övre delen av modellen t ex de översta 500 m, ej dominera över den advektiva transporten av salt. Om den dispersiva transporten dominerar över den advektiva transporten kommer salthalterna att stiga till höga nivåer, även under glaciala perioder. Orealistiskt höga salthalter erhålls då på ringa djup.

Betydelsen av modellens yttre vertikala ränder (täta väggar) vid simulering av flödesvägar

Modellens yttre vertikala sidor är placerade längs med storregionala topografiska ytvattendelare. Dessa strukturer utgör gränser för ytvattenflöden och det är sannolikt att de också utgör betydelsefulla barriärer för grundvattenflödet. Det är dock möjligt att det i verkligheten sker ett visst mindre grundvattenflöde genom regionala topografiska ytvattendelare, t ex där större sprickzoner skär vattendelaren. I modellen definieras de yttre vertikala sidorna som helt täta och inget grundvattenflöde tillåts alltså passera över dessa gränser.

Simuleringar med modellen indikerar att långa flödesvägar erhålls från startpunkter placerade under topografiska ytvattendelare i modellens inre (inre ytvattendelare), och även för startpunkter längs med modellens sidor (yttre ytvattendelare). Frågan är i vilken utsträckning flödesvägar med startpunkter nära modellens yttre sidor systematiskt och felaktigt påverkas av närheten till det applicerade randvillkoret längs med modellens sidor (täta väggar).

Flödesvägar initierades därför: (i) över hela modellen, (ii) längs med en inre ytvattendelare som förekommer i modellen och (iii) längs med modellens sidor (yttre ytvattendelare).

En jämförelse av statistik från dessa flödesvägar indikerar följande slutsats: De längder, genombrottstider och flöden som beräknats för flödesvägar som initierats längs med modellens yttre sidor är rimliga värden, som inte är kraftigt numeriskt påverkade av det applicerade randvillkoret längs med modellens sidor.

Modellens yttre sidor följer tydliga regionala ytvattendelare. Ett exempel på en mindre tydlig vattendelare är den topografiska ytvattendelaren väster om Laxemar. Denna ytvattendelare är svagt utvecklad och dess betydelse som grundvattendelare har specialstuderats i en särskild studie /Holmén 2008/. Slutsatsen från den studien är att ytvattendelaren väster om Laxemar inte är en grundvattendelare för det djupa grundvattenflödet. Detta beror på att den topografiska skillnaden mot omgivningen är liten. Dessutom är denna ytvattendelare lokaliserad i nästan rät vinkel mot det regionala grundvattenflödet. Följden blir att det sker ett visst grundvattenflöde på stort djup under och genom denna ytvattendelare.

Modellens transienta beteende, ofullständiga flödesvägar och konceptuellt osäkra flödesvägar

Vid storregionala modellstudier beräknas ofta ett flödesfält för en viss tidpunkt och man analyserar sedan detta flödesfält under antagandet att det ger en rimlig representativ beskrivning av en framtida situation. Ofta analyseras det beräknade flödesfältet som om det vore ett stationärt tillstånd. Emellertid så är det sannolikt att grundvattenbildningen i ett långt tidsperspektiv har eller kommer att förändras på grund av klimatologiska variationer. För översiktliga studier av grundvattenflöden över långa framtida tidsrymder vid kustområden nära Östersjön så kommer dessutom relationen mellan landhöjning och framtida havsnivåer att påverka flödesmönstret, dvs randvilkoren för en modell påverkas över tid.

I denna studie analyseras generellt flödesvägarna genom grundvattensystemet med hjälp av simulerade virtuella partiklar. Dessa partiklar följer grundvattenflödena genom modellen (s k partikelspårning). Flödesvägarna som skapats i modellen representerar endast advektiv transport och flödesvägarna startas i en flödessituation som representerar den nuvarande flödessituationen (2000 AD). Denna flödessituation hålls konstant under simuleringen av flödesvägarna. Partiklarna i modellen rör sig alltså i ett flödesfält som ej förändras med tiden, vilket är en modellosäkerhet eftersom den verkliga flödessituationen egentligen är under förändring.

Modellosäkerheten utgörs både av ett konceptuellt och av ett numeriskt problem. Det numeriska problemet visar sig främst i de transienta simuleringarna då densitetsdrivet flöde inkluderats i simuleringarna. Det transienta flödesfältet vid en tidpunkt innehåller lokala avvikelser i massbalans som följer av att flödessituationen är under förändring, dvs strandlinjen retirerar och flödesfältet anpassar sig därtill. Detta innebär i sin tur att vissa av flödesvägarna inte är helt bestämda. Till exempel så kan vissa flödesvägar beräknas från en startpunkt ett stycke från strandlinjen och fram till ett område nära strandlinjen där flödessituationen är så tydligt transient att de lokala avvikelserna i massbalans blir så stora att flödesvägens fortsatta utveckling inte kan bestämmas. Dessa flödesvägar som inte är helt bestämda benämns som ofullständiga flödesvägar. En ofullständig flödesväg når aldrig fram till modellens övre yta. En fullständig flödesväg kan däremot följas från en startpunkt och fram till en utströmningspunkt på modellens övre yta.

I den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/ hanterades de ofullständiga flödesvägarna genom att en maximal advektiv transporttid definierades. Efter 1 miljon år av advektiv transport så avslutades flödesvägarna, oavsett var den virtuella partikeln befann sig i modellen.

En känslighetsstudie genomfördes för att studera effekter av ofullständiga flödesvägar. Simuleringar utfördes för ett transient fall (benämnt fall 51si1). Från en och samma population av flödesvägar analyserades egenskaperna för: hela populationen, andelen fullständiga flödesvägar och andelen ofullständiga flödesvägar. Resultatet för det analyserade beräkningsfallet visar att andelen fullständiga flödesvägar är lika med 86 % och att andelen ofullständiga flödesvägar utgör 14 %.

I exemplet finns ofullständiga flödesvägar av alla längder och genombrottstider, men en stor andel av de ofullständiga flödesvägarna visar på följande egenskaper: de är långa, de har stora genombrottstider (se figur S-6), flödena vid startpunkterna är små och de når ned till stort djup. Involveras ofullständiga



Figur S-6. Exempel på analys av fullständiga och ofullständiga flödesvägar. Kumulativa fördelningar av flödesvägars genombrottstid.

flödesvägar i en analys av flödesvägars egenskaper påverkas således de statistiska fördelningsfunktionernas resultat. Om ofullständiga flödesvägar exkluderas blir resultatet av en statistisk analys att områden som tolkats att ha hydrauliskt fördelaktiga lokaliseringsegenskaper uppvisar försämrade egenskaper. Detta är en modellosäkerhet som bör beaktas då storskaliga flödesregimer analyseras.

Konceptuellt osäkra flödesvägar är också flödesvägar vars egenskaper till stor del beror av konceptuella förenklingar, t ex att kustlinjen ligger still när flödesvägar modelleras. Konceptuellt osäkra flödesvägar kan uppvisa mycket stora genombrottstider, men dessa beräknade tider kan t ex förutsätta att flödessituationen inte förändras under miljoner år, dvs kustlinjen måste ligga stilla under mycket långa tidsrymder. Flödesvägar som är osäkra av konceptuella skäl kan alltså också vara ett problem i en analys av ett regionalt flödesmönster, eftersom dessa flödesvägar ofta uppvisar långa längder och stora genombrottstider och därför kan påverka vilka områden som uppvisar de bästa egenskaperna.

Jämförelse av ett fördelaktigt tolkat område med Laxemar

I den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/ genomfördes olika statistiska analyser för att bedöma tentativa förvarsområden inom det studerade området, som uppvisade fördelaktiga lokaliseringsegenskaper ur hydraulisk synvinkel. De hydrauliska egenskaperna beskrevs som en kombination av flödeslängder, flödestider och specifika flöden. Ett fördelaktigt område med relativt små hydrauliska gradienter lokaliserades till Viråns avrinningsområde sydost om Hultsfred. Geologiskt sett ligger området i en lågpermeabel berggrund som utgörs av basiska eller ultrabasiska bergarter (gabbro, diorit och amfibolit). Omräknat till hydraulisk konduktivitet är geometriska medelvärdet för genomsläppligheten K = 2,6·10⁻⁸ m/s i den ytligare berggrunden. En jämförelse har i föreliggande studie genomförts mellan det utvalda fördelaktigt tolkade området (B) och Laxemarområdet (A), Oskarshamn, se figur S-7. Laxemarområdet har varit föremål för platsundersökningar och där dominerar Smålands-Värmlandsgraniter med ett geometriskt medelvärde för den hydrauliska konduktiviteten som ned till cirka 70 m djup är ungefär en tiopotens högre, dvs K = 1,6·10⁻⁷ m/s.



Figur S-7. Perspektivvy över det regionala undersökningsområdet vid Laxemar (A) och ett utvalt område (B) i Viråns avrinningsområde sydost om Hultsfred.

Modellberäkningarna baserades på ett transient basfall (benämnt fall 51si1Sc1), med lokala heterogeniteter inkluderade för de litologiska enheterna. Analysen av resultaten från den utvalda arean i Viråns avrinningsområde visar att många av flödesvägarna är långa och sträcker sig mot strandlinjen. Dessa långa flödesvägar når ner till stort djup. När flödesvägarna närmar sig strandlinjen tenderar de att vända uppåt mot strandlinjen från stort djup. Sådana flödesvägar blir tydligt påverkade av landhöjningen och strandlinjens reträtt samt av den blandning av salt och sött vatten som sker under strandlinjen och havet. En stor andel av dessa flödesvägar blir ofullständiga och en del är konceptuellt osäkra därför att de förutsätter att strandlinjen ligger stilla under en mycket lång framtida tidsperiod. Vi har emellertid valt att inkludera de ofullständiga flödesvägarna i de analyser som presenteras.

Jämfört med Laxemarområdet uppvisar den utvalda arean i Viråns avrinningsområde att medianvärden för flödeslängderna blir cirka en tiopotens längre och att medianvärden för genombrottstiderna blir cirka två tiopotenser längre. Medianvärdena för de specifika flödena blir cirka 20 % av motsvarande värden för Laxemarområdet. Variationsbredden för genombrottstiderna från arean i Viråns avrinningsområde är extremt stor, från cirka 6 000 år till cirka 17 miljoner år. Denna variation beror både på det regionala flödesmönstret och på den lokala heterogenitet som definierats i modellen (se figur S-8).

Analysen av flödesvägar från det utvalda området visar på de tidigare diskuterade problemen med konceptuellt osäkra flödesvägar och ofullständiga flödesvägar vid långa genombrottstider. Variationen i flödesvägarnas längd, som också är mycket stor, återspeglar den heterogenitet som följer av grund-vattnets flödesmönster, vilken i sin tur huvudsakligen styrs av topografin och i viss mån av berggrundens genomsläpplighet.



Figur S-8. Analys av flödesvägar från utvalda områden. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas genombrottstider. Den dominerande bergarten i det utvalda området är gabbro med en genomsnittlig genomsläpplighet som är cirka en tiopotens lägre än omgivande bergarts, dvs Smålands-Värmlands-graniternas. Vidare är de regionalt styrande gradienterna vid det utvalda området relativt omgivningen lägre. Detta förklarar det utvalda områdets, i ett regionalt perspektiv, generellt och relativt sett längre genombrottstider.

Analys av variationen i modellerade flödesvägars egenskaper från enstaka förvarsområden i regionen

I den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/ analyserades egenskaper för olika teoretiskt utplacerade förvarsområden. Dessa förvarsområden var av storleken 1 km² och var jämt utspridda över modellregionen. Varje förvarsområde representerades av 36 flödesvägar. (Antalet 36 kommer från antalet beräkningsceller inom ett förvarsområde, nio stycken, och av ett visst antal flödesvägar per cell, fyra stycken). För varje förvarsområde medelvärdesbildades flödesegenskaperna baserade på de 36 flödesvägarna. Det var således medelvärden per tentativt förvarsområde som låg till grund för att analysera hydrogeologiska skillnader inom modelldomänen. I föreliggande arbete har en fördjupad analys utförts för att studera spridningsmått med avseende på flödeslängder, genombrottstider och specifika flöden för de flödeslinjer som utgår från ett och samma förvarsområde. Man kan säga att denna delstudie belyser heterogeniteten i kilometerskala för respektive förvarsområde i hela den modellerade regionen. Beräkningarna är baserade på ett transient basfall och med lokal heterogenitet för respektive bergarters konduktivitet (benämnt beräkningsfall 51si1Sc1).

Följande metodik användes för att beräkna förvarsområdenas egenskaper:

- Flödesvägar beräknades från förvarsdjup med hjälp av virtuella partiklar. Från varje förvarsområde initierades 36 flödesvägar.
- Förvarsområdenas egenskaper utvärderades utifrån de statistiska egenskaperna på de flödesvägar som initieras i varje förvarsområde. För varje förvarsområde analyserades de 36 flödesvägarna med avseende på medianen (P50), 10-percentilen (P10) och 90-percentilen (P90); för flödesvägarnas längder, genombrottstider och specifika flödet vid startpunkterna (vid förvarsdjup). Spridningen i egenskaper inom ett förvarsområde har definierats som skillnaden mellan 90 percentilen och 10 percentilen (P90–P10).

Resultaten visar att spridningen (variationen) i flödesvägarnas egenskaper inom ett förvarsområde (storlek 1 km²) kan vara betydande. Det finns förvarsområden där medianlängden överstiger 10 km, men dessa förvarsområden kan också inkludera mycket kortare flödesvägar som innebär att 10-percentilen kan vara mindre än 1 km. När medianvärdet ökar så tenderar emellertid värdet för 10-percentilen att öka. Vidare kan man notera att det finns förvarsområden där medianen för genombrottstiden överstiger 10 000 år, men dessa förvarsområden kan också inkludera mycket kortare tider med 10 percentilsvärden som är mindre än 100 år. När medianvärdet för genombrottstiderna ökar så tenderar också värdet för 10 percentilen att öka. Likartade beteende, som för flödeslängder och genombrottstider, uppvisar även de beräknade specifika flödena för respektive förvarsområde. Det finns förvarsområden där medianen för det specifika flödet vid startpunkterna är mycket litet, i storleksordningen 0,1 liter/m² år, men dessa förvarsområden kan också inkludera 90 percentilsvärdena kan då vara större än 10 liter/m² år.

Strandlinjeförskjutning och flödesvägar från utvalda områden

Simuleringar har utförts där havsnivån har varierats från nivån +100 m ö h och ned till dagens nivå +0 m ö h. Syftet med dessa simuleringar har varit att i ett storregionalt perspektiv demonstrera principerna för hur flödesvägar från utvalda förvarsplatser kan förändras när havets nivå och strandlinjens läge förändras. Simuleringarna har utförts med en sötvattenmodell, dvs inget saltvatten och inga densitetseffekter samt för stationära förhållanden. Liksom i de tidigare refererade känslighets-studierna så har flödesvägar analyserats med avseende på rumslig längdfördelning, genombrottstid och flöde vid startpunkter. Vidare har flödesvägarnas största djup analyserats.

För att analysera strandlinjeförskjutningen och flödesvägarnas egenskaper har vi upprättat 5 olika beräkningsfall som alla baseras på ett stationärt basfall: (i) havets nivå satt till +100 m ö h detta motsvarar högsta kustlinjen, (ii) havets nivå satt till +75 m ö h (iii) havets nivå satt till +50 m ö h (iv) havets nivå satt till +25 m ö h och (v) havets nivå satt till +0 m ö h (dagens situation). De olika beräkningsfallen återspeglar strandlinjens förflyttning under de senaste 14 000 åren.

Flödesvägar från tre områden har jämförts. Områdenas lägen framgår av figur S-9. För varje beräkningsfall och för varje studerat område simulerades flödesvägar från förvarsdjup (500 m):

Område B är ett utvalt inströmningsområde med fördelaktigt tolkade egenskaper med avseende på flödesvägar från förvarsdjup. Område B är identiskt med det utvalda området cirka 15 km sydost om Hultsfred (fördelaktigt tolkat område) som diskuterats ovan. Området ligger över högsta kustlinjen.



(ii) Havsytans nivå +0 m.ö.h. (nuvarande situation)

Figur S-9. Kustlinjens läge och havets utbredning för olika nivåer på havsytan. De utvalda områdena är markerade med svarta linjer.

Område C är beläget på en höjdrygg cirka 15 km öster om Hultsfred och består huvudsakligen av inströmningsområden, men även av lokala utströmningsområden. Området ligger över högsta kustlinjen.

Område D ligger cirka 20 km väster om Laxemar. Områdets topografiska nivå är ungefär 50 m ö h och ligger således under tidigare högsta kustlinjen. Området har utvalts för att det är ett typiskt utströmningsområde.

En jämförelse av de erhållna resultaten för de olika områdena visar följande:

- Område B är ett tydligt inströmningsområde. De flesta av flödesvägarna från detta område påverkas när strandlinjen förflyttas bort från området. Förändringarna i flödesvägarnas egenskaper är störst när strandlinjen är nära området och minskar när strandlinjen rör sig vidare bort från området. När strandlinjen befinner sig på ett avstånd större än cirka 12 km är det endast de allra längsta och djupaste flödesvägarna (10%) som fortsätter att påverkas av strandlinjens läge. Det ska dock påpekas att dessa extrema storregionala flödesvägar är påverkade av konceptuell och numerisk osäkerhet i modelleringen.
- Område C präglas huvudsakligen av inströmning men även av lokalt förekommande utströmning. Nästan alla flödesvägar från detta område påverkas när strandlinjen förflyttas bort från området men bara då strandlinjens läge är inom ett avstånd av cirka 6 km från området. När strandlinjen förflyttar sig vidare bort så är det endast de längsta och djupaste flödesvägarna (cirka 10 %) som fortsätter att följa strandlinjen. När strandlinjen befinner sig på ett avstånd större än cirka 12 km påverkas inte flödesvägarna från området av strandlinjens läge (se figur S-10).
- Område D är ett tydligt utströmningsområde. När hela området ligger över havet påverkas inte flödesvägarna från området nästan alls av strandlinjens läge.

Således förändras flödesvägarna från de tre områdena på olika karaktäristiska vis då strandlinjens läge förändras. Flödesvägar från förvarsområden i en dominerande inströmningssituation påverkas mest av strandlinjens förflyttning medan flödesvägar från förvarslägen i utströmningsområden nästan inte alls påverkas. För det studerade systemet, med den genomsläpplighet och den topografi som den regionala modellen bygger på, visar resultaten att för tydliga inströmningsområden så avtar betydelsen av strandlinjens läge väsentligt då avståndet till strandlinjen är större än cirka 6 km.



Figur S-10. Område C. Analys av strandlinjeförskjutningens betydelse för flödesvägarnas genombrottstid i ett område som präglas av inströmning. Figuren visar genombrottstiden som funktion av avståndet till strandlinjen.

Slutsatser

Ett antal antaganden och modellförenklingar vid storregional grundvattensimulering har studerats i föreliggande studie. Med den metodik som tillämpats kan man dra följande generella slutsatser:

- *Topprandvillkor:* Jämfört med topografistyrt topprandvillkor så innebär en infiltrationsstyrd rand, vid en topografi liknande östra Smålands, att såväl flödesvägars längder som genombrottstider från ett förvar endast ökar marginellt (mindre än 10 %). Specifika flöden vid flödesvägars startpunkter minskar marginellt (mindre än 10 %).
- Modelldjup: Det tunga saltvattnet på nivåer djupare än förvarsdjup förhindrar till stor del grundvattnets omsättning från att ingå i vidsträckta flödesceller till stora djup. En storregional grundvattenmodell med densitetsdrivet flöde behöver därför inte vara 6 km djup (vid en topografi liknande östra Smålands), mycket likartade resultat erhålls för en modell med cirka 3 km djup. En rimlig generell slutsats för den storregionala modellen är att flödesvägar som når djupt ner i saltvattnet bör betraktas som mycket osäkra.
- Initialvillkor för salthaltsfördelning vid transient modellering: I den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/ användes ett initialvillkor (initialtillstånd) i vilka salthalterna baserades på observerade salthalter i djupa borrhål. En alternativ uppskattning av den initiala situationen (cirka 10 000 år BP) kan erhållas genom en förenklad grundvattensimulering av en hel föregående glacial period. Vid ett sådant tillvägagångssätt föreligger en viss skillnad för de allra längsta flödesvägarna (över 95 percentilen för populationen) som blir längre och går något djupare. Därmed blir de längsta genombrottstiderna också något längre.
- *Randvillkor för modelldomänens yttre begränsningssidor:* Modelldomänens yttre sidor har förutsatts att följa tydliga storregionala ytvattendelare och har antagits som täta. Den genomförda känslighetsstudien visar att de längder, genombrottstider och flöden som beräknats för flödesvägar som initierats längs med modellens yttre sidor är rimliga värden, som inte är kraftigt numeriskt påverkade av det applicerade randvillkoret. Slutsatsen bygger på en statistisk jämförelse mellan flödesvägar initierade längs med en tydlig vattendelare i modellens inre och flödesvägar initierade längs med modellens sidor.
- Konceptuellt osäkra flödesvägar: Ett konceptuellt problem, speciellt utmärkande för storregional modellering, består i att man beräknar ett flödesfält för en viss tidpunkt, t ex 2000 AD, och att man sedan analyserar detta flödesfält under antagandet att flödesfältet är en rimligt representativ beskrivning av en framtida situation. Man analyserar ofta situationen som om den också vore ett stationärt tillstånd. Skillnaderna mellan modellantagandena och flödesfältets verkliga egenskaper leder emellertid till att en viss andel av de beräknade flödesvägarna blir ofullständiga och konceptuellt osäkra. Om flödesvägar simuleras och analyseras i en storregional modell med syfte att söka efter potentiellt goda förvarsområden, så blir statistiken för vissa goda områdena mindre fördelaktig om de ofullständiga flödesvägarna exkluderas. I föreliggande studie tenderar de ofullständiga flödesvägarna att vara långa och ha långa genombrottstider, men dessa värden är behäftade med stora osäkerheter.
- *Jämförelse av område nära Hultsfred med Laxemar:* Ett ur hydraulisk synvinkel fördelaktigt tolkat område cirka 15 km sydost om Hultsfred har jämförts med Laxemarområdet med avseende på flödesvägarnas egenskaper. Jämförelsen visar att det framför allt är genombrottstiderna som är betydligt längre från det utvalda området. För 50 percentilen är genombrottstiderna cirka 100 gånger större vid det utvalda området jämfört med Laxemar. Variationen i genombrottstider är emellertid extremt stor inom det utvalda området. Denna extrema variation visar på att de lokala egenskaperna är av stor betydelse. En stor andel av flödesvägarna från det utvalda området är ofullständiga och konceptuellt osäkra.
- Lokala variationer: En analys har utförts för att studera den variation i flödesvägarnas egenskaper som kan förekomma inom ett förvarsområde och mellan olika förvarsområden. Resultaten visar att spridningen (variationen) i flödesvägarnas egenskaper inom ett och samma förvarsområde (storlek 1 km²) kan vara betydande.
- Strandlinjeförskjutning och flödesvägar: Flödesvägarna från in- och utströmningsområden förändras på olika karaktäristiska vis då strandlinjens läge förändras, t ex på grund av landhöjning. Under förutsättning att områden hamnat ovanför strandlinjen visar modellresultaten att flödesvägar från tydliga inströmningsområden påverkas mest av strandlinjens förflyttning. Flödesvägar från tydliga utströmningsområden påverkas nästan inte alls av strandlinjens förändring. För den studerade modelldomänen visar de utförda simuleringarna att även för tydliga inströmningsområden så avtar betydelsen av strandlinjens läge väsentligt då avståndet till strandlinjen är större än cirka 6 km.

Med hänsyn till ovanstående har de genomförda känslighetsstudierna av antaganden och modellförenklingar vid storregional grundvattenmodellering ej förändrat de generella slutsatser som presenterats i SKB-rapporten /Ericsson et al. 2006/.

Den upprättade modellen har en hög diskretiseringsgrad i relation till det studerade områdets storlek. Särskilt i vertikal riktning är cellstorlekarna små nära markytan. Eftersom topprandvillkor med infiltration har tillämpats i denna studie, och eftersom det upprättade beräkningsnätet följer topografins undulation, har inga explicita sensitivitetsstudier genomförts av beräkningscellernas horisontala diskretisering och dess påverkan på grundvattenomsättningen vid markytan eller grundvattenbildning.

Man kan konstatera att vid de hydrauliska konduktivitetsfält som förekommer i det studerade området och med den cellindelning som användes i SKB-rapporten /Ericsson et al. 2006/ så bedöms de vertikala flödeshastigheterna vid markytan vara rimliga i den tidigare studiens referensfall /Ericsson et al. 2006/ (jämför även /Marklund 2009/ och /Wörman et al. 2006/). Denna slutsats baseras delvis på de känslighetsanalyser som utförts i denna studie (se sektionen som diskuterar topprandvillkoret och flödesvägarnas egenskaper).

En storregional modellering baseras med nödvändighet på generaliserade data med en skalupplösning som är relevant för att kunna ge indikativa resultat avseende ett översiktligt modelleringsproblem. Detta kräver vanligtvis en medelvärdesbildning av indata och det finns en risk att modelleringen kan ge resultat i regional skala som kan övertolkas. Strukturer eller zoner och vattengenomsläpplighet kan emellertid lokalt ha en betydande hydrogeologisk påverkan i de relativt begränsade flödesceller, kilometerskala, som är vanliga i Baltiska sköldens topografi. De lokala egenskaperna måste kartläggas vid platsundersökningar.

Storregional grundvattenmodellering leder ofta till att vissa, men ett fåtal, flödesvägar kan bli extremt långa. Flödestiderna blir följaktligen även extremt långa, till och med i ett geologiskt perspektiv. Dessa flödesvägar är konceptuellt och beräkningsmässigt mycket osäkra vilket i sin tur kan innebära att felaktiga slutsatser dras om flödesregimen. Man kan utifrån de känslighetsstudier som genomförts i denna studie konstatera att det finns ett behov att utveckla modelleringsmetodiken med hänsyn till transienta flödesvägar och randvillkor.

Executive summary

Supra-regional groundwater modeling – a sensitivity study of a number of selected conceptual descriptions and simplifications *Background*

The recharge and discharge of groundwater has been the subject of different investigations by SKB and has been of interest to the reviewing authorities. Following examination of the SKB report on supra-regional groundwater simulation, and in the light of the joint assessments made by SSI and SKI, letter dated October 22, 2007, SSI ref. 2007/1562/26 and SKI ref. 2007/598/ as well as SSI Report 07:11 /Dverstorp 2007/, SKB has commissioned a project that should be regarded as a complement to "Ericsson L O, Holmén J, Rhén I, Blomquist N, 2006. Storregional grundvatten-modellering – fördjupad analys av flödesförhållanden i östra Småland: Jämförelse av olika konceptuella beskrivningar. SKB R-06-64, Svensk Kärnbränslehantering AB".

From the aforementioned SKB report, and using the methodology that was applied, the following general conclusions regarding a supra-regional groundwater flow field were drawn:

- The topography is of greatest significance to the regional flow pattern from repository depth. The discharge areas are primarily in the lower parts of the topography and along valleys. The recharge areas are on the hills. The topographical undulation is of greater significance than the properties of the conductivity field. Different lithological units, regional deformation zones, local heterogeneity, Quaternary deposits etc. are of less significance than the undulation of the topography.
- The flow pattern of the groundwater for the areas presented and analysed using the most realistic prerequisites, can be described mainly as a local flow process. The median length of the flow paths according to the report is in the order of 2 km and the proportion of supra-regional flow paths (longer than 10 km) is very small.
- If the hydraulic conductivity decreases with depth, flow cells are created that are of a more limited extent than if this were not the case.
- Anisotropy in the conductivity field, with greater horizontal hydraulic conductivity than vertical, produces relatively larger flow cells and long flow paths are extended.
- Anisotropy in the conductivity field with greater vertical hydraulic conductivity than horizontal, produces relatively small flow cells and the flow pattern becomes more local.
- Depth-decreasing conductivity and horizontal anisotropy dominate over the impact of lithological units, deformation zones, dolerite dykes and Quaternary deposits on the flow pattern.
- Deformation zones and dolerite dykes are of significance to the local flow pattern but are of little significance to the regional flow pattern.
- Supra-regional horizontal deformation zones are not of sufficient hydraulic significance to affect the large-scale flow pattern.
- Models with local heterogeneity (in a regional perspective) demonstrate the same general flow pattern as models without local heterogeneity, although it is observed that flow paths and break-through times increase by approximately 30 %. The increase varies according to the scale.

A general conclusion in the SKB report /Ericsson et al. 2006/ was that repository areas inland do not necessarily have longer breakthrough times, longer flow path lengths or smaller specific flows than repository areas closer to the shoreline. In summary, the study showed that increased conceptual complexity, i.e. more realistic conditions, results in an increased tendency towards the development of more local flow cells. The simulations conducted did not show that an inland repository would be more suitable than a repository close to the coast when the real hydrogeological conditions were factored into the calculations. The magnitude of groundwater flow, for example, depends largely on local permeability. Permeability varies within wide limits and, viewed locally, probably produces much greater flow variations than what the different system features produced in the study.

Certain repository areas with potentially interesting flow patterns could be identified in the study by /Ericsson et al. 2006/ with a certain degree of confidence although if the size of the local ground-water flow were to also be included in an analysis, the uncertainties would be considerably greater.

According to the aforementioned study, the groundwater flow depends to a large extent on local permeability, which must be determined from the local perspective of the repository site by means of borehole investigations.

The National Swedish Institute of Radiation Protection Report 07:11 /Dverstorp 2007/ developed and summarised the authorities' examination views on the SKB supra-regional groundwater simulation for eastern Småland /Ericsson et al. 2006/. The examination was conducted within the framework of the dialogues which SKB, in compliance with a government decision, has maintained with SSI and the National Swedish Nuclear Power Inspectorate (SKI) (After July 1, 2008, the Swedish Radiation Safety Authority) regarding the site investigations for a spent nuclear fuel repository. This meant that the views on the examination by the authority had been regarded as general advice to SKB. SSI's assessment was that "SKB's study was conducted well and contributes to increased understanding of the various factors of significance to the groundwater flow pattern. SSI, however, felt that the evaluation of the calculation results was insufficient to draw unequivocal conclusions regarding the significance of supra-regional groundwater flow as a siting factor for a repository of spent nuclear fuel" /Dverstorp 2007/.

The most important objection by the authorities was that the SKB study /Ericsson et al. 2006/ did not evaluate and compare specific sites/regions in the model domain. SSI identified in its examination /Dverstorp 2007/ certain assumptions and model simplifications that could affect the proportion of calculated long flow paths and transport times and felt that these factors ought to be examined further to reinforce the credibility of the modelling results. The assumptions and model simplifications that it was sought to highlight were: model depth, significance of the topography, location of the groundwater table, the boundaries of the model, the cell-mesh discretization, representation of geological structures and determination of flow paths. The SSI also wanted a discussion about whether there were obvious local site features which, from a regional perspective, could "destroy" a site with good features and whether these site features could be identified based on available data.

Aims of the study

The primary aim of this report is:

• To present a supplementary, in-depth evaluation of certain conceptual simplifications, descriptions and model uncertainties in conjunction with regional groundwater simulation, which in the first instance refer to model depth, topography, groundwater table level and boundary conditions.

Implementation was based on geoscientifically available data compilations from the Småland region but different conceptual assumptions have been analysed.

A further aim of the project was:

• To present a comparison of hydrogeological conditions between specific locations within the pre-study municipalities of Oskarshamn and Hultsfred through expanded evaluation of existing calculation results from the analysis of regional flow conditions in eastern Småland /Ericsson et al. 2006/.

The following questions were analysed:

- The top boundary condition and the properties of the flow paths.
- The depth of the model, density-driven flow and the properties of the flow paths.
- An alternative initial condition: The significance of using an initial condition based on an approximatory simulation of a glacial cycle.
- The significance of the vertical boundary condition in the model (impervious walls) in conjunction with simulation of flow paths.
- The transient behaviour of the model, conceptually uncertain flow paths and incomplete flow paths.
- A comparison of properties for flow paths from a selected area, interpreted as favourable, with properties for flow paths from the regional investigation area at Laxemar, in the Municipality of Oskarshamn.
- Analysis of the variations in the properties of the flow paths from different repository areas.
- Shoreline movement and flow paths from selected areas.
- A visualisation of the salinity and flow paths within the supra-regional area.

The above aspects have been studied within a number of different calculation cases with regard to varying model features. The aspects studied using varying model features are listed in Table S-1.

Table S-1. The following matrix shows which model features were varied within each aspect studied.

	Model features						
	Stationary conditions	 Transient conditions 	Homogeneous model with permeability decreasing with depth	Base case (Case 51) different litho- logical units and different quaternary deposits	Local hetero- geneity with regard to permeability		
	No density effects	Density effects Shoreline movement permeability decreasing with depth					
	No shoreline movement						
Aspect studied							
Top boundary condition. Chapter 5	Х		Х	Х			
Depth of the model. Chapter 6	Х	Х		Х			
Alternative initial condition. Chapter 7		Х		Х			
Sides of the model.		Х	Х				
Vertical boundary condition. Chapter 8							
Incomplete and conceptually uncertain flow paths. Chapter 9		Х		Х			
Comparison of two areas. Chapter 10		Х		Х	Х		
Heterogeneity in the properties of the flow paths. Chapter 11		Х		Х	Х		
Shoreline movement and properties of the flow paths. Chapter 12	х			Х			
Visualisation of flow paths and salinity. Chapter 13	Х	Х		Х			
Visualisation of salinity. Appendix B		х		х			

As in the earlier study, /Ericsson et al. 2006/, comparisons have been made with a base case or reference case. The base case for the model (designated Case 51) was defined in this study as:

- A stationary model is used as a reference. Certain variation cases with density-controlled flows are used as supplementary transient reference cases.
- Undulating topography according to the height database with a resolution of 50 m.
- Model bottom of -6,000 meters above sea level.
- Different lithological units are included, with hydraulic conductivity K decreasing with depth. At a depth of 67 m (and above) the K-value is the same as the average value in the SGU well archive for each lithological unit studied. The decreasing depth tendency is in accordance with the site investigations at Laxemar, Oskarshamn.
- Deformation zones with K-values decreasing with depth according to the site investigations at Laxemar, Oskarshamn.
- Dolerite dykes with anisotropy. Along the dykes, K is the same as that of the deformation zones.

What distinguishes the base case in this study from the previous base case /Ericsson et al. 2006/ is that the flow boundary condition (infiltration) is applied instead of topography-controlled gradients as a top boundary condition. The model depth of the base case is 6,000 m instead of the model depth of 2,500 m in the earlier study.

The area studied

The active area in the numerical model comprises, as in the earlier study, /Ericsson et al. 2006/, five regional catchment areas in eastern Småland. In addition, the model includes a section of the ocean (ocean bed) outside the shoreline. The groundwater model represents an area with the spread in a north-south direction, to approximately 79 km, and in an east-west direction, to approximately 133 km. See Figure S-1.



Figure S-1. Height model of the supra-regional area. (From the GSD Height Database © National Land Survey of Sweden Gävle 2001, Consent M2001/5268). For reasons of confidentiality the bathymetry is not reported.

The model used in this study is based directly on the model used in the earlier study of the regional flow pattern in eastern Småland. The same area is studied, with the same topography, deformation zones, lithological units, Quaternary geological units, hydraulic conductivities, porosity etc. See Figure S-2. For a detailed presentation of the background data of model, reference is made to report /Ericsson et al. 2006/.

Numerical model code

The new models have been prepared using the model code Geoan /Holmén 2010/. The earlier models were prepared using the model code DarcyTools. Both the codes used the same basic mathematical formulation, finite differences with a calculation node in the centre of each calculation cell. As the basic mathematical formulation is the same in both the calculation codes, a transfer of model features between the two codes is a relatively uncomplicated operation. Geoan was chosen for four main reasons: (i) It was deemed desirable to use the method in Geoan to calculate the position of the free water table when the top boundary condition is a flow boundary condition with surface water flows; (ii) The calculation network in Geoan does not need to be defined with strict horizontal layers (as in the old model). In the upper part of the new model the calculation network layer follows the undulation of the topography, which is an advantage when the position of the free groundwater table is to be calculated; (iii) Geoan contains routines for calculating flow paths accurately and can also separate numerically well-determined flow paths from numerically incomplete flow paths and can also include the numerically incomplete flow paths in the analysis; (iv) All routines for analysing the flow paths statistically are also to be found in Geoan.



Figure S-2. The geometric shape and horizontal spread of lithological units in the model. Colours and codes (K-group) represent different lithological units. In the legend above, the code is to the right of the colour interval. The codes are explained in Table 2-1 in the main text of the report.

In this study, the flow paths are analysed through the groundwater system with the aid of simulated virtual particles. These particles follow the groundwater flows through the model (known as particle tracking). The flow paths that have been created in the model only represent advective transport. Below is a presentation in summary of the implementation and the results of the analyses of the aspects according to Table S-1.

Top boundary condition and the properties of the flow paths

In the earlier model /Ericsson et al. 2006/ the pressure was defined according to the topography of the model and there were no surface water flows, i.e. a pressure boundary condition. In the earlier model it was also assumed that the position of the groundwater table could be approximated by the topography of the ground surface with the exception of areas with glaciofluvial sediments and below the ocean. However, a flow boundary condition with infiltration and surface water flows at the top of the model is preferable to a pressure boundary condition as a flow boundary condition is a better approximation of the true behaviour of the system. Using a flow boundary condition in the model, the model calculates the position of the groundwater table, groundwater recharge and surface water flows based on the hydraulic conductivity, topography and potential groundwater recharge in the model.

A comparison between models with pressure top boundary condition and flow boundary condition produces the following general conclusions from the simulations conducted:

- The length of the flow paths increases slightly as the boundary condition is a flow boundary condition.
- The breakthrough times for the flow paths increase slightly when the top boundary condition is a flow boundary condition.
- The specific flow at the starting points of the flow paths in the repository decrease slightly as the top boundary condition is a flow boundary condition.



Figure S-3. Change in the median of the flow paths' breakthrough times when the top boundary condition is changed from a pressure boundary condition to a flow boundary condition, as a function of the total horizontal transmissivity in the upper 50 m of the flow medium (in the model). (The red dot represents a reference case (Case 51), which is equivalent to a base case in the SKB-report /Ericsson et al. 2006/.)

The comparison of model results between pressure and flow boundary condition depends on how the horizontal permeability properties are applied in the Quaternary layers and in the upper parts of the bedrock. Figure S-3 exemplifies the change in the median of the flow paths' breakthrough times as a function of the total horizontal transmissivity in the upper 50 m, if the top boundary condition is changed from a pressure boundary condition to a flow boundary condition. For the supra-regional model, with the topography that exists, the modeled change in breakthrough time is greater than 10% if the total horizontal transmissivity in the top 50 m is greater than about $1 \cdot 10^{-4}$ m²/s. However, for the reference case (Case 51), which also corresponds to the base case in the earlier study /Ericsson et al. 2006/, the median value for the total horizontal transmissivity in the upper 50 meters equals $9.1 \cdot 10^{-6}$ m²/s, which is significantly lower compared to the value when changes in flow characteristics of the flow paths are greater than 10%.

Model depth, density-driven flow and properties of the flow paths

The heavy saline groundwater at a greater depth than the repository depth largely prevents flow paths from reaching down to an even greater depth. A saltwater model (with density-driven flow) which will be used to simulate flow paths from repository depth therefore does not necessarily need to be at a depth of 6 km as very similar results are obtained for a model with a depth of approximately 3 km (see Figure S-4).

In the model flow paths reach down to a considerable depth, all the way down to the bottom of the model (6 km). These flow paths, however, make up a very minor proportion of all flow paths. For the simulations with density-driven flow, 99% of the flow paths never go deeper than 1,800 m (see Figure S-5).

If the aim is to analyse the very longest flow paths, flow paths which are above the 99th percentile, the depth of the model is of significance as these flow paths often reach down to the base of the model. Such flow paths, however, have been found to be affected by conceptual and numerical uncertainty. This is discussed further in the later section "Transient behaviour, incomplete flow paths and conceptually uncertain flow paths in the model". A reasonable general conclusion of the supra-regional modeling is that the flow paths which reach deep into the saline groundwater should be regarded as highly uncertain.



Figure S-4. Analysis of models with different base levels. The cumulative distributions of the flow paths' breakthrough times at different model depths show similar behaviour.



West

East

Figure S-5. Flow paths from the repository depth along an east-west cross-section for a transient simulation with saltwater and density effects (Case 51 si1). The flow situation refers to the year 2000 AD. The starting points of the flow paths form a regular pattern at a depth of 515 m. The number of flow paths in the figure is 10,000. In addition, the figure shows an iso-surface (green) which represents salinity of 4.1%. The proportion of flow paths above the iso-surface is 99%.

The impact of an alternative initial boundary on the flow paths in conjunction with transient simulation

In a previous study /Ericsson et al. 2006/ an initial condition was used in conjunction with transient simulation of density-controlled flows, where the salinity is based on observed salinity levels in deep boreholes. The level of transition between fresh and saline groundwater is also related to the level of the topography in such a way that lower levels for the interface are obtained when the topographical level increases.

An assumption regarding initial state ought to be taken into account as an estimate of an unknown condition at a certain point in time e.g. 10,000 years BP. The initial condition is probably not a stationary state as it could be affected by the previous Weichsel Glaciation and its hydrogeological conditions.

An alternative estimate of the initial situation in conjunction with simulation of conditions 10,000 years ago and forwards could be to allow the start of the simulation to be preceded by a complete glacial period. Such a strongly simplified simulation of a glaciation has been carried out in this study purely for the purpose of conducting a sensitivity study with an alternative initial situation for a transient simulation.

Simulations of flow paths from repository depth have thus been made using different initial conditions: (i) an originally applied initial condition and (ii) an alternative glacial initial condition. The statistics for the flow paths were then compared. One conclusion that can be drawn from the comparison of the flow path statistics is that simulations based on both the initial conditions studied produce similar results although with the following difference. The very longest flow paths (above the 95th percentile) become longer and go slightly deeper with the alternative glacial initial condition and consequently the longest breakthrough times also become slightly longer using the alternative initial condition.

The following conceptual observation was made in conjunction with the glacial simulation and with density-controlled flows: for the heavy brine, in order to be at a reasonable depth during a glacial simulation, the transport of salt via hydrodynamic dispersion (hydromechanical dispersion and diffusion) in the upper part of the model, e.g. the top 500 m, must not dominate over the advective transport of salt. If the dispersive transport dominates over the advective transport, the salt content will rise to high levels even during glacial periods. Unrealistically high salinity levels will then be obtained at shallow depths.

The significance of the model's external vertical boundaries (impervious walls) in conjunction with a simulation of flow paths

The outer vertical boundaries of the model domain are placed along supra-regional topographical divides in the surface water system. These structures comprise boundaries for surface water flows and it is probable that they are also important barriers to groundwater flow. It is, however, possible that in reality there is a slightly minor groundwater flow through inner, regional topographical surface water divides, e.g. where large fracture zones cut through the watershed. In the model the external vertical boundaries are defined as completely impervious and no groundwater flow is thus permitted to pass across.

Simulations using the model indicate that long flow paths are obtained from starting points placed below topographical surface water divides but also for starting points along the boundaries of the whole model domain. The question is to what extent flow paths with starting points close to the outer boundary of the model domain are affected systematically and incorrectly by the proximity to the applied boundary condition (impervious walls). This is particularly the case at the external sides of the model located along the topographical surface water divides.

Flow paths were therefore initiated: (i) across the whole model, (ii) along an inner surface water divide which appears in the model and (iii) along the boundary of the model domain (outer surface water divide).

A comparison of statistics from these flow paths gives rise to the following conclusion: the lengths, breakthrough times and flows which are calculated for flow paths initiated along the outer sides of the model are reasonable values which are not significantly affected numerically by the boundary condition applied along the sides of the model domain.

The outer sides of the model follow distinct regional surface water divides. One example of a less obvious divide is the topographical surface water divide to the west of Laxemar. This divide is weakly developed and its significance as a groundwater watershed has been studied separately in a special study /Holmén 2008/. The conclusion from this referred study is that the surface water divide to the west of Laxemar is not a groundwater watershed for the deep groundwater flow. This is due to the fact that the topographical difference compared with the surroundings is small. Furthermore, this divide is located almost perpendicular to the regional groundwater flow. The result is that there is a certain groundwater flow at a large depth below and through this "inner" topographical divide.

The model's transient behaviour, incomplete flow paths and conceptually uncertain flow paths

In conjunction with larger regional simulation studies similar to the one conducted here, a flow field is calculated for each specific point in time and this flow field is then analysed on the assumption that it provides a reasonable, representative description of a future situation. Often the flow field is analysed as if it were a stationary state. However, it is probable that groundwater recharge over a long time perspective has changed, or will have changed, as a result of climatological variations. For general studies of groundwater flows over long future time periods in coastal areas close to the Baltic, the relationship between land rise and future sea levels will also affect the flow pattern, i.e. boundary conditions for a model will be affected over time.

In this study the flow paths through the groundwater system are analysed generally with the aid of simulated virtual particles. These particles follow groundwater flows through the model (known as particle tracking). The flow paths that are created in the model only represent advective transport and the flow paths are started in a flow situation that represents the present flow situation (2000 AD.). This flow situation is kept constant during the simulation of the flow paths. The particles in the model thus move in a flow field that does not change over time, which represents a model uncertainty as the real flow situation is actually going through a process of change. In the previous study /Ericsson et al. 2006/ the incomplete flow paths were handled by defining a maximum advective transport time. After 1 million years of advective transport, the flow paths were concluded, regardless of where the virtual particle happened to be in the model.

The model uncertainty takes the form of both a conceptual and a numerical problem. The numerical problem occurs mainly in the transient simulations when the density-driven flow has been included. The transient flow field at a point in time contains local deviations in the mass balance, which ensues from the fact that the flow situation is undergoing change, i.e. the shoreline is retreating and the flow field is adapting to the situation. This means, in turn, that the flow paths are not determined completely. For example, certain flow paths can be calculated from a starting point some way from the shoreline and up to an area near the shoreline where the flow situation is so distinctly transient that the local deviations in the mass balance reach such a level that the continued development of the flow path cannot be determined. The flow path never reaches the upper surface of the model. A complete flow path can, however, be followed from a starting point up to a discharge point on the upper surface of the model.



Figure S-6. Example of an analysis of complete and incomplete flow paths. Cumulative distribution of the flow paths' breakthrough time.

A sensitivity study was carried out to examine the effects of incomplete flow paths. Simulations carried out using a transient base case (designated Case 51 si1). From one and the same population of flow paths, the properties have been analysed for: the whole population, the proportion of complete flow paths and the proportion of incomplete flow paths. The result for the calculation case analysed shows that the proportion of complete flow paths is 86% and the proportion of incomplete flow paths is 14%.

In the example, there are incomplete flow paths of all lengths and breakthrough times although a large proportion of the incomplete flow paths demonstrate the following characteristics: they are long, they have long breakthrough times (see Figure S-6), the flows at the starting points are small and they extend to a large depth. If incomplete flow paths are involved in an analysis of the characteristics of flow paths, the statistical distribution function results are affected. If incomplete flow paths are excluded, the result from a statistical analysis is that the areas that have been interpreted as having hydraulically favourable location demonstrate slightly poorer conditions. This is a model uncertainty that ought to be taken into account when large-scale flow regimes are analysed.

Conceptually uncertain flow paths are also flow paths whose characteristics largely depend on conceptual simplifications, such as the coastline is considered immovable when groundwater flow regimes are modeled. Conceptually uncertain flow paths can show very long breakthrough times, but these estimated times for example assume that the flow situation has not changed over millions of years. E.g. the coastline has to be stationary for a very long time. Flow paths which are uncertain for conceptual reasons thus may be a problem in an analysis of a regional flow pattern, because these flow paths typically often have elongated flow lines and long breakthrough times and therefore may affect the areas that exhibit the most favourable conditions.

Comparison of a favourably interpreted area with the Laxemar area

In an earlier study /Ericsson et al. 2006/ different statistical analyses were carried out in order to assess tentative repository areas in the region that demonstrated favourable location conditions but only from a hydraulic point of view. The hydraulic conditions were described as a combination of flow path lengths, flow travel times and specific flows. A favourable area with a relatively small hydraulic gradient was found in the Virån catchment area south-east of Hultsfred. Geologically speak-



Figure S-7. Perspective view of the regional investigation area at Laxemar (A) and a selected area (B) in the Virån catchment area south-east of Hultsfred.

ing, the area is in an area of low permeability bedrock comprising basic or ultrabasic rock (gabbro, diorite and amphibolite). Recalculated as hydraulic conductivity, the geometric mean value for the hydraulic conductivities $K = 2.6 \cdot 10^{-8}$ m/s in the most superficial bedrock. A comparison has been made in this study between the selected favourably interpreted area (B) and the Laxemar area (A), Oskarshamn, see Figure S-7. The Laxemar area has been the subject of site investigations. Småland-Värmland granites dominate with a geometric mean value for the hydraulic conductivity which down to a depth of approximately 70 m is roughly one order of magnitude higher, i.e. $K = 1.6 \cdot 10^{-7}$ m/s.

Model calculations are based on a transient base case (designated Case 51 si1) with local heterogeneities included for the lithological units. The analysis of the results from the selected area in the Virån catchment area shows that many of the flow paths are long and extend towards the shoreline. These long flow paths go down to a considerable depth. When the flow paths approach the shoreline they tend to turn upwards towards the shoreline from a great depth. Such flow paths are clearly affected by the land rise and the retreat of the shoreline and by the mixture of saltwater and freshwater that takes place under the shoreline and the ocean. A large proportion of these flow paths become incomplete and some are conceptually uncertain as they presuppose that in the future the shoreline will remain still over a very long period of time. We have, however, opted to include the incomplete flow paths in the analyses presented.

Compared with the Laxemar area, the selected area in the Virån catchment area shows that the median values for the flow path lengths are approximately one order of magnitude longer and the median values for the breakthrough times are approximately two orders of magnitude longer. The median values for the specific flows are approximately 20% of the corresponding values for the Laxemar area. The variation in breakthrough times from the area in the Virån catchment area is extremely broad, from approximately 6,000 years to approximately 70 million years. This variation is due to the regional flow pattern as well as to the local heterogeneity as defined in the model (see Figure S-8).

The analysis of flow paths from the selected area indicates the previously discussed problems with conceptually uncertain flow paths and incomplete flow paths in conjunction with long breakthrough times. The variation in the length of the flow paths, which is also very high, reflects the heterogeneity that ensues from the flow pattern of the groundwater, which is in turn governed primarily by the topography and to a certain extent by the permeability of the bedrock.



Figure S-8. Analysis of flow paths from different areas. The relative distributions of the flow paths' breakthrough times. The dominant rock in the selected "favourable" area is gabbro with an average hydraulic conductivity that is approximately one order of magnitude lower than the surrounding bedrock, i.e. that of the Småland-Värmland granites. In addition, the regional controlling gradients in the selected area are low relative to the surroundings. This explains the relatively longer breakthrough times in general in the selected area from a regional perspective.

Analysis of the variation in the properties of the simulated flow paths from individual repository areas in the region

In the earlier study /Ericsson et al. 2006/ the properties for different theoretically located repository areas were analysed. These repository areas were around 1 km² in size and were evenly distributed throughout the model region. Each repository area was represented by 36 flow paths (the figure of 36 comes from the number of calculation cells within the repository area, nine, multiplied by a certain number of flow paths per cell, four). For each repository area the averaged flow properties were based on the 36 flow paths. It was thus the average values per tentative repository area that form the basis for analysing hydrogeological differences within the model domain. In this work, an in-depth analysis has been made in order to study distribution figures with regard to flow path lengths, breakthrough times and specific flows for the flow lines that extend from one and the same repository area. It can be said that this sub-study highlights the heterogeneity on the kilometre scale for each repository area throughout the whole of the simulated region. The calculations are based on a transient base case and with local heterogeneity for the conductivity of each rock type (designated calculation case 51si1Sc1).

The following methodology was used to calculate the properties of the repository area:

- Flow paths were calculated from the repository depth with the aid of virtual particles. From each repository area 36 flow paths were initiated.
- The properties of the repository areas were evaluated based on the statistical properties of the flow paths initiated in each repository area. For each repository area the 36 flow paths were analysed with regard to the median (P50), 10th percentile (P10) and 90th percentile (P90) for the lengths of the flow paths, the breakthrough times and the specific flow at the starting points (at repository depth). The spread in properties within a repository area has been defined as the difference between the 90th percentile and the 10th percentile (P90–P10).

The results show that the spread (variation) in the properties of the flow paths within a repository area (size 1 km²) could be significant. There are repository areas where the median length exceeds 10 km although these repository areas could also include much shorter flow paths, which means that the 10th percentile could be less than 1 km. However, when the median value increases, the value for the 10th percentile tends to increase. In addition, it can be noted that there are repository areas where the median for the breakthrough time exceeds 10,000 years although these repository areas can also include much shorter times with 10th percentile values of less than 100 years. When the median value for the breakthrough times increases, the value for the 10th percentile also tends to increase. Similar behaviour, in flow path lengths and breakthrough times for example, is also shown in the simulated specific flows for each repository area. There are repository areas where the median for the starting points is very small, around 0.1 litres/m² per year, although these repository areas could also include positions with much larger flows. The 90th percentile values could thus be greater than 10 litres/m² per year.

Shoreline movement and flow paths from selected areas

Simulations are being carried out where the ocean level has varied from a level of ± 100 metres above sea level down to the current level of ± -0 metres above sea level. The aim of the simulations from a supra-regional perspective has been to demonstrate the principles for how flow paths from selected repository sites can change when the sea level and the position of the shoreline are changed. The simulations were carried out using a freshwater model, i.e. no salt water and no density effects, and also for stationary conditions. As in the earlier sensitivity studies, flow paths have been analysed with regard to spatial length distribution, breakthrough time and flow at the starting points. The greatest depth of the flow paths has also been analysed.

To analyse the movement of the shoreline and the properties of the flow paths, we have prepared five different calculation cases, all of which are based on a stationary base case: (i) Level above sea level set at +100 metres above sea level, which is equivalent to the Weichselian previous highest shoreline, (ii) sea level set at +75 metres above sea level, (iii) sea level set at +50 metres above sea level, (iv) sea level set at +25 metres above sea level and (v) sea level set at +0 metres above sea level (current situation). The different calculation cases reflect the movement of the shoreline over the past 14,000 years.

Flow paths from three areas have been compared. The locations of the areas are shown in Figure S-9. For each calculation case and for each area studied flow paths were simulated from repository depth (500 m).



(i) Sea level +100 metres above sea level



(ii) Sea level +0 metres above sea level (current situation)

Figure S-9. The position of the shoreline and the spread of the ocean for different levels on the ocean surface. The selected areas are marked using black lines.

Area B is a selected recharge area with advantageously interpreted properties with regard to flow paths from the repository. Area B is identical to the selected area approximately 15 km south-east of Hultsfred (favourably interpreted area), which has been discussed above. The area is situated above the highest shoreline.

Area C is located on a ridge approximately 15 km east of Hultsfred and comprises mainly recharge areas although there are also local discharge areas. The area is situated above the highest shoreline.

Area D is around 20 km west of Laxemar. The topographical level of the area is approximately 50 metres above sea level and the area is thus below the earlier highest shoreline. The area has been selected as it is a typical discharge area.

A comparison of the results obtained for the different areas indicates the following:

- Area B is a distinct recharge area. The majority of the flow paths from this area are affected when the shoreline is moved away from the area. The changes in the properties of the flow paths are greatest when the shoreline is close to the area and decrease when the shoreline moves farther away from the area. When the shoreline is at a distance greater than approximately 12 km, it is only the very longest and deepest flow paths (10%) that continue to be affected by the position of the shoreline. It should be pointed out, however, that these extreme supra-regional flow paths are affected by conceptual and numerical uncertainty in the simulation.
- Area C is characterised mainly by recharge but also by local discharge. Almost all flow paths from this area are affected when the shoreline is moved away from the area but only when the position of the shoreline is within a distance of approximately 6 km from the area. When the shoreline moves farther away it is only the longest and deepest flow paths (approximately 10%) that continue to follow the shoreline. When the shoreline is at a distance greater than approximately 12 km the flow paths from the area are not affected by the position of the shoreline (see Figure S-10).
- Area D is a distinct discharge area. When the whole area is above sea level, the flow paths from the area are virtually unaffected by the position of the shoreline.



Figure S-10. Area C. Analysis of the significance of the movement of the shoreline to the breakthrough time for the flow paths in an area characterised by recharge. The figure shows the breakthrough time as a function of the distance to the shoreline.

The flow paths from the three areas are changed in different characteristic ways as the position of the shoreline changes. Flow paths from repository areas in what is predominantly a recharge situation are affected most by the movement of the shoreline whilst flow paths from repository locations in discharge areas are virtually unaffected. For the system studied, with the permeability and the topography on which the regional model is based, the results show that for distinct recharge areas the significance of the position of the shoreline decreases considerably when the distance to the shoreline is greater than approximately 6 km.

Conclusions

A number of assumptions and model simplifications in conjunction with supra-regional groundwater simulation have been examined in this study. Using the methodology applied the following general conclusions can be drawn:

- *Top boundary condition:* compared with a topography-controlled top boundary condition, an infiltration-controlled boundary condition and with topography similar to that in eastern Småland, means that both the length of the flow paths and the breakthrough times from a repository only increase marginally (less than 10%). Specific flows at the starting points of flow paths decreased marginally (less than 10%).
- *Model depth:* The heavy saline groundwater at levels deeper than repository depth prevents to a large extent the groundwater turnover from being included in the widespread flow cells, down to large depths. It is considered that a supra-regional groundwater model with density-driven flow does not need to be deeper than approximately 3 km in the case of topography similar to that of eastern Småland. A reasonable general conclusion of the supra-regional modelling is that the flow paths which reach deep into the saline groundwater should be regarded as highly uncertain.
- *Initial conditions for salt content distribution in the case of transient simulation:* In the earlier study /Ericsson et al. 2006/ an initial condition (initial state) is used in which the salt content is based on observed salt content in deep boreholes. An alternative estimate of the initial situation (approximately 10,000 years BP) can be obtained by means of a simplified groundwater simulation of the whole of a preceding glacial period. With such an approach there is a certain difference for the very longest flow paths (above the 95th percentile for the population) which will be longer and will go slightly deeper. The longest breakthrough times will thus also be slightly longer.
- *Boundary conditions the model domain:* The boundaries of the model domain have been presumed to follow clear supra-regional surface water divides and have been assumed to be impervious. The implemented sensitivity study shows that modeled paths' lengths, breakthrough times and flow rates for flow lines which has been initiated along the model's outer boundaries give reasonable values, which are not numerically significant influenced by the applied boundary condition. The conclusion is based on a statistical comparison between flow paths initiated along a distinct topographical divide in the interior of the model and flow paths initiated along the sides of the model domain.
- *Conceptually uncertain flow paths:* A conceptual problem, particularly characteristic of supraregional simulation, involves calculating a flow field for a certain point in time, e.g. 2000 AD, and that this flow field is then analysed on the assumption that the flow field is a reasonably representative description of a future situation. The situation is often analysed as if it were also a stationary state. However, the differences between the model assumptions and the true properties of the flow field result in a certain proportion of the calculated flow paths becoming incomplete and conceptually uncertain. If flow paths are simulated and analysed in a supra-regional model for the purpose of looking for potentially good repository areas, the statistics for certain good areas become less favourable as the incomplete flow paths are excluded. In this study, the incomplete flow paths tend to be long and have long breakthrough times, although these values are subject to considerable uncertainty.
- *Comparison between the area near Hultsfred and Laxemar:* From a hydraulic point of view a favourably interpreted area approximately 15 km south-east of Hultsfred has been compared with the Laxemar area with regard to the properties of the flow paths. The comparison shows that it is above all the breakthrough times that are significantly longer from the selected area. For the 50th percentile, the breakthrough times are approximately 100 times greater in the selected area compared to Laxemar. The variation in breakthrough times, however, is extremely high within the selected area. This extreme variation indicates that local features are of major significance. A large proportion of the flow paths from the selected area is incomplete and conceptually uncertain.
- *Local variations:* An analysis has been conducted to study the variation in the properties of the flow paths which could be the case within a repository area and between different repository areas. The results show that the spread (variation) in the properties of the flow paths within one and the same repository area (size 1 km²) could be significant.
- Shoreline movement and flow paths: The flow paths from recharge and discharge areas are changed in different characteristic ways when the position of the shoreline is changed, e.g. as a result of land rise. On condition that the areas end up above the shoreline, the model results show that flow paths from distinct recharge areas are affected most by movement of the shoreline. Flow paths from distinct discharge areas are virtually unaffected by the change in the position of the shoreline. For the model domain studied, the simulations conducted show that for distinct recharge areas the impact from the position of the shoreline also decreases considerably when the distance to the shoreline is greater than approximately 6 km.

In the light of the above, the sensitivity studies conducted for assumptions and model simplifications in conjunction with supra-regional groundwater simulation have not changed the general conclusions presented in the SKB report /Ericsson et al. 2006/.

The established model has a high discretization in relation to size of the modeled domain. Particularly in the vertical direction the cell sizes are small near the surface. As a top boundary condition with infiltration has been applied in this study, and as the model grid follows the undulation of the topography, no explicit sensitivity studies have been conducted of the horizontal discretization of the model grid-cells and their impact on groundwater turnover at ground surface or groundwater recharge.

It can be stated that for the hydraulic conductivity fields which exist in the modeled region and with the discretization in the SKB report /Ericsson et al. 2006/ the vertical groundwater flow velocities at ground level were assessed to be reasonable in the reference cases in the previous study (cf. also /Marklund 2009/ and /Wörman et al. 2006/). This conclusion is partly based on the sensitivity analysis conducted in this study (see the section that discusses the top boundary condition and characteristics of flow paths).

A supra-regional simulation is based by necessity on generalised data with a relevant scale resolution in order to be able to provide indicative results in a general simulation problem. This normally requires averaging of input data and there is a risk that modeling can produce results on a regional scale that are over-interpreted. Geological features or deformation zones and permeabilities, however, could have a significant local hydrogeological impact in the relatively limited flow cells, kilometre scale, which are common in the topography of the Baltic shield. The local features must be mapped in conjunction with site investigations.

Supra-regional groundwater modeling often leads to some, although only a few, flow paths being extremely long. The flow times thus also become extremely long even from a geological perspective. These flow paths are conceptually, and in calculation terms, very uncertain, which could in turn mean that incorrect conclusions are drawn about the flow regime. Based on the sensitivity studies carried out in this study it can be said that there is a need to develop supra-regional modeling methodology with consideration given to transient flow paths and boundary conditions.

1 Inledning och syfte

1.1 Bakgrund

En av många geovetenskapliga frågeställningar vid lokalisering av ett slutförvar för använt kärnbränsle i Sverige handlar om förståelsen för de storskaliga flödesmönstren för det grundvatten som naturligt omsätts. Grundvattnet strömningsmönster, inklusive in- och utströmningsförhållanden har därför varit föremål för såväl SKB:s utredningsverksamhet som de granskande myndigheternas intresse (se t ex /Voss och Provost 2001, SKB 2003, Follin och Svensson 2003, Holmén et al. 2003, Ericsson et al. 2006, Geier 2006, Dverstorp 2007, Holmén 2008/). Exempel på mer vetenskapligt inriktade publikationer som nyligen presenterats i ämnesområdet är /Wörman et al. 2006, Wörman et al. 2007, Marklund et al. 2008, Gleeson et al. 2008/ och /Marklund 2009/.

Från granskningen av SKB:s redovisning av storregional grundvattenmodellering och mot bakgrund av SSI:s och SKI:s gemensamma bedömningar, brev daterade 2007-10-22, SSI dnr 2007/1562/26 och SKI dnr 2007/598 /SSI-SKI 2007/ samt SSI:s Rapport 07:11 /Dverstorp 2007/, har SKB låtit genomföra ett projekt som ska ses som en komplettering till "Ericsson L O, Holmén J, Rhén I, Blomquist N, 2006. Storregional grundvattenmodellering – fördjupad analys av flödesförhållanden i östra Småland: Jämförelse av olika konceptuella beskrivningar. SKB R-06-64, Svensk Kärnbränslehantering AB".

Från den nämnda SKB-rapporten och med den metodik som tillämpades, drogs följande generella slutsatser:

- Störst betydelse för det regionala flödesmönstret från förvarsdjup har topografin. Utströmningsområdena förekommer främst i topografins lägre delar och längs med dalgångar. Inströmningsområdena förekommer på höjderna. Den topografiska undulationen är av större betydelse än
 konduktivitetsfältets egenskaper. Olika litologiska enheter, regionala deformationszoner, lokal
 heterogenitet, kvartära avlagringar etc är av mindre betydelse än topografins undulation.
- Grundvattnets flödesmönster, för områden som beskrivs och analyseras med mest realistiska förutsättningar, kan beskrivas som en huvudsakligen lokal flödesprocess. Medianlängden på flödesvägarna är enligt rapporten av storleksordningen 2 km och andelen storregionala flödesvägar (längre än 10 km) är mycket liten.
- Om den hydrauliska konduktiviteten avtar mot djupet erhålls flödesceller med mer begränsad utsträckning än om så inte vore fallet.
- Anisotropi i konduktivitetsfältet, med större horisontell hydraulisk konduktivitet än vertikal, ger relativt sett större flödesceller och långa flödesvägar förlängs.
- Anisotropi i konduktivitetsfältet, med större vertikal hydraulisk konduktivitet än horisontell, ger relativt sett mer mindre flödesceller och flödesmönstret blir mer lokalt.
- Djupavtagande och horisontell anisotropi dominerar över litologiska enheters, deformationszoners, diabasgångars och kvartära avlagringarnas påverkan på flödesmönstret.
- Deformationszoner och diabasgångar har betydelse för det lokala flödesmönstret men liten betydelse för det regionala.
- Storregionala horisontella deformationszoner är ej tillräckligt hydrauliskt betydelsefulla för att påverka det storskaliga flödesmönstret.
- Lokal heterogenitet uppvisar samma allmänna flödesmönster men bedöms innebära att flödesvägar och genombrottstider ökar med cirka 30 %.

I SKB-rapporten /Ericsson et al. 2006/ gavs en generell konklusion att förvarsområden i inlandet inte nödvändigtvis har längre genombrottstider, längre flödeslängder eller mindre specifika flöden än förvarsområden närmare kustlinjen. Studien visade sammanfattningsvis att ökad konceptuell komplexitet ger ökad tendens till att mer lokala flödesceller utvecklas. De genomförda modelleringarna visade inte att ett inlandsförvar skulle vara lämpligare än ett kustnära när verklighetens geohydrologiska förutsättningar vägs in i beräkningarna. Grundvattenflödets storlek beror t ex i hög utsträckning på den lokala vattengenomsläppligheten. Vattengenomsläppligheten varierar inom vida gränser och ger sannolikt, lokalt sett, mycket större flödesvariationer än vad de olika systemegenskaperna gav i studien.

Vissa förvarsområden med potentiellt intressanta flödesmönster kunde i studien /Ericsson et al. 2006/ identifieras med viss konfidens, men om också grundvattenflödets storlek ska inkluderas i en analys blir osäkerheterna betydligt större. Grundvattenflödet beror, enligt nämnda studie, i hög utsträckning på den lokala vattengenomsläppligheten, vilken måste bestämmas i förvarsplatsens lokala perspektiv genom borrhålsundersökningar.

Statens strålskyddsinstituts Rapport 07:11 /Dverstorp 2007/ utvecklade och sammanfattade myndigheternas granskningssynpunkter på SKB:s storregionala grundvattenmodellering för östra Småland /Ericsson et al. 2006/. Granskningen genomfördes inom det samråd som SKB enligt ett regeringsbeslut har hållit med SSI och Statens kärnkraftinspektion (SKI) (efter 2008-07-01, Strålsäkerhetsmyndigheten) om platsundersökningarna för ett kärnbränsleförvar. Detta har inneburit att synpunkterna i myndighetsgranskningen har betraktats som ett allmänt råd till SKB. SSI:s bedömning var "att SKB:s studie var väl genomförd och att den bidrar till en ökad förståelse för olika faktorer av betydelse för grundvattnets strömningsmönster. SSI ansåg dock att utvärderingen av beräknings-resultaten var otillräcklig för att kunna dra entydiga slutsatser om betydelsen av storregional grundvattenströmning som lokaliseringsfaktor för ett slutförvar" /Dverstorp 2007/.

Myndigheternas viktigaste invändning var att SKB:s studie /Ericsson et al. 2006/ inte utvärderade och jämförde specifika platser/regioner i modellvolymen. SSI identifierade i sin granskning /Dverstorp 2007/ vissa antaganden och modellförenklingar som skulle kunna påverka andelen beräknade långa transportvägar och transporttider och ansåg att dessa faktorer borde utredas ytter-ligare för att stärka trovärdigheten i beräkningsresultaten. De antaganden och modellförenklingar som man önskade belysta var: modelldjup, topografins betydelse, grundvattenytans läge, modellens sidoränder, diskretisering, representation av geologiska strukturer samt bestämningar av flödesvägar. SSI önskade också en diskussion om det finns uppenbara lokala platsegenskaper som skulle kunna "förstöra" en, i ett regionalt perspektiv, plats med goda egenskaper och om dessa platsegenskaper kan identifieras utifrån tillgängliga data.

SKB vill med föreliggande projektrapport tillmötesgå myndigheterna inför tillståndsansökan för slutförvaret genom att ha genomfört önskade och rekommenderade kompletteringar till tidigare projekt om storregional grundvattenströmning som publicerats i SKB-rapporterna /SKB 2003/ och /Ericsson et al. 2006/.

1.2 Syfte

Föreliggande rapport har som mål att:

• Redovisa en kompletterade och fördjupad utvärdering av vissa konceptuella förenklingar, beskrivningar och modellosäkerheter vid regional grundvattenmodellering, som i första hand gäller modelldjup, topografi, grundvattenytans läge och modellränder.

Genomförande har baserats på geovetenskapligt tillgängliga datasammanställningar från Smålandsregionen men där olika konceptuella antaganden analyserats.

Vidare har projektet haft som mål att:

• Redovisa en jämförelse av hydrogeologiska förhållanden mellan specifika platser inom förstudiekommunerna Oskarshamn och Hultsfred genom utökad utvärdering av befintliga beräkningsresultat från analysen av regionala flödesförhållanden i östra Småland /Ericsson et al. 2006/.

1.3 Omfattning

Arbetets tonvikt har legat på analys av involverade osäkerheter vid utvärdering av in- och utströmningsmönster samt flödesvägars utseende. Projektet har inbegripit vissa utvalda hydrogeologiska konceptualiseringar och numerisk modellering med datorkoden Geoan /Holmén 2010/. Frågeställningar om regionala strömningsmönstret med hänsyn till permafrost- och glaciationsscenarier omfattas *ej* av föreliggande arbete. Dessa aspekter utreds inom ramen för säkerhetsanalysen och dess olika klimatscenarier.

Följande frågeställningar har analyserats:

- Topprandvillkoret och flödesvägarnas egenskaper.
- · Modellens djup, densitetsdrivet flöde och flödesvägarnas egenskaper.
- Alternativt initialvillkor: Betydelsen av att använda ett initialvillkor som baseras på en approximativ simulering av en glacial cykel.
- Betydelsen av modellens vertikala randvillkor (täta väggar) vid simulering av flödesvägar.
- Modellens transienta beteende, konceptuellt osäkra flödesvägar och ofullständiga flödesvägar.
- Jämförelse av egenskaper för flödesvägar från ett utvalt och tolkat som fördelaktigt område med egenskaper för flödesvägar från det regionala undersökningsområdet vid Laxemar, Oskarshamns kommun.
- Analys av variationen i flödesvägarnas egenskaper från olika förvarsområden.
- Strandlinjeförskjutning och flödesvägar från utvalda områden.
- En visualisering av salinitet och flödesvägar inom det storregionala området.

Analyserna av respektive frågeställning bygger på en konceptuell modell. Den konceptuella modellen förutsätter känd information om det studerade systemets egenskaper (t ex topografi, utbredning på olika jordarter, värden på konduktivitet etc) samt en beskrivning av de fysikaliska processer som styr det studerade systemet (t ex Darcys lag och advektions-dispersionsekvationen). Den konceptuella modellen innehåller dock endast information som är relevant med avseende på studiens syfte. Den konceptuella modellen presenteras i kapitel 2 och 3.

Baserat på den konceptuella modellen har en formell modell upprättats. Den formella modellen är en matematisk beskrivning av den konceptuella modellen med hänsyn till valda randvillkor. Den formella modellens grundläggande matematiska formulering presenteras i sektion 3.2. Den formella modellen har använts för simuleringar. Simuleringarna, och resultat av simuleringarna, presenteras i kapitel 5 till 13. Slutsatser presenteras i kapitel 14.

Liksom för den tidigare rapporten, /Ericsson et al. 2006/, är fokus i modellberäkningarnas resultat riktat mot det konceptuella underlaget för östra Småland. Östra Småland används alltså som en exemplifierande region.

1.4 Rapportens disposition

Rapporten disponeras på följande vis:

- I kapitel 2 presenteras regionen östra Småland i sammanfattning. Här redovisas i sammanfattande form topografi, geologi, hydrogeologiska förutsättningar etc.
- I kapitel 3 introduceras den numeriska beräkningsmetoden och den använda programkoden Geoan. Vidare presenteras det matematiska angreppssättet för flödesberäkningarna. I kapitlet behandlas dessutom modelldomänens diskretisering, randvillkor och egenskaper i sammanfattning.
- I kapitel 4, presenteras kortfattat de olika frågeställningarna och de olika beräkningsfallen.
- I kapitel 5 till 12 redovisas modelleringarna med resultat för de frågeställningar som presenterats i kapitel 1.3.
- En visualisering av flödesvägar presenteras i kapitel 13.
- I kapitel 14 ges en sammanvägd bedömning för de beräkningsfall som studien omfattat.

2 Det storregionala området

För en fylligare beskrivning av modellområdet hänvisas till /Ericsson et al. 2006/. Det följande är en sammanfattning direkt hämtad från denna referens.

Det studerade området utgörs av fem regionala avrinningsområden i östra Småland (Emån, Virån, Marströmmen samt kustområdena omkring Oskarhamn och Simpevarpshalvön). Grundvattenmodellen representerar ett mycket stort område, cirka 80·130 km².

Modellområdets topografiska relief tillhör huvudsakligen delar av det sönderbrutna, delvis nederoderade subkambriska peneplanet, se figur 2-1. De västligaste delarna av modellområdet tillhör den sydsmåländska urbergsslätten. Områdets högsta nivåer ligger är cirka 360 meter över havet och peneplanet sluttar mot Östersjön där kambriskt täckberg uppträder vid Kalmarsund. Utmed sprickzoner i den sönderbrutna terrängen har de dominerande vattendragens dalgångar utbildats. Modellområdet ligger till stora delar över högsta kustlinjen (HK), 100 meter över havet, se figur 12-1. Den helt dominerande jordarten är morän. Stråk med isälvssediment, dvs åsar, kames och deltan, löper i huvudsakligen nordväst-sydostlig riktning.

Berggrunden inom modellområdet domineras av bergarter som hör till det "Transskandinaviska magmatiska bältet". I modellområdet består bergarterna huvudsakligen av olika typer av djupbergarter, där s k Smålands-Värmlandsgraniter är vanligast. Även sura ytbergarter av vulkaniskt ursprung förekommer liksom yngre djupbergarter som tillhör den s k Götemarsviten. I den västra delen av modellregionen uppträder Almesåkragruppens sedimentära bergarter och med dem associerade horisontella diabaser, se figur 2-2. Vertikala långsträckta breda (50–100 m) diabasgångar som hör till de s k Blekinge-Dalarnadiabaserna uppträder med ungefärligen nord-sydlig riktning i modellområdet.

Modellregionen är vidsträckt från Östersjön till småländska höglandet. Det innebär att nederbörden skiljer sig stort med varierande nettonederbörd till följd. Vid kusten är nettonederbörden cirka 170 mm/år och vid den västra modellranden cirka 310 mm/år. I den svenska berg-/moränterrängen överstiger ytlagrens infiltrationskapacitet i de flesta fall nederbördsintensiteterna. Detta innebär i sin tur att merparten av nettonederbörden omsätts som grundvatten och att de värden som framgår av specifik avrinning kan betraktas som översiktlig grundvattenomsättning för ett område. Hydrologisk information (avrinningsområden, vattendrag och sjöar) har inhämtats från SMHI:s databaser. I vissa fall saknas vattendrag i SMHI:s material och därför har viss kompletterande digitalisering från översiktkartor utförts. Hydrologisk data som använts för modellen utgår från SMHI /Brandt et al. 1994/ i form av medelvärden för perioden 1961–1990.

Liksom i /Ericsson et al. 2006/ bygger denna studie på att det förutsätts en relation mellan hydraulisk konduktivitet och respektive jordart/bergart inom modellregionen. De kvartära avlagringarna har delats in i hydrogeologiska enheter med hänsyn till de dominerande jordarterna isälvsmaterial och morän. Bergarterna enligt figur 2-2 har varit utgångspunkt för en hydrogeologisk domänindelning. Berggrundens genomsläpplighet bygger på de hydrogeologiska kartorna för Jönköpings /SGU 1989/ respektive Kalmar län /SGU 1981/. Dessa genomsläpplighetsvärden representerar K-värden för bergarternas ytligare nivåer. Värdena i de hydrogeologiska kartbladen har därefter kopplats till bergarterna i den nationella bergartsdatabasen.

För att möjliggöra modelleringar har en statistisk utvärdering utförts av K-värden för litologiska enheter baserat på brunnsuppgifter gällande uttagskapacitet och mediandjup i de hydrogeologiska kartbladen /Ericsson et al. 2006/. K-värdet för en litologisk enhet beräknades utifrån brunnskapaciteten (Q), mediandjup (d) på brunnar samt antal brunnar i respektive kapacitetsintervall. K-värdet för respektive brunnskapacitet uppskattades genom sambandet: $K=1,2\cdotQ/d^2$ (se exempelvis /Gustafson 2009/). Därefter uppskattades medelvärdet och standardavvikelsen av ¹⁰Log (K). Brunnsarkivets data baseras på enkla kapacitetstester som genomförs av brunnsborrare. Kontrollerade pumpningar är sällsynta när brunnskapaciteter ska bedömas efter genomförd borrning. Det är troligt att låga värden överskattas och att höga genomsläpplighetsvärden underskattas vid de förenklade testförfaranden som används. För att öka tilliten i de utvärderade standardavvikelserna jämfördes bearbetad SGU-data för Smålandsgranit med den mer tillförlitliga databasen för samma bergart från platsundersökningarna vid Simpevarpsområdet. Detta har inneburit att standardavvikelserna från brunnsarkivets data har normaliserats och justerats mot platsundersökningarnas data, se tabell 2-1.



Figur 2-1. Höjdmodell över det storregionala området (ur GSD-Höjddatabasen © Lantmäteriverket Gävle 2001, medgivande M2001/5268). Av sekretesskäl redovisas inte batymetrin.

Bergart*	Landskod databas	Modell K-geom.med (m/s)	Skalad std avv 10Log(K) (m/s)	Kommentar
Yngsta diabas	503	6.38E-08	1.932	Almesåkraformationen
Transskandinaviska granit-porfyrbältet**	1	1.60E–07	1.300	
Götemar- Jungfrungranit m fl	607	1.60E–07	1.300	
Smålands-Värmlandsgranit, Rätan- och Sorselegranit	756	1.60E-07	1.300	
Äldsta graniter (urgraniter): tonalit, granodio- rit, granit	758	4.83E-08	1.366	
Sandsten, kambrium	338	9.50E-07	1.231	
Jotnisk sandsten, konglomerat, lerskiffer	610	6.59E–08	1.470	Almesåkraformationen
Gabbro, delvis ultrabasisk, diorit, amfibolit	757	2.60E-08	0.940	
Basiska vulkaniska bergarter	767	4.00E-08	1.123	
Gråvacka, skiffer, kvartsit	775	2.84E-08	1.203	
Gråvacka, skiffer, kvartsit och arkos, delvis omvandlade till gnejs och migmatit	771	3.80E-07	1.260	
Sura vulkaniska bergarter	754	2.36E-08	1.437	
Sura vulkaniska bergarter	768	5.09E-08	1.170	

Tabell 2-1. Hydraulisk konduktivitet och standardavvikelse för olika litologier som används som ingångsdata för grundvattenmodellen.

* Svensk översättning hämtad ifrån /SNA 2002/ för litologier ur den Svenska delen av den Fennoskandiska skölden /SGU 2005a/.

** Information om bergart saknas i litologisk databas /SGU 2005b/), information hämtad ifrån maringeologisk karta i /SNA 2002/.



Figur 2-2. Utdrag ur bergartskartan den Svenska delen av den Fennoskandiska skölden /SGU 2005a/. Ur SGU:s databaser © Sveriges geologiska undersökning, dnr: 30-414/2005 /SGU 2005b/.

Transmissivitet (T) i deformationszoner har studerats vid SKB:s platsundersökningar i Oskarhamns kommun. Transmissivitetsvärden för spröda deformationszoner med avseende på djup har analyserats för olika anpassade interpolationssamband. Deformationszonernas genomsläpplighet varierar starkt men en viss djupavtagande trend finns. Djupavtagande trender för zoner diskuteras vidare i delkapitel 3.8. Även den hydrauliska konduktivitetens (K) djupberoende, för testskalan 100 m, har studerats vid SKB:s platsundersökningar i Oskarhamns kommun. Konduktiviteten minskar med djupet, se delkapitel 3.7. I beräkningarna har använts konduktivitet för bergmassa exklusive zoner.

3 Beräkningskod och konceptuell modell

3.1 Den nya modellen och den tidigare modellen – en jämförelse

Den matematiska modell som använts i denna studie är direkt baserad på den modell som användes i den tidigare studien av det regionala flödesmönstret i östra Småland. Samma område studeras, samma topografi, samma sprickzoner, samma litologiska enheter, samma kvartärgeologiska enheter, samma genomsläpplighet och porositet etc. För en detaljerad presentation av bakgrundsdata till den upprättade modellen hänvisar vi till rapporten /Ericsson et al. 2006/.

Modellen som används i denna studie är inte identisk med modellen som användes i den tidigare studien, vissa mindre förändringar av den tidigare modellen har utförts; främst för att kunna studeras olika nya beräkningsfall. De utförda förändringarna är:

- Den nya modellens randvillkor längs med modellen övre yta (topografi) är specificerat potentiell grundvattenbildning (flödesrandvillkor) och dessutom inkluderar modellen ytvattenflöden. Den specificerade potentiella grundvattenbildning är kalibrerad så att de beräknade ytvattenflödena i modellen stämmer med de av SMHI uppmätta och beräknade värdena på avrinningen från de olika avrinningsområdena som inkluderas i modellen. (I den tidigare modellen definierades trycket längs med modellens topografi, och inga ytvattenflöden förekom i den tidigare modellen.)
- Den nya modellens djup är större än i den tidigare studien. För det nya basfallet är modellens basnivå satt till nivån –6 km. I den tidigare studien var modellens basnivå satt till –2,5 km, förutom i vissa sensitivitetsfall.
- Topografin i den nya modellen är identisk med topografin i den tidigare modellen. I horisontalplanet är modellens cellstorlek densamma som i den tidigare studien: 333·333 m, förutom längs med sprickzoner och diabasgångar. I den tidigare studien definierades sprickzoner och diabasgångar som explicita strukturer i beräkningsnätet, dvs cellernas storlek anpassades längs med zonerna. I den tidigare modellen var cellernas horisontala storlek längs med zonerna 100·100 m, cellernas genomsläpplighet anpassades också längs med zonerna. I den nya modellen är dessa strukturer definierade som implicita strukturer. Med implicita strukturer menas att cellstorleken inte förändras (333·333 m), däremot förändras cellernas genomsläpplighet längs med zonerna. Genomsläpplighet längs med zonerna blir något annorlunda i denna studie i jämförelse med den tidigare studien, eftersom cellstorlekarna är olika. Med avseende på det totala grundvattenflödet genom zoner och omkringliggande berg ska de både metoderna dock producera samma grundvattenflöde.
- I den upprättade modellen har diabasgångarna samma genomsläpplighet som deformationszonerna. I den tidigare modellen definierades diabasgångarna (i bas fallet) med en tätare kärna. Den tidigare studien inkluderade ett antal sensitivitetsfall i vilka genomsläppligheten för diabasgångarnas kärna varierades. Följande slutsats erhölls, se /Ericsson et al. 2006/: "Resultatet av analysen av flödesvägar visar inte på några märkbara skillnader mellan de tre studerade fallen. Orsaken till detta är diabasgångarnas stora genomsläpplighet längs med gångarna. Grundvatten strömmar inte gärna tvärs över diabasgångarna i fall 5, och det gör det heller inte när diabasgångarna görs ännu mindre genomsläppliga för flöde tvärs över gångarna. Grundvatten som når fram till en diabasgång tenderar att strömma längs med gången, där genomsläppligheten är stor, i stället för tvärs över gången där genomsläppligheten är liten."
- För att numeriskt lösa de studerade differentialekvationerna så är det nödvändigt att upprätta ett beräkningsnät som representerar det studerade systemet. Den tidigare upprättade modellen använde sig av ett ostrukturerat beräkningsnät med strikt horisontala lager. Beräkningsnätet i den nya modellen är ett strukturerat nät, och i den övre delen av modellen följer beräkningsnätets lager topografin och på större djup (under 2 km) är lagren horisontala.
- Den nya modellen är upprättad med modell koden Geoan. Den tidigare modellen upprättades med modellkoden DarcyTools. Båda koderna använder sig av samma grundläggande matematiska formulering, finita differenser med en beräkningsnod i centrum av varje beräkningscell. Eftersom den grundläggande matematiska formuleringen är densamma i de båda beräkningskoderna är en överföring av modellegenskaper mellan de båda koderna en relativt okomplicerad operation.

Geoan valdes huvudsakligen av fyra skäl: (i) Det ansågs önskvärt att använda den metod som finns i Geoan för att beräkna den fria vattenytans position, när topprandvillkoret är ett flödesrandvillkor med ytvattenflöden. (ii) Beräkningsnätet i Geoan behöver inte vara definierat med strikt horisontala lager (som i den gamla modellen), i den övre delen av den nya modellen följer beräkningsnätets lager topografins undulation i detalj, vilket är en fördel när den fria vattenytans position ska beräknas. (iii) Geoan innehåller rutiner för att effektivt beräkna flödesvägar och kan separera mellan numeriskt välbestämda och numeriskt ofullständiga flödesvägar, och kan dessutom inkludera numeriskt ofullständiga flödesvägar i en analys av alla flödesvägars egenskaper. (iv) Alla rutiner för att statistiskt analysera flödesvägarna finns i Geoan.

3.2 Formell matematisk modell

Grundvattenflöde och ytvattenflöden, densitet och salinitet är beräknade med den numeriska matematiska modellen Geoan /Holmén 2010/. Den upprättade formella modellen är en matematisk beskrivning av det studerade flödessystemet. Beskrivningen bygger på en kontinuumbetraktelse. Beskrivningen är tredimensionell och kan inkludera tidsberoende och densitetsberoende effekter.

Geoan använder finita differensmetoden för att numeriskt lösa det matematiska problemet. Det studerade modellområdet indelas i beräkningsceller, som kan vara av olika storlekar. Egenskaper hos det studerade systemet som är skalärer (t ex tryck, porositet och salinitet) definieras i cellernas centrum, men riktningsberoende egenskaper (t ex hydraulisk konduktivitet och specifikt flöde) definieras eller beräknas för beräkningscellernas väggar. I Geoan formuleras den övergripande flödes-ekvationen för grundvattenflödet med följande uttryck /Holmén 2010/. Ekvationen är formulerad för tryck och inkluderar densitetseffekter, ekvationen baseras på Darcys lag och flödeskontinuitet.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho g}{\mu} k_x \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\rho g}{\mu} k_y \frac{\partial p}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\rho g}{\mu} k_z \frac{\partial (p+z\rho_F)}{\partial z} \right) - VF = Ss \frac{\partial p}{\partial t} \quad \text{Ekvation 3-1}$$

p = *Tryck*, *definierat i meter vattenpelare utan löst komponent (sötvatten)* [*m*]

k = Permeabilitet [m²]

 $\rho = Vattnets \ densitet \ med \ lösta \ komponenter \ (t \ ex \ salt) \ [kg/m³]$

- $\rho_F = Densitets faktor [-]$
- $\mu = Dynamisk viskositet [Pa s] [kg/m/s]$
- g = Gravitations acceleration en [m/s²]

VF = Volymetriskt flöde (flöde per volymsenhet, specificerat in- och utflöde av vatten) [s⁻¹]

 $Ss = Magasinskoefficient [m^{-1}]$

$$t = Tid [s]$$

Densitetsfaktorn (ρ_F) som används i ekvationen ovan är en dimensionslös variabel, som definieras på följande vis:

$$\rho_F = \frac{\theta + W_{ref}}{W_{ref}}$$

Ekvation 3-2

 $\rho_F = Densitetsfaktor [--]$ $\theta = Masskoncentration av den lösta komponenten [kg/m³]$ $<math>W_{ref} = Vikten av 1 m³ vatten utan den lösta komponenten [kg/m³]$

Transport av salt behandlas parallellt med två olika processer i Geoan:

• Advektion-dispersion-diffusion genom det kontinuerliga flödesmedium som representeras av beräkningscellernas flödesporositet (effektiva porositet). Detta är den primära transportprocessen med vilket den lösta komponenten (salt) rör sig genom modellen.

Ett diffusivt utbyte av salt löst i vatten mellan strömmande vätska i beräkningscellernas effektiva
porositet och stillastående vätska i en porvolym som inte ingår i den effektiva porositeten. Detta
utbyte äger rum på en skala mindre än cellernas storlek, därför kallar vi denna process för inre cell
diffusion, ibland även kallad matris diffusion. Detta är en sekundär transportprocess som fördröjer
en förändring i koncentration i den strömmande vätskan. Inre cell diffusion (matris diffusion)
påverkar tidsskalan för saltvattnets förflyttning genom modellen. Inre cell diffusion (matris diffusion) påverkar inte direkt grundvattnets flödesmönster, endast indirekt påverkas grundvattnets
flödesmönster genom att inre cell diffusion (matris diffusion)

Ekvationen för masstransport av en löst komponent (t ex salt), genom advektion-dispersion-diffusion, formuleras på följande vis i Geoan, se /Holmén 2010/. Ekvationen är formulerad för koncentration av en löst komponent (t ex salt), ekvationen baseras på den välkända advektions-diffusionsekvationen och transportkontinuitet (masskontinuitet). Dispersionskoefficienten diskuteras mer i detalj i Appendix C.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho u_x \theta_F - \rho \eta D_x \frac{\partial \theta_F}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho u_y \theta_F - \rho \eta D_y \frac{\partial \theta_F}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho u_z \theta_F - \rho \eta D_z \frac{\partial \theta_F}{\partial z} \right) - U_{spec} = \frac{\partial \theta_F}{\partial t} \eta \rho$$

Ekvation 3-3

 u_x , u_y , $u_z = Darcyhastigheten$ (specifika flödet) i x-, y- och z-riktningarna [m/s]

 $\rho = Vattnets \ densitet \ med \ lösta \ komponenter \ (t \ ex \ salt) \ [kg/m³]$

 $\eta = Effektiv porositet för flödesmedia [-]$

 D_x , D_y , D_z , = Dispersionskoefficienten i x-, y- och z-riktningarna $[m^2/s]$

 $\theta_F = Koncentrationsfaktor för den lösta komponenten (dimension lös) [-]$

 $U_{spec} = Specificerat$ in- och utflöde av massa [kg/s m³]

t = Tid [s]

Där:

$$\theta_F = \frac{\theta}{W_{ref}}$$

 $\theta_F = Koncentrationsfaktor för den lösta komponenten (dimensionslös) [-]$ $<math>\theta = Masskoncentration av den lösta komponenten [kg/m³]$ $<math>W_{ref} = Vikten av 1 m³ vatten utan den lösta komponenten [kg/m³]$

Inre celldiffusion, (matris diffusion) dvs, det diffusiva utbytet av en löst komponent (t ex salt) mellan strömmande vätska i beräkningscellernas effektiva porositet och stillastående vätska i en porvolym som inte ingår i den effektiva porositeten, simuleras genom en formulering av Ficks lag. Den stillastående vätskans koncentration varierar under simuleringen beroende på det beräknade diffusiva utbytet. Matematisk formulering enligt nedan:

Det diffusiva utbytet av en löst komponent (i en cell):

. .

$$M_{sg} = A_{sg} \rho \eta D_{sg} \frac{\Delta \theta_F}{\Delta L_{sg}}$$

$$\theta_F = \frac{\theta}{W_{ref}}$$

$$A_{sg} = Vol_{cell} F_{sga}$$

Ekvation 3-4

 $M_{sg} = Massflöde mellan massa i stillastående vätska och massa i strömmande vätska [kg/s]$ $<math>A_{sg} = Area över vilken den inre cell diffusionen äger rum [m²]$ $<math>\rho = Vattnets densitet (med lösta komponenter) [kg/m³]$ $D_{sg} = Diffusionskoefficient mellan stillastående vätska och strömmande vätska [m²/s]$ $<math>\Delta \theta_F = Skillnad i koncentrationsfaktor mellan stillastående vätska och strömmande vätska [--]$ $<math>\Delta L_{sg} = Längd över vilken den inre cell diffusionen äger rum [m]$ $<math>\theta_F = Koncentrationsfaktor för den stillastående vätskan (dimensionslös) [--]$ $<math>\theta = Masskoncentration i stillastående vätska [kg/m³]$ $W_{ref} = Vikten av 1 m³ vatten utan den lösta komponenten [kg/m³]$ $<math>\eta = Effektiv porositet för den studerade cellen [--]$ $Vol_{cell} = Den studerade cellens volym [m³]$ $F_{sga} = Faktor som definierar kvoten mellan diffusionsarea och porvolym [m²/m³]$

Mängden massa av den lösta komponenten i den stillastående vattenvolymen (i en cell):

$$Tm_{sg} = Vol_{cell} \eta_{sg} \theta + M_{sg} \Delta t$$

$$\theta = \frac{Tm_{sg}}{Vol_{cell} \eta_{sg}}$$

Ekvation 3-5

 $Tm_{sg} = M$ ängden massa av den lösta komponenten i den stillastående vattenvolymen [kg] $\eta_{sg} = Porositet$ för den volym i vilken det stillastående vattnet förekommer [–] $\Delta t = Tidstegets$ längd [s]

Parametrarna som beskriver storleken på den inre cell diffusionen (matris diffusionen) anpassades så att storleken på den inre cell diffusionen i denna studie är jämförbar med motsvarande process i den tidigare modellen.

3.3 Topografiska vattendelare, modellområdets avgränsning och modellområdets topografi

Det studerade området avgränsas rumsligt av regionala topografiska ytvattendelare (se figurerna 3-1 och 3-2).

Det studerade området innehåller fem regionala avrinningsområden, varav tre områden är betydelsefulla nog för att ha namngetts av SMHI, områdena är markerade i figur 3-2 och har följande namn och storlek:

- Område 1 (grönt): Emåns avrinningsområde. SMHI No. 74. Area: 4 472 km²
- Område 2: (ljusgrönt) Viråns avrinningsområde. SMHI No. 73. Area: 588 km²
- Område 3: (brunt) Marströmmens avrinningsområde. SMHI No. 72. Area: 496 km²

Det aktiva området i den numeriska modellen utgörs av de fem avrinningsområdena som de är definierade i figurerna 3-1 och 3-2. Dessutom inkluderar modellen ett stycke av havet (havsbotten) utanför kustlinjen. Grundvattenmodellen representerar ett mycket stort område, utbredningen är i riktning nord-syd cirka 79 km och i riktning öst-väst cirka 133 km. Modellens interna koordinatsystem har origo vid: 1429064, 6329723 (koordinatsystem RT90 2.5 gV). Modellens tredimensionella geometri framgår av figurerna 3-3 och 3-4.

Det kan vara av intresse att notera förhållandet mellan modellens horisontala storlek och dess tjocklek (djup). Den studerade modelldomänen är en tre dimensionell kropp som är relativt tunn i jämförelse med dess längd (och bredd). I de flesta tredimensionella figurer som presenteras i denna rapport är skalan för den vertikala Z axeln cirka sex gånger större än skalan för de horisontala x- och y-axlarna, detta sätt att presentera resultat används för att tydligare illustrera modellens egenskaper med djupet. Modellens verkliga form framgår dock av figur 3-4, i denna figur är skalan för x-, y- och z-axlarna är desamma.



Figur 3-1. Regionala topografiska ytvattendelare i södra Sverige. Det studerande modellområdet innanför kustlinjen är markerat med färg.



Figur 3-2. Det studerade modellområdet. Den brandgula linjen markerar modellens horisontala storlek. De ljusblå linjerna visar position för regionala topografiska ytvattendelare. Siffrorna markerar tre största regionala avrinningsområdena inom det studerade modellområdet: 1=Emån, 2=Virån, 3=Marströmmen.



Figur 3-3. Modellens geometri. Basnivån är definierad till –6 000 m ö h. Skalan för z-axeln är sex gånger större än skalan för x- och y-axlarna.



Figur 3-4. Modellens geometri. Basnivån är definierad till –6 000 m ö h. Skalan för x-, y- och z-axlarna är densamma.

3.4 Beräkningsnät

Modellen består av ett mycket stort antal tredimensionella celler, ordnade i ett system av rader, kolumner och lager kallat beräkningsnätet, ("modellgridden"). I den övre delen av modellen följer beräkningsnätets lager topografin och på större djup (under cirka 2 km) är lagren horisontala. Nära markytan är cellernas vertikala storlek liten med ökande tjocklek med djupet: 3 m, 5 m, 8 m, 10 m osv. Den ökande lagertjockleken motiveras av en önskan att på ett bra sätt representera de kvartära avlagringarna och den djupavtagande genomsläppligheten. Dessutom är en hög vertikal upplösning nära markytan nödvändig för att på ett bra sätt beräkna grundvattenytans position i en modell där topprandvillkoret är definierat som ett flödesrandvillkor (se nedan). Den horisontella cell storleken är 333·333 m. Modellen innehåller totalt nära 2 miljoner aktiva celler.

3.5 Rand- och initialvillkor

Modellen är rumsligt begränsad av vertikala sidor, en horisontal botten och en övre yta som följer topografin. Modellens geometri framgår av figurerna 3-3 och 3-4. Modellens topografi framgår också av figur 3-2.

3.5.1 Randvillkor vid modellens sidor

Modellens vertikala sidor är placerade längs med regionala topografiska ytvattendelare (se figur 3-2), dessa strukturer utgör gränser för ytvattenflöden och det är sannolikt att de också utgör betydelsefulla barriärer för grundvattenflödet. Det är dock möjligt att det i verkligheten sker ett visst mindre grundvattenflöde också över regionala topografiska ytvattendelare, t ex där större sprickzoner skär vattendelaren, men de regionala vattendelarna är emellertid de bästa gränser som kan identifieras inom det studerade området. I modellen definieras de vertikala sidorna som helt täta, inget grundvattenflöde kan alltså passera över dessa gränser i modellen ("no-flow boundary condition"). Modellens östra rand är placerad under havet, åtskilliga kilometer från kusten. Det är sannolikt att de verkliga grundvattenflödena under havet (ett gott stycke från kusten) är mycket små och huvudsakligen riktade uppåt (delvis beroende på landhöjningen). Modellens östra vertikala gräns (belägen under havet) är liksom modellens övriga vertikala sidor definierad som en tät rand. De applicerade randvillkoren presenteras schematiskt i figur 3-5.



Figur 3-5. Schematisk presentation av modellens randvillkor. Notera att denna figur inte är en visualisering av grundvattnets flödesmönster i den storregionala modellen.

3.5.2 Randvillkor vid modellens botten

I det nya basfallet ligger modellen botten på ett mycket stort djup, på nivån –6 000 m ö h. I vissa beräkningsfall, som presenteras i de följande kapitlen, har modellens bas satts vid mindre djup, t ex, djupet 3 300 och 2 500 m. Grundvattenflödena på stora djup i berget är mycket små. I verkligheten förekommer ett mycket tungt saltvatten med hög salinitet på stora djup i berget. På nivåer över de mycket stora djup där saltvatten med hög salinitet förekommer bestäms flödesmönstret för sött och salt grundvatten huvudsakligen av topografins undulation. Det vatten med hög salinitet som förekommer på stort djup är mindre påverkat av topografin och fungerar troligen delvis som ett golv som begränsar det vertikala flödet för sött grundvattnet och för grundvatten med mindre salthalt. Man kan indela det studerade flödessystemet i två teoretiska domäner: en ytligare domän där sött grundvatten och grundvatten med hög salinitet. På grund av den stora densitetsskillnaden mellan de två domänerna kommer det sötare grundvattnet att endast i mycket ringa omfattning penetrera ner i grundvattnet med hög salinitet. Av den ovan angivna orsaken, och därför att grundvattenflödet på stora djup är mycket litet, kan modellens botten definieras som tät. De applicerade randvillkoren presenteras schematiskt i figur 3-5.

3.5.3 Randvillkor vid modellens övre yta

Det svenska klimatet med stor nederbörd, låga temperaturer (under vintertid) och relativt begränsad avdunstning, ger upphov till en stor avrinning. På grund av denna stora mängd vatten som finns tillgängligt för att bilda grundvatten så tenderar grundvattenytans nivå i områden med begränsad genomsläpplighet (lera, moränområden och bergområden mm) att huvudsakligen ligga mycket nära markytan. Därmed kommer den lokala topografins undulation att bestämma grundvattennivåer och i väsentlig grad flödesriktningar för det lokala grundvattensystemet. Denna slutsats gäller dock inte för ett mycket genomsläpplig material som grova glacifluviala sediment (åsar), men slutsatsen gäller för de områden som omger och avgränsar sådana material. Indirekt beror därför grundvattennivåerna i grova glacifluviala sediment (åsar) också på topografin, eftersom den omgivande topografin ofta definierar en tröskelnivå som kontrollerar grundvattennivån i åsen.

Grundvattenflöden från stort djup i berget strömmar mot tydliga lågpunkter i topografin (utströmningsområden), i form av dalgångar. I dessa utströmningsområden ligger grundvattenytan vid markytan, eller mycket nära markytan. På de omgivande höjderna förekommer inströmningsområden och i dessa områden ligger grundvattenytan under markytan, dock sällan mer än någon, eller några, meter under markytan.

Simuleringar av /Holmén et al. 2005/ för ett område nära Forsmarks kärnkraftverk demonstrerade att längder och genombrottstider för flödesvägar från stort djup är tämligen okänsliga för grundvattenytans årstidsvariationer och därmed för mindre variationer i grundvattenytans nivå i inströmningsområden.

Om syftet med en grundvattenmodellering är att simulera flödesvägar från stora djup kan grundvattenytans nivå approximeras till markytans nivå, förutom i områden med mycket genomsläppliga kvartära avlagringar.

Den föreliggande modellens randvillkor längs med modellen övre yta (topprandvillkor) är en specificerad potentiell grundvattenbildning (ett randvillkor baserat på ett givet flöde, dvs ett flödesrandvillkor) och dessutom inkluderar modellen ytvattenflöden. Den specificerade potentiella grundvattenbildning är kalibrerad så att storleken på de beräknade ytvattenflödena i modellen stämmer med de av SMHI uppmätta och beräknade värdena på avrinningen från de olika avrinningsområdena som inkluderas i modellen.

Ett korrekt flödesrandvillkor med ytvattenflöden på toppen av modellen är att föredra framför ett tryckrandvillkor med en korrigerad nivå på den givna tryckytan, eftersom ett flödesrandvillkor är en bättre approximation av systemets verkliga beteende.

Med flödesrandvillkor i den upprättade modellen så beräknar modellen grundvattenytans position, grundvattenbildningen och ytvattenflöden utifrån modellens genomsläpplighet, topografin och den potentiella grundvattenbildningen. Grundvattenytan kan aldrig vara högre än topografin, även om grundvattenpotentialen i djupare lager kan vara större än den topografiska nivån. Områden där den beräknade grundvattennivån ligger under den topografiska nivån är inströmningsområden. De applicerade randvillkoren presenteras schematiskt i figur 3-5.

För att analysera topprandvillkorets betydelse har vi analyserat ett antal beräkningsfall med olika topprandvillkor och olika värden på genomsläppligheten när markytan, dessa beräkningar presenteras i kapitel 5.

3.5.4 Randvillkor vid simuleringar av densitetsberoende flöde

När densitetsberoende flöde simuleras så måste också randvillkor definieras för grundvattnets salthalt. Simuleringarna med densitetsberoende flöde är tidsberoende (transienta) och därför måste ett initialtillstånd definieras, från detta tillstånd simuleras sedan det studerade systemets utveckling fram till dagens situation (2000 AD).

Startpunkten för de transienta och densitetsberoende simuleringarna har satts till 10 000 år före nuvarande situation (alltså ett initaltillstånd vid 10 000 år BP). I den tidigare studien analyserades effekten av att initialtillståndet definierades till 14 000 år BP, samma resultat erhölls som då det initiala tillståndet sattes till 10 000 år BP. I denna studie har vi analyserat effekten av ett alternativt initialtillstånd, som baseras på en förenklad simulering av en glacial period, detta diskuteras i kapitel 7. De densitetsberoende simuleringarna är transienta och kan illustreras med följande tidslinje, se figur 3-6.

För den initiala tidpunkten definieras en viss fördelning av salthalt med djupet och isostatiska tryck beräknas för den applicerade initiala saltfördelningen. Modellens botten definieras som tät och med en specificerad hög salthalt i grundvattnet, modellens sidor definieras som täta men utan någon given specificerad salthalt. Modellen övre yta är definierad med ett specificerat tryck, vattnet som inströmmar innanför kustlinjen definieras som sötvatten.

De applicerade randvillkoren presenteras schematiskt i figur 3-7.

I den upprättade modellen används följande definition på salinitet: mängden löst salt (TDS) per volymsenhet. TDS är ett engelskt uttryck "total dissolved solids". Salinitet lika med 10 % betyder alltså: 100 gram TDS per liter, vilket är ungefär lika med 0,1 kg TDS/kg.



Tidslinje för simuleringsperiod. [tusentals år]

Figur 3-6. Tidslinje för transient simulering. Den givna initiala situationen kan vara initialvillkor sil eller någon annan initial situation.

Randvillkor vid modellens övre yta:

Specificerat potentiell grundvattenbildning längs med den undulerande topografin, modellen beräknar grundvattenytans position, inströmningsområden, utströmningsområden och ytvattenflöden.

Inströmmande vatten är sötvatten







Östersjön är ett innanhav med bräckt vatten. Salthalten sjunker från ungefär 1 procent söder om de danska sunden till nästan rent sötvatten i norra Bottenviken. (Världshaven har en salthalt på ungefär 3 procent.)

I modellen har salthalten i havet (Östersjön) definieras approximativt i enlighet med den gängse uppfattning om hur salthalten i havet har varierat under den simulerade tidsperioden (se t ex /Westman et al. 1999/ och /Gustafsson 2004/). Följande definition har använts i den upprättade modellen: Mellan 14 000 BP (före nutid) och 10 000 BP är salthalten i havet (i modellen) satt till noll. I verkligheten förekom under denna period två olika stadier i Östersjöns utveckling: Yoldia havet och Ancylussjön. Yoldia havets lätt bräckta vatten inkluderas inte i modellstudien, i stället simuleras Ancylussjöns sötvatten för hela perioden före 10 000 BP (Ancylussjön cirka 10 800–9500 BP). Efter 10 000 BP ökar salthalten i havet (i modellen) linjärt under 3 000 år upp till nivån 2 % (Litorinahavet 9 500–4 000 år sedan), varefter salthalten i havet (i modellen) avtar linjärt ned till dagens nivå, som är satt till 0,5 %. Se figur 3-8.

Kustlinjen och havets nivå förflyttas under den transienta simuleringen från nivån vid initaltillståndet (10 000 BP) fram tills dagens nivå, se t ex /Söderbäck 2008/. Denna procedur simulerar landhöjningen (eller strandlinjeförskjutningen). I modellen vid tidpunkten 10 000 BP ligger kustlinjen på nivån +25 m ö h, därefter sjunker nivån i modellen linjärt med tiden fram till dagens situation (+0 m ö h). Se figur 3-8.

Salthaltens fördelningar med djupet har specificerats för den initiala tidpunkten baserat på samma metod som i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/, dessutom har vi analyserat en alternativ salthaltsfördelning, som baseras på en förenklad simulering av en glacial period, detta diskuteras i kapitel 7.

Det första studerade tillståndet (*si1*) liknar den initiala salthalt som har använts vid SKB:s platsmodelleringar, se /Rhén et al. 2009/ och /Rhén och Hartley 2009/, men den applicerade initiala saltfördelningen är inte identiskt med platsmodelleringarnas initiala salthalt. Detta beror på att den storregionala modellen huvudsakligen täcker områden ovanför den högsta kustlinjen, där djupet till det saltrika grundvattnet är större än i de mer kustnära platsmodellerna.

Salthalterna i denna beskrivning (*si1*) baseras på observerade salthalter i djupa borrhål, detta diskuteras i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/. Se även /SKB 1992/ och /Smellie 2004/.



(i) Kustlinjen och havets nivå som funktion av tiden.



(ii) Salthalten i havet som funktion av tiden.

Figur 3-8. Kustlinjen och havets nivå och salthalt, som dessa egenskaper har implementerats i de transienta och densitetsberoende simuleringarna.

Nivån för saltvattnet relaterats till topografins nivå, så att lägre nivåer för saltvattnet erhålls då den topografiska nivån ökar. Följande samband har använts:

- Om topografin $\ddot{a}r \le 100 \text{ m}$ börjar saltvattnet vid nivån –700 m ö h.
- Om topografin är > 100 m börjar saltvattnet vid en nivå som ges av följande ekvation: Z = -5,385* Topo - 161,54
- Ovanför den beräknade nivån (Z) är salthalten satt till noll.
- Under denna nivå (Z) och ned till nivån –2 500 m ö h ökar salthalten linjärt från noll till 10 %.
- Från nivån –2 500 m ö h till nivån –6 000 m ö h ökar salthalten linjärt från 10 % till 15 %.

Salthalten vid modellens botten (vid nivån –6 000 m ö h) är därför lika med 15 %. Detta initialvillkor presenteras i figur 3-9.

Sambandet ovan ska bara betraktas som approximativ metod för att generera ett initialtillstånd där salthalten varierar med den topografiska nivån. Detta initialtillstånd kallar vi för *si1*.

En bättre uppskattning av den initiala situationen (10 000 år BP) kan eventuellt erhållas genom en förenklad grundvattensimulering av en hel glacial period, detta diskuteras i kapitel 7. I kapitel 7 presenteras ett försök att utföra en sådan simulering, enbart med syftet att erhålla en alternativt initial situation vid tidpunkten 10 000 år BP. Det alternativa initialvillkoret kallar vi för *gi1*. Beräkningarna för att erhålla alternativt initialvillkor (*gi1*) ska inte betraktas som en delaktivitet inom ramen för en säkerhetsanalys då olika klimatrelaterade scenarier studeras, t ex ett galciationsscenario, se vidare /Vidstrand et al. 2010/.

Frame 001 29 Jun 2009 GEOAN - Flow & Transport



Figur 3-9. Initalvillkor *si1* för salthaltens variation med djupet. (Salinitet i %) Exempel för en väst-östlig sektion. Profilen är placerad vid Y= 6362890 (rikets nät).

I den upprättade modellen rör sig saltvattnet i enlighet med flödesekvationerna som presenteras i avsnitt 3.22, och baserat på en kontinuum betraktelse. I verkligheten sker flödet i berget i sprickor. Grundvattenflödet sker dock inte i alla sprickor, många sprickor är återvändsgränder, eller delar av spricksystem som är dåligt konnekterade till de större sprickor som är effektiva ledare av grundvattnet. Ett stort antal mycket små sprickor förekommer dessutom, sprickor som har liten genomsläpplighet, men som emellertid är konnekterade till de större mer genomsläppliga sprickorna. En viss andel av spricksystemet är alltså relativt passivt när det gäller att advektivt transportera grundvatten, men dessa sprickor har dock viss betydelse som buffert och reservoar för salt och föroreningar som transporteras med det flödande vattnet.

Effekten av utbytet av salt mellan vätskan i de flödande sprickorna och den stagnanta vätskan i de omgivande passiva sprickorna är en fördröjning av saltets förflyttning i modellen. Detta beteende simuleras i modellen, se avsnitt 3.2. Processen inkluderas endast i de transienta densitetsberoende simuleringarna, och processen påverkar endast saltet som är löst i grundvattnet. I denna studie är denna process (diffusivt utbyte mellan vätska i beräkningscellernas flödesporositet och vätska i en stagnant porvolym) inte inkluderad då flödesvägar beräknas i modellen med hjälp av virtuella partiklar. Flödesvägarna som genereras i flödesmodellen representerar endast advektiv transport.

3.6 Kvartära avlagringar

Modellen bygger på den geologiska beskrivning som presenterats i kapitel 2 i /Ericsson et al. 2006/. De kvartära avlagringarnas horisontala utbredning framgår av figur 3-10.



Figur 3-10. Horisontal utbredning av kvartära avlagringar som de är definierade i modellen (ingen färgmarkering motsvarar 1–3 m morän).

De kvartära avlagringarnas varierande mäktighet (tjocklek) och genomsläpplighet har av numeriska skäl, för att passa med beräkningsnätet, skalats till en ekvivalent mäktighet om 10 m.

Följande värden på genomsläpplighet har använts:

- Glacifluvialt material K=1E-4 m/s
- Morän K=1E–6 m/s

3.7 Litologiska enheter

Modellen bygger på den geologiska beskrivning som presenterats i kapitel 2 i rapporten /Ericsson et al. 2006/. Berget är indelat i litologiska enheter De litologiska enheternas horisontala utbredning framgår av figur 3-11. Vertikalt sträcker sig dessa enheter (i modellen) från de kvartära avlagringarna och ned till modellens botten. Undantaget är två enheter i Almesåkraformationen (modellens östra del) som har en begränsad vertikal utsträckning. De inkluderade enheterna framgår av tidigare presenterade tabell 2-1.

I modellen har de litologiska enheternas tilldelats värden på hydraulisk konduktivitet (genomsläpplighet) som baseras på: (i) värden lagrade i SGU:s brunnsarkiv (se kapitel 2 i /Ericsson et al. 2006/) och (ii) en bedömd trend för djupavtagande som baseras på mätningar vid SKB:s platsundersökningar vid Oskarshamn (se kapitel 2 och Appendix 5 i /Ericsson et al. 2006/).

Följande metod har använts för varje litologisk enhet: Ett representativt värde för den litologiska enhetens varierande K-värden har tagits fram. Detta värde är ett geometriskt medelvärde baserat på

Frame 001 04 Aug 2009 GEOAN - Flow & Transport



Figur 3-11. Horisontal utbredning på litologiska enheter som de är definierade i modellen. Färger och koderna (K-group) representerar olika litologiska enheter. I legenden ovan så står koden till höger om färgen. Koderna förklaras i tabell 2-1.

värden i SGU:s brunnsarkiv. Detta värde gäller i modellen ovanför djupet 67 m. Under djupet 67 m avtar K-värdena i modellen i enlighet med ett djupavtagande, trenden för detta djupavtagande baseras på observationer vid SKB:s initiella platsundersökningar vid Oskarshamn, se figur 3-12. Likartat djupavtagande föreligger även med hänsyn senare platsundersökningar, /Rhén et al. 2008/. Det bör påpekas att den ovan nämnda trenden i djupavtagandet egentligen avser nivå och inte djup, men vi har valt att approximera dessa nivåer till olika djup. Detta är möjligt eftersom den topografiska nivån i vid platsundersökningarna inte är så mycket över noll. Följande ekvationer har använts:

$$d > 67 m \rightarrow K = C d^{L}$$

$$d < = 67 \ m \longrightarrow K = K_n$$

Ekvation 3-6

d = Djup K = Bergets konduktivitet $K_m = Bergets konduktivitet, representativt värde från brunnsarkivet$ $C = En koefficient som väljs på ett sådant sätt att K vid djupet 67 m = K_m$ L = -2,0205 (trend för djupavtagandet)

Med hjälp av ekvation 3-6 har djupavtagande K-värden beräknats för alla litologiska enheter. Resultatet ges i Appendix 2 i /Ericsson et al. 2006/.

Liknande funktioner för den hydrauliska konduktivitetens djupavtagande presenteras i /Rhén et al. 2008/



Figur 3-12. Bedömd trend för konduktivitetens djupavtagande i det regionala modellområdet vid SKB:s platsundersökningar vid Oskarshamn. Testskala 100 m. Deformationszoner är exkluderade. K-värdet ovanför djupet 67 m = K vid 67 m.

3.8 Deformationszoner

Modellen bygger på den geologiska beskrivning som presenterats i kapitel 2 i /Ericsson et al. 2006/. I den konceptuella modellen för det studerade storregionala området har vi antagit att deformationszonerna är vertikala, en av orsakerna till detta antagande är att vi för i den storregionala skalan inte har någon information om zonernas stupning.

Deformationszonerna har definierats i modellen som kontinuerliga vertikala strukturer med hjälp av en implicit formulering. Vertikalt sträcker sig dessa zoner från de kvartära avlagringarna och ned till modellens botten Deformationszonernas horisontala utbredning, som de har definierats i modellen, framgår av figurerna 3-13, 3-15 och 3-16.

Deformationszonernas genomsläpplighet med djupet baseras på mätningar vid SKB:s platsundersökningar vid Oskarshamn (se kapitel 2 i /Ericsson et al. 2006/). Ett konstant värde ansätts ovanför djupet 67 m. Under djupet 67 m avtar K-värdena i modellen i enlighet med ett djupavtagande, trenden för detta djupavtagande stämmer med observationer vid SKB:s initiella platsundersökningar vid Oskarshamn, se även /Rhén et al. 2008/. Det bör påpekas att den ovan nämnda trenden i djupavtagandet egentligen avser nivå och inte djup, men vi har valt att approximera dessa nivåer till olika djup. Detta är möjligt eftersom den topografiska nivån i vid platsundersökningarna inte är så mycket över noll. Följande ekvationer har använts:

Transmissivitet: $d > 67 m \rightarrow T = C d^L$

$$d < = 67 \ m \rightarrow T = T_{67 \ m}$$

K = T/w

Konduktivitet:

Ekvation 3-7

d = Djup T = Deformationzonens transmissivitet $T_{67m} = Deformationzonens transmissivitet vid djupet 67m$ C = 0,219 L = -1,783 (trend för djupavtagandet) K = Hydraulisk konduktivitet w = Hydraulisk vidd



Figur 3-13. Deformationszoner och diabasgångar, horisontal utbredning i modellen. Deformationszonerna är markerade med svarta streck, diabasgångarna är markerade med lila streck.

Genom att tillämpa ekvation 3-7 erhålls ett djupavtagande med avseende på transmissivitet och konduktivitet. Resultatet presenteras i figur 3-14.

Liknande funktioner för den hydrauliska konduktivitetens djupavtagande presenteras i /Rhén et al. 2008/.



Regionala vertikala deformationszoner. K-värden för ett ekvivalent medium med en hydrauliskvidd om 100 m.

Figur 3-14. Vertikala deformationszoner och berget mellan zonerna. Konduktivitetens djupavtagande i modellen.

3.9 Diabasgångar

Modellen bygger på den geologiska beskrivning som presenterats i kapitel 2 i /Ericsson et al. 2006/. Diabasgångarna har definierats i modellen som kontinuerliga vertikala strukturer med hjälp av en implicit formulering, vertikalt sträcker sig dessa zoner från de kvartära avlagringarna och ned till modellens botten. Diabasgångarnas utbredning framgår av figurerna 3-13, 3-15 och 3-16. I modellen har diabasgångarna samma genomsläpplighet som deformationszonerna.



Figur 3-15. Deformationszoner och diabasgångar.



Figur 3-16. Litologiska enheter, deformationszoner och diabasgångar.

3.10 Genombrottstid, transportmotstånd och porositet

För alla studerade geologiska enheter, och för alla olika studerade beräkningsfall har den effektiva porositeten (kinematisk porositeten) satts till 0,001. Detta värde användes också i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/.

Modellen tilldelats detta värde på porositet delvis för att det är ett värde som har använts i tidigare studier, vilket möjliggör en direkt jämförelse av denna studies resultat med resultat från dessa andra studier, men också för att det är ett rimligt integrerat värde för berget, se exempelvis /Rhén et al. 2009/ som nyttjar analyser av effektiv porositet (kinematisk porositet) från undersökningar i Sverige. Det finns dessutom ytterligare ett skäl som diskuteras nedan.

I jämförelse med det advektiva flödet av grundvatten så fördröjs lösta ämnen i grundvattnet genom olika retentionsprocesser, t ex fastläggning och matrisdiffusion (med matrisdiffusion menas ett löst ämnes diffusion in i det stagnanta vattnet i bergsmatrisen som omger en vattenförande spricka). Matrisdiffusion är en mycket viktig retentionsprocess och den fördröjning som erhålls genom matrisdiffusion styrs av en parameter som kallas transportmotståndet eller F.

Transportmotståndet kan förenklat beskrivas som ytan av en transportväg dividerad med grundvattenflödet längs densamma. För konstant geometri av flödesvägen kan transportmotståndet skrivas som:

$$F = a_r \frac{L}{a}$$

Ekvation 3-8

F = Transportmotståndet (Tid/Längd)

- $a_r = Flödesvåta$ ytan per volym berg (Längd²/Längd³ = 1/Längd)
- *L* = *Transportvägens längd (Längd)*
- *q* = Specifika flödet eller darcyhastigheten (Längd/Tid)

Uttrycket för transportmotståndet blir mer komplicerat om geometrin varierar. Se vidare /RETROCK 2005/.

Kvoten L/q i ekvationen ovan kan beräknas i en grundvattenmodell. Den kan summeras över olika avsnitt längs med en flödesväg från startpunkt till slutpunkt (utströmningsområde). Dessutom om porositeten approximeras med ett konstant värde längs med flödesvägen kan kvoten (L/q) enkelt beräknas utifrån advektiva genombrottstiden, på följande vis:

$$\sum \frac{L}{q} = \frac{1}{\eta} t_{genombrott}$$
 Ekvation 3-9

 $\eta = Effektiv porositet (-)$ $t_{genombrott} = Beräknad advektiv genombrottstid (Tid)$

Baserat på de två ekvationerna ovan (ekvationerna 3-8 och 3-9) erhålls följande ekvation.

$$F = a_r \frac{1}{\eta} t_{genombrott}$$
 Ekvation 3-10

Av ekvationen ovan (ekvation 3-10) framgår det att transportmotståndet blir proportionellt mot genombrottstiden om porositeten och flödesvåta ytan per volym berg definieras som konstant utmed flödesvägen.

Detta är ett av skälen till varför vi har använt en konstant porositet i denna studie. Som diskuterats ovan representerar genombrottstiderna i den upprättade modellen också transportmotståndet (även om de absoluta värdena inte är desamma), alltså är en jämförelse av förvarsområden baserad på specifika flöden och genombrottstider också en jämförelse av specifika flöden och transportmotstånd (detta gäller för den upprättade modellen eftersom porositeten är konstant).

En jämförelse av transportmotstånd är mycket intressant eftersom transportmotståndet bestämmer hur mycket olika nuklider fördröjs på grund av matrisdiffusion och sorption.

Eventuellt skulle det kunna hävdas att värdet på den konstanta effektiva porositeten är något stort för en kristallin bergmassa på mycket stort djup. Det är möjligt att så är fallet, å andra sidan så är genomsläpplighetens djupavtagande troligen av större betydelse för grundvattenflödets storlek och hastighet.

3.11 Lokal heterogenitet

För många av de studerade beräkningsfallen har en lokal heterogenitet i den hydrauliska konduktiviteten införts för berget mellan deformationszonerna, i deformationszonerna och i diabasgångarna. Den lokala heterogeniteten har genererats enligt en metod presenterad i /Holmén 1997/. Teoretiska aspekter på denna metod diskuteras i Appendix A. Följande metodik har använts för varje litologisk enhet i modellen, för deformationszonerna och för diabasgångarna.

- Effektivvärdet för den hydrauliska konduktiviteten i modellen med lokal heterogenitet sätts till det värde som användes i motsvarande modell (och motsvarande struktur) med lokal homogenitet. Om konduktiviteten i den homogena modellen har definierats som djupavtagande så avtar också effektivvärdet med djupet i den heterogena modellen.
- ii. Varje cell i beräkningsnätet tilldelas parametrar för en lognormalfördelning av konduktiviteten. Geometriska medelvärden och standardavvikelser för dessa fördelningar beräknas på ett sådant sätt att vid alla olika skalor så producerar lognormalfördelningarna samma effektivvärde för ett stokastiskt kontinuum. Dessutom är lognormalfördelningarnas egenskaper beräknade på ett sådant sätt att de på ett rimligt vis reproducerar den varians i uppmätt konduktivitet, vid skalan 100 m, som har iakttagits vid fältmätningar (hydrauliktester) utförda vid SKB's platsundersökningar vid Oskarshamn. (Cellerna tilldelas olika fördelningar beroende på cellstorlek, eftersom celler av olika storlek representerar olika skalor, se Appendix A.)
- iii. Varje cell i beräkningsnätet tilldelas slumpmässigt ett värde på den hydrauliska konduktiviteten utifrån den lognormalfördelning som tilldelats cellen.

Ekvationerna (och de tillhörande kurvorna) som använts vid generering av lokal heterogenitet presenteras i Appendix A.

3.12 Dispersionslängd och diffusivitet

I den upprättade modellen beräknas saltets transport med hjälp av advektions-dispersionsekvationen (se sektion 3.2). Saltet transporteras via två processer: (i) Saltet följer med det strömmande vattnet, detta kallas advektion, och (ii) Saltet sprids ut och rör sig mot lägre koncentrationer, detta kallas hydrodynamisk dispersion. Hydrodynamisk dispersion är summan av två processer, diffusion och hydromekanisk dispersion. Detta diskuteras mer i detalj i Appendix C.

I den upprättade modellen sattes dispersionslängden lika med 166,5 m och med en longitudinell dispersionsfaktor lika med 5, (se Appendix C). Dessa värden gäller för alla studerade fallen, förutom den glaciala simuleringen (se kapitel 7).

Dispersionslängden reducerades i de glaciala simuleringarna, dispersionslängden sattes till en fjärdedel av cellstorleken, olika värden erhålls i vertikal och horisontal riktning beroende på cellernas form, ett minsta värde på dispersionslängden sattes till 25 m. Den longitudinella dispersionsfaktorn sattes lika med 2. Med denna formulering av dispersionslängden erhålls en bättre överensstämmelse med den konceptuella beskrivningen av hur saltvattnet rör sig under en glacial period.

Diffusiviteten (diffusionskoefficient för molekylär diffusion) med avseende på salt löst i grundvatten sattes till 1,5E–9 m²/s.

3.13 Metod för beräkning av flödesvägar

I denna studie analyseras flödesvägarna genom grundvattensystemet med hjälp av simulerade (virtuella) partiklar. Dessa partiklar följer grundvattenflödena genom modellen (s k partikelspårning eller "particle tracking"). Ett stort antal partiklar representerar flödesvägarna i modellen, mellan cirka 50 000 och upp till cirka 220 000 flödesvägar, beroende på studerat fall.

Transport av salt och densitetsdriver flöde ingår också i vissa beräkningsfall som presenteras i denna rapport. Salttransport beräknas inte med partikelspårning utan genom att lösa advektions-dispersions-ekvationen i det upprättade beräkningsnätet. Se sektion 3.2.

Partiklarnas startpunkter bildar ett uniformt mönster i horisontalplanet, innanför kustlinjen. En partikel representerar arean 333·333 m på djupet 500 m. En partikel representerar alltså inte ett visst givet grundvattenflöde, utan en partikel representerar flödesvägen från ett visst givet område i modellen (en startpunkt). Grundvattenflödets storlek varierar från startpunkt till startpunkt och därmed för de olika partiklarna. Startpunkter för partiklarna förekommer överallt i modellen (även i zoner). Inga flödesvägar startas dock under havet, förutom för analyserna som presenteras i kapitel 5.

Flödesvägarna i grundvattensystemet beräknas av datormodellen Geoan med hjälp av en analytisk metod /Pollock 1989/.

Flödesvägarna som skapats av de virtuella partiklarna har analyserats med avseende på längder och genombrottstider, men även med avseende på det specifika grundvattenflödet vid startpunkterna samt flödesvägens största djup. Med genombrottstid menas den tid det tar för partiklen att röra sig från en viss startpunkt fram till slutpunkten vid markytan eller havet.

Flödesvägarna som skapats i flödesmodellen representerar endast advektiv transport. Dispersiv avvikelse från den advektiva flödesvägen har inte inkluderats när flödesvägarna genererades. Några retentionsprocesser har inte heller har inkluderats när flödesvägarna genererades. Det tidigare diskuterade diffusiva utbytet mellan flödande vätska och stagnant vätska har inte heller simulerats när flödesvägarna beräknats. (Numerisk dispersion är inte inkluderad i de skapade flödesvägarna, eftersom flödesvägarna beräknades genom partikelspårning och inte genom att direkt lösa advektions-dispersionsekvationen.) De virtuella partiklarna startas i en flödessituation som representerar den nuvarande flödessituationen, 2000 AD, förutom för simuleringarna i kapitel 12. Partiklarna rör sig i ett flödesfält som ej förändras med tiden.

Sammanfattningsvis bildar alltså partiklarnas startpunkter ett uniformt mönster i horisontalplanet. Partiklarnas startpunkter ligger på djupet 515 m, detta djup motsvarar ett tänkbart djup för ett slutförvar för kärnavfall. Varje flödesväg representerar ett område av en viss storlek t ex 333·333 m. Flödesvägarna startas i en flödessituation som representerar den nuvarande flödessituationen, 2000 AD, förutom för simuleringarna i kapitel 12. Partiklarna rör sig i ett flödesfält som ej förändras med tiden. Flödesvägarna som skapats i flödesmodellen representerar endast advektiv transport.

4 Frågeställningar och beräkningsfallens egenskaper

4.1 Flödesvägarnas egenskaper

I denna studie av det storregionala flödesmönstret har vi analyserat flödesvägar från ett djup som motsvarar djupet för ett tänkbart slutförvar för kärnbränsle, vilket betyder ett djup av cirka 500 m.

Flödesvägarna har främst analyserats med avseende på följande egenskaper:

- Längd.
- Genombrottstid.
- Specifikt flöde vid startpunkterna.

För vissa frågeställningar har även följande egenskaper analyserats:

- Flödesvägarnas största djup.
- Största salthalt vid flödesvägarnas startpositioner.
- Största värde på salthalt längs med flödesvägarna.

4.2 Frågeställningarna

Med avseende på det flödesvägarnas egenskaper och det storregionala flödesmönstret omfattar studien följande frågeställningar:

- Topprandvillkorets betydelse.
- Betydelsen av modellens djup och densitetsdrivet flöde.
- Initialvillkorets betydelse (glacial simulering).
- Betydelsen av modellens vertikala randvillkor.
- Betydelsen av ofullständiga och konceptuellt osäkra flödesvägar.
- Jämförelse av flödesvägar från ett fördelaktigt tolkat område med flödesvägar från Laxemar.
- · Betydelsen av heterogenitet i materialegenskaper.
- Strandlinjeförskjutning och flödesvägar från utvalda områden.
- Visualisering av beräknad salinitet och flödesvägar.

4.3 Beräkningsfall

För varje frågeställning har ett antal olika beräkningsfall upprättats. Beräkningsfallen är definierade med olika egenskaper relevanta för den studerade frågeställningen. Genom att jämföra flödesvägarnas egenskaper, för olika beräkningsfall, kan olika aspekter på den studerade frågeställningen belysas. Jämförelserna av flödesvägarnas egenskaper leder också fram till slutsatser avseende den studerade frågeställningen.

De olika beräkningsfallen är inte nödvändigtvis olika konceptuella beskrivningar av det studerade systemet, skillnaden mellan två beräkningsfall kan bestå i olika sätt att simulera eller analysera en given konceptuell beskrivning. Alla beräkningsfall presenteras mer i detalj i det kapitel i vilket de har analyserats.

De olika frågeställningarna och de upprättade beräkningsfallens egenskaper presenteras kortfattat i en matris, se tabell 4-1.

Tabell 4-1.	De olika	frågeställning	garna och de	upprättade	beräkning	gsfallens eg	genskaper.

	Modellegenskaper					
	N	• Stationära • Transienta förhållanden förhållanden	Homogen modell med	Basfallet. (fall 51)	Lokal heterogenitet	
		 Inga densi- tetseffekter 	 Densitets- effekter 	djupavtagande genomsläpp- lighet	Olika litologiska enheter och olika kvartära avlagringar	med avseende på genomsläpp- lighet
Studerad aspekt		 Ingen strandlinje- förskjutning 	 Strandlinje- förskjutning 	·		
Topprandvillkor. Kapitel 5	8	х		Х	Х	
Modellens djup. Kapitel 6	5	Х	Х		Х	
Alt. initialvillkor. Kapitel 7	2		Х		Х	
Modellens sidor och vertikala randvillkor. Kapitel 8	4		х	х		
Ofullständiga och konceptuellt osäkra flödesvägar. Kapitel 9	3		х		Х	
Jämförelse av två områden.	3		Х		Х	Х
Kapitel 10						
Heterogenitet i materialegen- skaper. Kapitel 11	1		Х		Х	Х
Strandlinjeförskjutning.	5	Х			Х	
Kapitel 12						
Visualisering av flödesvägar och salinitet. Kapitel 13	3	Х	х		х	
Visualisering av salinitet.	1		Х		Х	
Appendix B						

N = Antal beräkningsfall som har analyserats för den studerade frågeställningen.

4.4 Basfallet

Simuleringarna som presenteras i denna studie baseras på basfallet i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/ i den tidigare studien kallades detta fall för beräkningsfall 5.

Den nya modellen är inte helt identisk med den tidigare modellen, skillnaderna mellan basfallet i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/ och basfallet i denna studie diskuteras i sektion 3.1. I denna studie benämns basfallet som fall 51, med följande varianter:

- Fall 51nd: Stationärt tillstånd. Densitetsdrivet flöde ej inkluderat.
- Fall 51si1: Densitetsdrivet flöde inkluderat, initialvillkor si1.
- Fall 51gi1: Densitetsdrivet flöde inkluderat, initialvillkor gil (se kapitel 7).
- Fall 51si1Sc1: Densitetsdrivet flöde inkluderat, initialvillkor sil, lokal heterogenitet inkluderat.

5 Topprandvillkorets betydelse

5.1 Bakgrund

I detta kapitel behandlas effekter av modellens topprandvillkor på flödesvägarnas geometri och egenskaper.

I den tidigare modellen /Ericsson et al. 2006/ definierades trycket längs med modellens topografi, och inga ytvattenflöden förekom i den tidigare modellen (ett randvillkor baserat på givna tryck, dvs ett tryckrandvillkor). I den tidigare modellen antogs det att grundvattenytans position kan approximeras till markytans topografi (med undantag för områden med glacifluviala sediment och under havet). Det är dock troligt att grundvattenytan i inströmningsområden ligger någon eller några meter under markytans nivå. Därför upprättades två sensitivitetsfall i den tidigare studien: Fallen 5J1 och 5J2, dessa två sensitivitetsfall upprättades för att demonstrerar betydelsen av att grundvattenytan i inströmningsområden är belägen någon enstaka meter under markytans nivå. I dessa två sensitivitetsfall sänktes den specificerade trycknivån till nivåer under markytans nivå (några meter), men bara kring lokala topografiska maxima, då dessa områden antogs vara inströmningsområden. De två sensitivitetsfallen visade inte på några tydliga och signifikanta skillnader i flödesvägarnas egenskaper, i jämförelse med flödesvägarna i basfallet.

Ett korrekt flödesrandvillkor med ytvattenflöden på toppen av modellen är dock att föredra framför ett tryckrandvillkor med en korrigerad nivå på den givna tryckytan, eftersom ett flödesrandvillkor är en bättre approximation av systemets verkliga beteende.

Den nya modellens randvillkor längs med modellen övre yta (topprandvillkor) är specificerad potentiell grundvattenbildning (ett randvillkor baserat på ett givet flöde, dvs ett flödesrandvillkor) och dessutom inkluderar modellen ytvattenflöden. Den specificerade potentiella grundvattenbildning är kalibrerad så att de beräknade ytvattenflödena i modellen stämmer med de av SMHI uppmätta och beräknade värdena på avrinningen från de olika avrinningsområdena som inkluderas i modellen.

Med flödesrandvillkor i den upprättade modellen så beräknar modellen grundvattenytans position, grundvattenbildningen och ytvattenflöden utifrån modellens genomsläpplighet, topografin och den potentiella grundvattenbildningen. Grundvattenytan kan aldrig vara högre än topografin, även om grundvattenpotentialen i djupare lager kan vara större än den topografiska nivån. Områden där den beräknade grundvattennivån ligger under den topografiska nivån är inströmningsområden.

Genomsläppligheten nära markytan är av stor betydelse för hur de olika topprandvillkoren (tryckrandvillkor och flödesrandvillkor) kommer att influera grundvattnets flödesmönster i modellen. Om genomsläppligheten nära markytan är liten blir skillnaden mellan de två olika topprandvillkoren obetydlig, eftersom den av flödesrandvillkoret beräknade grundvattenytan följer topografin under förutsättning att genomsläppligheten är liten. Om däremot genomsläppligheten nära markytan och ett stycke ner i berget är stor, vilket inte är osannolikt på grund av kvartära avlagringar, ytnära sprickor etc, kan tydliga skillnader i modellens beräknade flödesmönster observeras när man jämför simuleringar med de två olika topprandvillkoren (i en i övrigt identisk modell). Skillnaderna orsakas av att grundvattenytan som beräknas av ett flödesrandvillkor inte följer topografin om genomsläppligheten är stor.

Det är den ytnära genomsläppligheten som har utnyttjats som variabel i de beräkningsfall som presenteras i detta kapitel.

5.2 Beräkningsfall och materialegenskaper

För att analysera topprandvillkorets betydelse har vi upprättat sju olika beräkningsfall, fall TA till TG (se nedan) plus basfallet (fall 51nd); totalt åtta beräkningsfall.

För att analysen inte ska influeras av andra effekter än genomsläppligheten i de marknära lagren är beräkningsfall TA till TG formulerade med en homogen djupavtagande konduktivitet. För fallen TA till TG varierar genomsläppligheten alltså endast i vertikal riktning, dessa beräkningsfall inkluderar

inte olika litologiska enheter, ej heller några olika kvartära avlagringar i horisontal riktning och lokal heterogenitet ingår inte heller. Olika djupavtaganden används för de olika beräkningsfallen.

Basfallet (fall 51nd) inkluderar olika litologiska enheter, olika kvartära avlagringar, deformationszoner och diabasgångar, därför varierar genomsläppligheten i basfallet både i horisontal och i vertikal riktning.

Modellens bas sattes vid djupet 2,5 km, utom för fall 51nd, där basen är vid nivån –6 km.

Alla fallen beräknades för stationära förhållanden och utan densitetseffekter.

Genomsläppligheter i de olika sensitivitetsfallen kan beskrivas som följer, se figurerna 5-1 och 5-2:

- Fall TA. Homogen modell. K-värdet är lika med 5E–9 m/s.
- Fall TB. K-värdet nära markytan är 5E–7 m/s, därefter avtagande K-värden ned till djupet 11,5 m, nedanför detta djup är K-värdet lika med 5E–9 m/s.
- Fall TC. K-värdet nära markytan är 5E–6 m/s, därefter avtagande K-värden ned till djupet 20 m, nedanför detta djup är K-värdet lika med 5E–9 m/s.
- Fall TD. K-värdet nära markytan är 5E–5 m/s, därefter avtagande K-värden ned till djupet 37,5 m, nedanför detta djup är K-värdet lika med 5E–9 m/s.
- Fall TE. K-värdet nära markytan är 1E–4 m/s, därefter avtagande K-värden ned till djupet 75 m, nedanför detta djup är K-värdet lika med 5E–9 m/s.
- Fall TF. K-värdet nära markytan är 1E–4 m/s, därefter avtagande med djupet. Djupavtagandet följer formen på den funktion som presenteras i /Rhén et al. 2006/. Vid djupet 500 m är K-värdet lika med 5E–9 m/s, djupavtagandet fortsätter även under detta djup.
- Fall TG. K-värdet nära markytan är 1E–4 m/s, därefter avtagande K-värden ned till djupet 11,5 m där K-värdet är 1,5E–7 m/s. Från djupet 75 m och nedåt avtar K-värdena med djupet. Djupavtagandet följer formen på den funktion som presenteras i /Rhén et al. 2006/. Vid djupet 500 m är K-värdet lika med 5E–9 m/s, djupavtagandet fortsätter även under detta djup.

Fall TG representerar den typ av K-värdesbeskrivning som förekommer i de flesta beräkningsfall i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/. K-värdet i de översta 10 m representerar kvartära avlagringar. K-värdet i de översta 65–75 m representerar K-värden som kommer från SGU:s brunnsarkiv. Under djupet 65–75 m avtar K-värdena. Djupavtagandet följer formen på den funktion som presenteras i /Rhén et al. 2006/. Som nämnts ovan så representerar K-värdet i de översta 10 m de kvartära avlagringarna, i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/ varierade dessa K-värden mellan 1E–6 m/s och 1E–4 m/s, se figur 5-1.

Förutom de ovan presenterade sensitivitetsfallen har vi också studerat ett beräkningsfall som motsvarar basfallet i den tidigare studien / Ericsson et al. 2006/:

 Fall 51nd. Motsvarar basfallet i den tidigare studien / Ericsson et al. 2006/. I detta kapitel studeras detta fall utan att densitetseffekter inkluderas. Basnivån är för detta beräkningsfall vid –6 km (i övriga fall vid djupet 2,5 km). Basfallet inkluderar olika litologiska enheter och olika kvartära avlagringar, därför varierar genomsläppligheten i basfallet i horisontal och vertikal riktning.

De ovan beskrivna beräkningsfallen kan också karaktäriseras av den totala horisontala transmissiviteten i de översta 50 m av flödesmedia. Total horisontal transmissivitet beräknas som summan av horisontal konduktivitet multiplicerat med mäktighet för varje numeriskt lager inom de översta 50 m, se ekvationen nedan.

$$T_{tot} = \sum_{i=1 \to i=n} K_i h_i$$

Ekvation 5-1

 $T_{tot} = Total horisontal transmissivitet [m²/s]$ $K_i = Horisontal konduktivitet för numeriska lagret med nummer i$ $h_i = Mäktighet på numeriska lagret med nummer i$ i = Nummer på numeriskt lagern = Antal numeriska lager som ska studeras



Figur 5-1. Konduktivitet mot djupet för sensitivitetsfall TA, TB, TC, TD, TE, TF, TG. Figuren visar konduktivitetens variation i de översta 100 m.



Figur 5-2. Konduktivitet mot djupet för sensitivitetsfall TA, TB, TC, TD, TE, TF, TG. Figuren visar konduktivitetens variation i de översta 2 500 m (hela modelltjockleken i dessa sensitivitetsfall).

Alla sensitivitetsfallen (TA till TG) är definierade med en homogen djupavtagande konduktivitet, för dessa fall är den totala horisontala transmissiviteten i de översta 50 m av flödesmedia densamma överallt i modellen.

För fall 51nd varierar konduktivitet rumsligt i de översta 50 m beroende på utbredning på de olika kvartära avlagringarna och de olika litologiska enheterna. För att kunna jämföra fall 51nd med de övriga fallen har vi därför beräknat ett medianvärde för den rumsligt varierande transmissiviteten i de översta 50 m, se figur 5-3.



Storregionalt område. Fall: SR2-Salt3-F1R1J1-Total horisontal transmissivitet i översta 50 m

Figur 5-3. Kumulativ fördelning av den totala horisontala transmissiviteten i de översta 50 m för fall 51 (basfallet).

Följande värden erhålls för den totala horisontala transmissiviteten i de översta 50 m av flödesmedia, se också figur 5-4.

- Fall TA. $T_{tot50 m} = 2,50E-7 m^2/s$
- Fall TB. $T_{tot50 m} = 1,96E-6 m^2/s$
- Fall TC. $T_{tot50 m} = 1,80E-5 m^2/s$
- Fall TD. $T_{tot50 m} = 1,79E-4 m^2/s$
- Fall TE. $T_{tot50 m} = 5,91E-4 m^2/s$
- Fall TF. $T_{tot50 m} = 9,98E-4 m^2/s$
- Fall TG. $T_{tot50 m} = 4,17E-5 m^2/s$
- Fall 51nd. $T_{tot50 m} = 9,12E-6 m^2/s$ (medianvärde)

Notera att för fall 51nd är medianen för den totala transmissiviteten i de översta 50 m liten i jämförelse med fall D,E F och G.



Total horisontal transmissivitet i översta 50 m

Figur 5-4. Total horisontal transmissivitet i de översta 50 m av flödesmedia, för olika beräkningsfall. Den röda stapeln representerar fall 51 som motsvarar basfallet i /Ericsson et al. 2006/ värdet som presenteras för detta fall är ett medianvärde för den rumsligt varierande transmissiviteten i de översta 50 m.

5.3 Simuleringar och resultat

Alla beräkningsfall simulerades med de båda tidigare diskuterade topprandvillkoren:

- Specificerat atmosfäriskt tryck som följer topografin.
- Specificerad potentiell grundvattenbildning. Grundvattenytans position beräknas av modellen samt storlek grundvattenbildning och ytvattenflöden.

Följande beräkningsmetodik användes för att analysera effekten av olika randvillkor på toppen av modellen:

- 1. För varje beräkningsfall utförs två simuleringar. (i) en simulering med tryckrandvillkor på toppen och (ii) en simulering med flödesrandvillkor på toppen.
- 2. För varje simulering beräknades flödesvägar från förvarsdjup. Flödesvägarnas startpunkter placerades i mitten på varje cell, på förvarsdjup, över hela modellområdet.
- 3. Flödesvägarnas egenskaper utvärderades statistiskt, kumulativa fördelningar beräknas av flödesvägarnas längder, genombrottstider och dessutom beräknas fördelningen av specifika flödet vid startpunkterna (förvarsdjup).
- 4. För varje beräkningsfall görs en jämförelse mellan flödesvägarnas egenskaper, med avseende på de två simuleringarna: (i) med tryckrandvillkor, alternativt (ii) med flödesrandvillkor. Resultat presenteras som en förändring procent av den fördelning som erhölls med tryckrandvillkor på toppen. Ett exempel: Med tryckrandvillkor är medianen (50 percentilen) för flödesvägarnas längs lika med 1 028 m, med flödesrandvillkor är medianen för flödesvägarnas längs lika med 1 060 m. Således är medianen för flödesvägarnas längd 3 % större då flödesrandvillkoret användes.

Resultat för beräkningsfall TA till TG, beräknade i enlighet med punkt 4 ovan, presenteras i följande figurer:

- Figur 5-5. Förändring av flödesvägarnas längd i procent, då topprandvillkoret förändras från tryckrandvillkor till flödesrandvillkor.
- Figur 5-6. Förändring av flödesvägarnas genombrottstid i procent, då topprandvillkoret förändras från tryckrandvillkor till flödesrandvillkor.
- Figur 5-7. Förändring av flödet vid flödesvägarnas startpunkter i procent, då topprandvillkoret förändras från tryckrandvillkor till flödesrandvillkor.

Av figur 5-5 framgår att flödesvägarnas längder ökar då topprandvillkoret är ett flödesrandvillkor. Störst förändring erhålls för de långa flödesvägarna, dock ej för de allra längsta vägarna som är mindre påverkade. För fall TA till TD ökar längderna med mindre än 6 %. För fall TE är ökar längderna med 20 %, för fall TG ökar längderna med 55 %. (Alla resultat gäller flödesvägar inom 1 och 99 percentilerna.)

Av figur 5-6 framgår att flödesvägarnas genombrottstider ökar då topprandvillkoret är ett flödesrandvillkor. Störst förändring erhålls (förutom för fall TE) för de längsta tiderna. För fall TA till TE ökar tiderna med mindre än 40 %. För fall TF är ökar tiderna med drygt 300 % (för de allra längsta tiderna). (Alla resultat gäller flödesvägar inom 1 och 99 percentilerna.)

Av figur 5-7 framgår att specifika flödet vid flödesvägarnas startpunkter minskar då topprandvillkoret är ett flödesrandvillkor. Störst förändring erhålls för positioner med små flöden. För fall TA till TE minskar flödena med mindre än 40 %. För fall TF minskar flödena med drygt 70 %. (Alla resultat gäller flödesvägar inom 1 och 99 percentilerna.)



Figur 5-5. Beräkningsfall TA–TG: Förändring av flödesvägarnas längd i procent, då topprandvillkoret förändras från tryckrandvillkor till flödesrandvillkor.


Figur 5-6. Beräkningsfall TA–TG: Förändring av flödesvägarnas genombrottstid i procent, då topprandvillkoret förändras från tryckrandvillkor till flödesrandvillkor.



Figur 5-7. Beräkningsfall TA–TG: Förändring av flödet vid flödesvägarnas startpunkter i procent, då topprandvillkoret förändras från tryckrandvillkor till flödesrandvillkor.

Beräkningsfall 51nd är av stort intresse eftersom det motsvarar basfallet i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/, resultat för detta fall beräknade i enlighet med punkt 4 ovan, presenteras i följande figurer:

- Figur 5-8. Förändring av flödesvägarnas längd i procent, då topprandvillkoret förändras från tryckrandvillkor till flödesrandvillkor.
- Figur 5-9. Förändring av flödesvägarnas genombrottstid i procent, då topprandvillkoret förändras från tryckrandvillkor till flödesrandvillkor.
- Figur 5-10. Förändring av flödet vid flödesvägarnas startpunkter i procent, då topprandvillkoret förändras från tryckrandvillkor till flödesrandvillkor.

Av figur 5-8 framgår att flödesvägarnas längder ökar då topprandvillkoret är ett flödesrandvillkor. Störst förändring erhålls för långa flödesvägar dock ej för de allra längsta vägarna som är mindre påverkade. För fall 51nd är den största ökning mindre än 5 %. (Alla resultat gäller flödesvägar inom 1 och 99 percentilerna.)

Av figur 5-9 framgår att flödesvägarnas genombrottstider ökar då topprandvillkoret är ett flödesrandvillkor. Störst förändring erhålls för de längsta och de kortaste tiderna. För fall 51nd är den största ökning mindre än 15 %. (Alla resultat gäller flödesvägar inom 1 och 99 percentilerna.)

Av figur 5-10 framgår att specifika flödet vid flödesvägarnas startpunkter minskar då topprandvillkoret är ett flödesrandvillkor. Största minskningen erhålls för positioner med små flöden. För fall 51nd är den största minskningen mindre än 15 %. (Alla resultat gäller flödesvägar inom 1 och 99 percentilerna.)

Genom att studera resultaten för de olika beräkningsfallen i figurerna 5-5, 5-6 och 5-7 framgår det att förändringarna i flödesvägarnas egenskaper tycks vara proportionerlig mot den totala horisontala transmissiviteten i den studerade modellen. Vi har därför plottat förändringen i flödesvägarnas egenskaper mot den totala horisontala transmissiviteten i de översta 50 m. Resultaten presenteras i figurerna 5-11, 5-12 och 5-13, dessa figurer presenterar förändringen i medianvärden mot transmissiviteten.



Figur 5-8. Fall 51nd: Förändring av flödesvägarnas längd i procent, då topprandvillkoret förändras från tryckrandvillkor till flödesrandvillkor.



Figur 5-9. Fall 51nd: Förändring av flödesvägarnas genombrottstid i procent, då topprandvillkoret förändras från tryckrandvillkor till flödesrandvillkor.



Figur 5-10. Fall 51nd: Förändring av flödet vid flödesvägarnas startpunkter i procent, då topprandvillkoret förändras från tryckrandvillkor till flödesrandvillkor.



Figur 5-11. Förändring av medianen av flödesvägarnas längd (då topprandvillkoret ändras från tryckrandvillkor till flödesrandvillkor), som funktion av den totala horisontala transmissiviteten i de översta 50 m av flödesmedia (i modellen). Den röda punkten representerar fall 51nd som motsvarar basfallet i /Ericsson et al. 2006/.



Figur 5-12. Förändring av medianen av flödesvägarnas genombrottstider (då topprandvillkoret ändras från tryckrandvillkor till flödesrandvillkor), som funktion av den totala horisontala transmissiviteten i de översta 50 m av flödesmedia (i modellen). Den röda punkten representerar fall 51nd som motsvarar basfallet i /Ericsson et al. 2006/.



Figur 5-13. Förändring av medianen av specifika flödet vid flödesvägarnas startpunkter (då topprandvillkoret ändras från tryckrandvillkor till flödesrandvillkor), som funktion av den totala horisontala transmissiviteten i de översta 50 m av flödesmedia (i modellen). Den röda punkten representerar fall 51nd som motsvarar basfallet i /Ericsson et al. 2006/.

Av figur 5-11 framgår att flödesvägarnas längder ökar då topprandvillkoret är ett flödesrandvillkor, men betydande förändringar – större än 10 % – förekommer bara om den totala horisontala transmissiviteten i de översta 50 m är större än cirka 1E–4 m²/s.

Av figur 5-12 framgår att flödesvägarnas genombrottstider ökar då topprandvillkoret är ett flödesrandvillkor, men betydande förändringar – större än 10 % – förekommer bara om den totala horisontala transmissiviteten i de översta 50 m är större än 1E–4 m²/s.

Av figur 5-13 framgår att specifika flödet vid flödesvägarnas startpunkter minskar då topprandvillkoret är ett flödesrandvillkor, men betydande förändringar – större än 10 % – förekommer bara om den totala horisontala transmissiviteten i de översta 50 m är större än 1E–4 m²/s.

Följande slutsatser erhålls baserat på de utförda simuleringarna:

- Flödesvägarnas längder ökar då topprandvillkoret är ett flödesrandvillkor.
- Flödesvägarnas genombrottstider ökar då topprandvillkoret är ett flödesrandvillkor.
- Specifika flödet vid flödesvägarnas startpunkter minskar då topprandvillkoret är ett flödesrandvillkor.

För den studerade modellen, med den topografi som förekommer inom det studerade området är de simulerade förändringarna större än 10 % om den totala horisontala transmissiviteten i de översta 50 m är större än cirka 1E–4 m²/s.

För fall 51nd, som motsvarar basfallet i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/, är median värdet för den totala horisontala transmissiviteten i de översta 50 m lika med 9,12E–6 m²/s, vilket är tydligt mindre än det värde då förändringar i flödesvägarnas egenskaper är > 10 %. Det ska dock påpekas att lokalt förekommer större värden på ytnära transmissiviteten, och för dessa områden kan förändringarna vara större.

För fall 51nd (basfallet i den tidigare studien) är:

- Den största ökningen i flödesvägarnas längd mindre än 5 %.
- Den största ökningen i flödesvägarnas genombrottstid mindre än 15 %.
- Den största ökning i specifikt flöde vid startpunkterna mindre än 15 %.
- Alla resultat gäller flödesvägar inom 1 och 99 percentilerna.

6 Betydelsen av modellens djupgående och densitetsdrivet flöde

6.1 Bakgrund

Basnivån i den tidigare modellen /Ericsson et al. 2006/ sattes till –2 500 m ö h för alla beräkningsfall förutom för tre sensitivitetsfall:

- Fall 6A basnivån vid –1 100 m ö h, stationär lösning. Inga densitetseffekter.
- Fall 6B basnivån vid –1 800 m ö h, stationär lösning. Inga densitetseffekter.
- Fall 6C basnivån vid –3 300 m ö h, stationär lösning. Inga densitetseffekter.

I den tidigare studien presenterades en jämförelse av flödesvägarnas egenskaper för dessa fall och för basfallet (fall 5). Jämförelsen visar på mycket små skillnader mellan de olika fallen. Emellertid är det för de långa flödesvägarna och för flödesvägar med långa genombrottstider som skillnaderna är störst. Skillnaden ska dock inte tolkas som att det storregionala flödesmönstret radikalt förändras då modellens basnivå förändras från t ex –2 500 till –3 300 m ö h. För mer än 99 % av flödesmönstret är nämligen förändringarna minimala.

I detta kapitel presenteras resultat av simuleringar med modeller med ännu större djup (ned till nivån –6 000 m ö h), de nya simuleringarna utförs dessutom som transienta simuleringar med densitetseffekter.

6.2 Beräkningsfall

För att analysera modelldjup och flödesvägarnas egenskaper har vi upprättat fem olika beräkningsfall, plus basfallet.

- Fall 51: Basfallet. Modellens bas vid nivån –6 000 m ö h. Densitetsdrivet flöde.
- Fall 51nd: Modellens bas vid nivån –6 000 m ö h. Inga densitetseffekter.
- Fall 52si1: Modellens bas vid nivån –5 000 m ö h. Densitetsdrivet flöde.
- Fall 53si1: Modellens bas vid nivån –4 000 m ö h. Densitetsdrivet flöde.
- Fall 54si1: Modellens bas vid nivån –3 000 m ö h. Densitetsdrivet flöde.

Randvillkor längs med modellen övre yta (topprandvillkor) är specificerad potentiell grundvattenbildning (flödesrandvillkor) och dessutom inkluderar modellen ytvattenflöden. Den specificerade potentiella grundvattenbildning är kalibrerad så att de beräknade ytvattenflödena i modellen stämmer med de av SMHI uppmätta och beräknade värdena på avrinningen från de olika avrinningsområdena som inkluderas i modellen. För simuleringarna med densitetsdrivet flöde var initialvillkoret *si1* som diskuteras i sektion 3.5.4.

6.3 Simuleringar och resultat

Följande beräkningsmetodik användes för att analysera effekten av olika modelldjup.

- 1. För varje simulering beräknades flödesvägar från förvarsdjup. Flödesvägarnas startpunkter placerades i mitten på varje cell, på förvarsdjup (även i deformationszoner). Områden under havet beaktades inte.
- 2. Flödesvägarnas egenskaper utvärderades statistiskt, kumulativa fördelningar beräknas av flödesvägarnas längder, genombrottstider och dessutom beräknas fördelningen av specifika flödet vid startpunkterna (förvarsdjup).
- 3. De kumulativa fördelningarna plottas i figurer. Dessutom jämförs flödesvägarnas egenskaper som förändringar i procent av ett utvalt fall.

Resultat för beräkningsfallen presenteras i följande figurer:

- Figur 6-1. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas längder.
- Figur 6-2. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas genombrottstider.
- Figur 6-3. Kumulativa fördelningar av specifika flödet vid flödesvägarnas startpunkter.
- Figur 6-4. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas största djup.
- Figur 6-5. Kumulativa fördelningar av salinitet vid flödesvägarnas startpositioner.
- Figur 6-6. Kumulativa fördelningar av största värde på salinitet längs med flödesvägarna.

Alla resultat som ges nedan gäller flödesvägar inom 1 och 99 percentilerna.

6.3.1 Längder

Av figur 6-1 framgår att längden på de längre flödesvägarna, dvs längder över cirka 70 percentilen, blir kortare då densitetsdrivet flöde inkluderas i simuleringen (i jämförelse med en simulering som inte inkluderar saltvatten). Med densitetsdrivet flöde är 99 percentilen 0,6 gånger mindre än 99 percentilen utan densitetsdrivet flöde (utan saltvatten). Orsaken till detta är att det tunga saltvattnet på djup större än förvarsdjup till stor del förhindrar flödesvägar från att nå ned till ännu större djup, och därmed blir de mycket långa flödesvägarna kortare. Ett mycket ringa antal flödesvägar tränger ner till stora djup, även ända ned till botten av modellen, sådana flödesvägar finns också i simuleringarna med densitetsdrivet flöde. Att saltvattnet på stort djup begränsar det maximala djupet för de långa flödesvägarna demonstreras också av att de fyra simuleringarna med densitetsdrivet flöde ger mycket likartade resultat, fastän dessa modellers basnivåer är mycket olika. Skillnaderna mellan fördelningarnas av flödesvägars längder är mindre än 1 %, vid medianen är skillnaden cirka 0,07 %.

Med avseende på densitetsdrivet flöde är medianen för flödesvägarnas längd cirka 1 200 m, 95 percentilen är cirka 3 900 m och 99 percentilen cirka 7 200 m.



Figur 6-1. Analys av modeller med olika basnivåer. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas längder.

6.3.2 Genombrottstider

Av figur 6-2 framgår att de längsta genombrottstiderna, dvs tider över cirka 90 percentilen, blir kortare då densitetsdrivet flöde inkluderas i simuleringen (i jämförelse med en simulering som inte inkluderar saltvatten). Med densitetsdrivet flöde är 99 percentilen 0,13 gånger mindre än 99 percentilen utan densitetsdrivet flöde (utan saltvatten). Orsaken till detta är densamma som för flödesvägarnas längder, dvs det tunga saltvattnet på stort djup förhindrar till stor del flödesvägar från att nå ned till ännu större djup. Därmed blir de mycket långa flödesvägarna kortare, och därför blir också de långa genombrottstiderna kortare. Som en följd av att flödesfältet förändras då saltvatten inkluderas modellen, så förändras även tiderna under den 70 percentilen, dessa tider blir något längre då densitetsdrivet flöde inkluderas i simuleringen. De fyra simuleringarna med densitetsdrivet flöde ger mycket likartade resultat, fastän dessa modellers basnivåer är mycket olika.

Med avseende på densitetsdrivet flöde är medianen för flödesvägarnas genombrottstid cirka 1 400 år, 95 percentilen är cirka 22 000 år och 99 percentilen cirka 110 000 år.



Figur 6-2. Analys av modeller med olika basnivåer. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas genombrottstider.

6.3.3 Specifika flödet vid startpunkterna

Av figur 6-3 framgår att när de olika beräkningsfallen jämförs med avseende på det specifika flödet vid flödesvägarnas startpunkter (förvarsdjup) så är skillnaderna mycket små. Detta beror på att flödets storlek till stor del beror på genomsläppligheten vid startpunkterna, och genomsläppligheten är densamma i alla beräkningsfallen. De små skillnader som kan observeras beror på de olika flödesmönster som erhålls i de olika beräkningsfallen. Största skillnaderna mellan simulering med och utan densitetsdrivet flöde förekommer för de allra minsta och de allra största flödena: Vid 1 percentilen är flödet i sötvattenmodellen 18 % större, vid 99 percentilen är flödet i sötvattenmodellen 3 % mindre.



Figur 6-3. Analys av modeller med olika basnivåer. Kumulativa fördelningar av specifika flödet vid flödesvägarnas startpunkter.

6.3.4 Största djup som de virtuella partiklarna når under flödesvägarna

Av figur 6-4 framgår flödesvägarnas största djup. Eftersom saltvattnet på stort djup begränsar det maximala djupet för de långa flödesvägarna blir skillnaden mellan en simulering som inkluderar densitetsdrivet flöde (saltvattensimulering) och en simulering utan densitetsdrivet flöde (sötvattensimulering) tydligt illustrerad i en figur som visar det största djup som de virtuella partiklarna når under flödesvägarna. Figur 6-4 demonstrerar det följande: Under 50 percentilen är resultaten desamma för alla simuleringar. Detta beror på att hälften av flödesvägarna strömmar uppåt, och det maximala djupet för dessa flödesvägar är lika med start djupet (förvarsdjup). För flödesvägarna över 50 percentilen producerar sötvattensimuleringen tydligt de djupaste flödesvägarna. I saltvattensimuleringarna går flödesvägarna inte lika djupt som i sötvattensimuleringen. Med densitetsdrivet flöde är 99 percentilen 0,5 gånger mindre än 99 percentilen utan densitetsdrivet flöde (utan saltvatten), med densitetsdrivet flöde går de djupaste flödesvägarna bara hälften så djupt som i sötvattenfallet. Värt att notera är också att de fyra simuleringarna med densitetsdrivet flöde ger mycket likartade resultat, fastän dessa modellers basnivåer är mycket olika.

Med avseende på 99 percentilen och densitetsdrivet flöde är det största djup som de virtuella partiklarna når under flödesvägarna cirka 1 800 m. Med avseende på 95 percentilen och densitetsdrivet flöde är det största djup som de virtuella partiklarna når under flödesvägarna cirka 1 100 m.

6.3.5 Salinitet vid startpositionerna

Av figur 6-5 framgår att saliniteten vid startpositionerna är densamma för alla beräkningsfall som inkluderar densitetsdrivet flöde.

6.3.6 Salinitet längs med flödesvägarna

Av figur 6-6 framgår att den största saliniteten längs med flödesvägarna varierar. De största värdena erhålls för flödesvägar som når ned till stort djup. Från figur 6-6 kan vi dra följande slutsatser: 95 % av flödesvägarna når aldrig ner till saltvatten med större salinitet än 1,4 %, och 99 % av flödesvägarna når aldrig ner till saltvatten med större salinitet än 4,1 %. Om vi definierar kraftigt salint grundvatten som ett vatten med en salthalt större än 5 %, så når endast 1 % av flödesvägarna ner till denna typ av grundvatten. För Basfallet framgår saltvattnets fördelning i modellen av Appendix B.



Figur 6-4. Analys av modeller med olika basnivåer. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas största djup.



Figur 6-5. Analys av modeller med olika basnivåer. Kumulativa fördelningar av salthalt vid flödesvägarnas startpositioner.



Figur 6-6. Analys av modeller med olika basnivåer. Kumulativa fördelningar av största värde på salinitet längs med flödesvägarna.

6.4 Slutsats

En slutsats som kan dras av de ovan givna resultaten är att det tunga saltvattnet på större djup än förvarsdjup förhindrar till stor del flödesvägar från att nå ned till ännu större djup.

En storregional saltvattenmodell (med densitetsdrivet flöde) som ska användas för att simulera flödesvägar från förvarsdjup behöver därför inte vara 6 km djup (vid en topografi liknande östra Smålands), mycket likartade resultat erhålls för en modell med cirka 3 km djup.

Det förekommer i modellen att flödesvägar når ner till mycket stort djup, ända ned tills modellens bottennivå (6 km), dessa flödesvägar utgör dock en mycket ringa andel av alla flödesvägar. För simuleringarna med densitetsdrivet flöde når 99 % av flödesvägarna aldrig djupare än 1 800 m (se figur 13-7).

Om syftet är att analysera de allra längsta flödesvägarna, flödesvägar som ligger över den 99 percentilen, då blir modellens djup av betydelse, eftersom dessa flödesvägar ofta når ner till mycket stora djup. Det ska dock påpekas att sådana flödesvägar ofta är tydligt påverkade av en konceptuell och numerisk osäkerhet. Flödesvägar som går ner i det djupt liggande salta grundvattnet (och blandas med det salta grundvattnet) får mycket långa genombrottstider (t ex tider > 1 miljon år).Flödesvägar med extremt långa genombrottstider är konceptuellt osäkra eftersom vissa konceptuella förutsättningarna för de utförda beräkningarna, t ex en fast liggande strandlinje, inga klimatförändringar etc, inte kan anses vara helt tillämpliga i ett miljonårs perspektiv, detta diskuteras vidare i Kapitel 9. En rimlig generell slutsats är att flödesvägar som når djupt ner i saltvattnet bör betraktas som mycket osäkra. Saltvattnets betydelse som en barriär för flödesvägar från förvarsdjup diskuteras också i Appendix D.

7 Initialvillkorets betydelse (glacial simulering)

7.1 Bakgrund

I den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/ användes två olika initialvillkor: *s1* och *s2*. Salthalterna i dessa beskrivningar, och även i beskrivning *si1* (som diskuteras i sektion 3.5.4), baseras på observerade salthalter i djupa borrhål. Nivån för saltvattnet relaterats till topografins nivå, så att lägre nivåer för saltvattnet erhålls då den topografiska nivån ökar, se sektion 3.5.4. För initialtillstånd *si1* är salthalten vid nivån –2 500 m ö h är lika med 10 % och salthalten vid nivån –6 000 m ö h är lika med 15 %. Detta initialvillkor presenteras i figur 3-9.

De ovan diskuterad initialtillstånden ska betraktas som olika uppskattningar av ett okänt tillstånd vid tidpunkten 10 000 år före nutid (10 000 år BP). Dessa uppskattningar är inte stationära tillstånd, bland annat eftersom det okända tillståndet vid den valda tidpunkten, 10 000 år BP eller 14 000 år BP, inte var ett stationärt tillstånd. Inlandsisen smälte av från det studerade området för cirka 15 000 år sedan och i samband med det förändrades grundvattnets flödessituation kraftigt, landhöjningen påverkar dessutom grundvattensituation under hela perioden efter den glaciala perioden.

Med en glacial period menas ett tidsintervall som karaktäriseras av kallare temperaturer och tillväxt eller bibehållande av en inlandsis. Interglaciala perioder karaktäriseras av varmare temperaturer och en avsmältning av en inlandsis. Den pågående Holocena epoken är en interglacial.

En bättre uppskattning av den initiala situationen (10 000 år BP) kan eventuellt erhållas genom en förenklad grundvattensimulering av en hel glacial period, med tillhörande interglacial. I detta kapitel presenteras ett försök att utföra en sådan simulering, enbart med syftet att erhålla en alternativt initial situation vid tidpunkten 10 000 år BP. Det alternativa initialvillkoret kallar vi för *gi1*. Baserat på det alternativa initialvillkoret (*gi1*) har simuleringar utförts som sedan jämförs med simuleringar utförda med det ursprungliga initialvillkoret (*si1*).

Nedanstående beräkningar ska inte betraktas som en delaktivitet inom ramen för en säkerhetsanalys då olika klimatrelaterade scenarier studeras, t ex ett galciationsscenario, se vidare /Vidstrand et al. 2010/.

7.2 Beskrivning av beräkningsmetod och simulering av glacial tidsperiod

Simuleringarna som presenteras i detta kapitel baseras på basfallet (fall 51si1). Initialvillkoret (*si1*) för den ursprungliga transienta simuleringen som startas vid tidpunkten 10 000 år BP är för basfallet en given beskrivning av grundvattentryck och salthalter. Salthalterna i denna beskrivning baseras på observerade salthalter i djupa borrhål, trycken är isostatiska med avseende på vertikala flöden. Salthalterna för denna beskrivning framgår av figur 3-9. Transienta simuleringen med startpunkt vid 10 000 år BP kan illustreras med en tidslinje (se figur 3-6).

För att erhålla ett alternativ till den ursprungliga beskrivningen av den initiala situationen (*si1*) har vi transient simulerat en interglacial/glacial tidsperiod, och använt fördelningen av grundvattentryck och salthalter som erhålls efter den glaciala perioden som initialvillkor för den slutliga transienta simuleringen som startas vid tidpunkten 10 000 år BP. Det alternativa initialvillkoret kallar vi för *gi1*.

Vår konceptuella modell för hur det tunga saltvattnet rör sig under en glacial period är som följer:

Så länge markytan är fri från ett glacialt istäcke styrs det regionala grundvattenflödet huvudsakligen av topografins undulation och havets position. Längs med topografiska dalar och lågpunkter rör sig det tunga salta grundvattnet uppåt och under topografiska höjder ligger det tunga salta grundvattnet still eller rör sig nedåt.

Topografins betydelse för flödesmönstret avtar snabbt då ett glacialt istäcke byggs upp. Under en glacial period – då istäcket är etablerat – har topografin ingen betydelse. Under en glacial period är det andra processer som styr som styr grundvattnets flödesmönster, t ex istäckets nivåer, förekomst av istunnlar med låga tryck, temperatur gradienter etc.

Den variation i vertikal fördelning av grundvattnets salthalter, som skapats av topografins undulation under tidigare perioder, utjämnas under en glacial period. Under ett mäktigt glacialt istäcke blir grundvatten trycken nära markytan stora (förutom där istunnlar förekommer), de höga nivåerna på det tunga saltvattnet som initialt förekommer under dalgångar och andra topografiska lågpunkter pressas tillbaka under en glacial period och en generell nedtryckning av saltvattnet till lägre nivåer äger också rum. Då istäcket avsmälter sjunker grundvattentrycken, och när inlandsisen är borta är det topografin som huvudsakligen styr flödesmönstret och längs med topografiska dalar och lågpunkter rör sig det tunga salta grundvattnet åter uppåt.

För att dessa svängningar och jämvikter ska erhållas i modellen och för att det tunga saltvattnet ska ligga på rimligt djup efter en glacial period, måste transporten av salt via den hydrodynamiska dispersionen (hydromekanisk dispersion och diffusion) i den övre delen av modellen t ex de översta 500 m, ej dominera över den advektiva transporten av salt.

Förenklat kan man säga att det finns tre konkurrerande processer för transport av saltvatten och färskvatten: (i) En uppåtriktat transport av salt som är resultatet av diffusion-dispersion från modellens bas (specificerad koncentration) till modellens övre yta (specificerad koncentration). (ii) En advektiv transport (huvudsakligen horisontalt) av vatten med låg salthalt på inte alltför stora djup, som följer av grundvattenbildningen (inströmmande färskvatten) och grundvattenflödet på inte alltför stora djup mot havet. (iii) På större djup förekommer en långsam rörelse i det tunga saltvattnet längs med modellen, detta är också en advektiv transport som följer av det salta och tunga grundvattents långsamma rörelse mot havet.

Om den dispersiva transporten dominerar över den advektiva transporten, alltså att process (i) ovan är större än process (ii), kommer salthalterna att stiga till höga nivåer under glaciala perioder, och orealistiskt höga salthalter erhålls på ringa djup efter en glacial period. Den zon med färskvatten, som förekommer ovanför det salta grundvattnet, får i modellen ett mycket ringa djup om den dispersiva transporten tydligt dominerar över den advektiva transporten under den glaciala perioden.

Denna aspekt på den dispersiva transportens storlek framgår endast tydligt om de simulerade tidsperioden är lång, dvs längre än 10 000 år.

Som ett första försök simulerades den glaciala perioden med samma värden på dispersionslängden som i simuleringarna med det ursprungliga initialvillkoret, detta värde är lika med 166,5 m och med en longitudinell dispersionsfaktor lika med 5. Försökssimuleringarna demonstrerade dock att detta värde är för stort, särskilt då simuleringsperioden blir lång. Med detta värde på dispersionslängd erhålls orealistiskt höga salthalter på ringa djup efter en glacial period. Detta är en intressant iakttagelse, som inte framgår under en simulering med längden 10 000 år, men som demonstreras av modellen då simuleringsperioden representerar en glacial period av längd t ex 54 000 år.

Dispersionslängden reducerades därför i de glaciala simuleringarna, dispersionslängden sattes till en fjärdedel av cellstorleken, olika värden erhålls i vertikal och horisontal riktning beroende på cellernas form, ett minsta värde på dispersionslängden sattes till 25 m. Den longitudinella dispersionsfaktorn sattes lika med 2. Med denna formulering av dispersionslängden erhålls en bättre överensstämmelse med den konceptuella beskrivningen som givits ovan. Med andra ord: Den zon med färskvatten, som förekommer ovanför det salta grundvattnet, får i modellen ett rimligt djup efter simuleringen av den glaciala perioden om dispersionslängden reduceras enligt ovan. Hydrodynamisk dispersion diskuteras mer i detalj i Appendix C.

Grundvattnets rörelsehastighet på stort djup är mycket litet. I modellen kan det ta mer än 1 miljon år för det tunga saltvattnet på stort djup att röra sig tex 10 km genom modellen. Inom parentes kan nämnas att det har passerat cirka 50 istider på de senaste 3 miljoner åren /Nationalencyklopedin 1993/, istider är således inte ett ovanligt klimatförhållande när man beaktar tidsskalan för hur det tunga saltvattnet rör sig.

Simuleringen av den interglaciala/glaciala perioden bygger på en förenklad beskrivning. I modellen förändras t ex inte K-värden och porositet under den glaciala perioden (permafrost inkluderas alltså ej). Istunnlar förekommer inte heller i modellen, de är troligen inte är av avgörande betydelse i det storregionala perspektivet.

Det randvillkor som förändras i modellen, när den glaciala perioden simuleras, är grundvattenpotentialen som den är definierad längs med markytan ovanför den nuvarande kustlinjen. I modellen simuleras det glaciala istäckets tillväxt genom att grundvattenpotentialen längs med markytan ökar med tiden då istäcket byggs upp, tills dess detta istäcke har nått en maximal höjd. Den maximala höjden definieras av en icke-linjär funktion som är har sitt största värde vid modellens västra rand (2 000 m ö h) och sitt minsta värde vid kustlinjen (0 m ö h). Det första som händer är alltså att topografiska dalgångar fylls av is, så småningom täcks hela den nuvarande topografin av is, därefter växer istäcket tills dess istäcke har nått en maximal höjd. I modellen växer alltså istäcket med tiden samtidigt över hela topografin ovanför kustlinjen. (En alternativ formulering hade varit att låta en skarp och hög isfront rulla in från nordväst och så småningom täcka hela modellen, eller kanske en kombination av en linjär vertikal istillväxt och en inrullande isfront, dessa alternativ valdes dock inte, utan i stället simulerades istillväxten som en linjär ökning av potentialerna vid markytan.) Avsmältningen av det glaciala istäcket simuleras som inversen till istillväxten, dock är tidsskalan för avsmältningen kortare.

Simuleringen av en glacial period har stora osäkerheter t ex: längden på tidsperioden, hur istillväxten ska definieras, även havets position och kustlinjen (under den glaciala perioden) är osäker. Kustlinjen definieras i den glaciala simuleringen längs med en nord-sydlig linje, ungefärligen placerad utmed den nuvarande kustlinjen.

Syftet med den glaciala simuleringen är endast att uppskatta ett alternativt initialvillkor, som kan jämföras med de tidigare presenterade initialvillkoren. Den studerade glaciala perioden stämmer därför *inte* överens med beskrivningar som givits i andra SKB rapporter.

Simuleringen av den interglaciala/glaciala perioden kan beskrivas med följande tidslinje (se figur 7-1).



Tidslinje för simulering av interglacial/glacial period [tusentals år]

Figur 7-1. Tidslinje för transient simulering av glacial period. Den givna initiala situationen är initialvillkor si1.

Den simulerade interglaciala/glaciala perioden kan indelas i 5 perioder.

Period 1. Interglacial period med landhöjning, vilket i modellen är samma sak som sjunkande havsnivåer. Tidsperiodens längd är 10 000 år. Vid periodens början är havsnivån satt till 25 m ö h, denna nivå sjunker under perioden till nivån 0 m ö h (landhöjning). Salthalten i havet förändras under perioden från 0 till 1,5 % och sedan tillbaka till 0 %. Period 1 är identisk med basfallets transienta simulering.

Period 2. Interglacial period under vilken potentialen vid markytan ej förändras med tiden. Havsnivån är 0 m ö h, salthalten i havet är satt till 0 %, dessa egenskaper förändras ej med tiden. Tidsperiodens längd är 10 000 år.

Period 3. Glacial period under vilken nedisningen äger rum. Potentialen vid markytan förändras med tiden och når sin högsta nivå efter 10 000 år. I västra delen av modellen byggs det upp en ismassa med höjden 2 km. Denna ismassa minskar i tjocklek mot kusten och försvinner ungefärligen längs med den nuvarande kustlinjen. Havsnivån är 0 m ö h, salthalten i havet är satt till 0 %, dessa egenskaper förändras ej med tiden. Tidsperiodens längd är 10 000 år.

Period 4. Glacial period under vilken nedisningen ej förändras. Havsnivån är 0 m ö h, salthalten i havet är satt till 0 %, dessa egenskaper förändras ej med tiden. Tidsperiodens längd är 20 000 år.

Period 5. Glacial/Interglacial period under vilken nedisningen avtar och slutligen försvinner. Vid periodens slut förekommer ingen glacial ismassa. Vid periodens slut är havsnivån satt till +25 m ö h och salthalten i havet är 0 %. Tidsperiodens längd är 4 000 år.

Den beräknade situationen efter Period 5 (efter totalt 54 000 år) motsvarar alltså den initiala situationen vid tidslinjens början (0 år). Denna situation är det beräknade alternativa initialvillkoret.

Nedan presenteras den utförda simuleringen i ett antal figurer:

- Figur 7-2: Modellens geometri och det glaciala istäcket under period 4.
- Figur 7-3: Efter Period 1. t= 10 000 år. Salthaltens variation med djupet.
- Figur 7-4: Efter Period 3. t= 30 000 år. Salthaltens variation med djupet.
- Figur 7-5: Efter Period 4. t= 50 000 år. Salthaltens variation med djupet.
- Figur 7-6: Efter Period 5. t= 54 000 år. Salthaltens variation med djupet. Denna situation är det beräknade alternativa initialvillkoret (*gi1*).

En jämförelse mellan figurerna 3-9 och 7-6 visar på tydliga skillnader i saltvattnets rumsliga fördelning. Störst är skillnaderna i modellens östra del under nuvarande havsnivå (diskuteras nedan). Mindre är skillnaderna i modellens västra del, väster om den nuvarande kustlinjen, dock ser man tydliga skillnader också för detta område.

Väster om den nuvarande kustlinjen (inlandsområdet) är skillnaderna i ett regionalt perspektiv inte allt för stora, på stort djup är fördelningen av salt ganska likartad, detta beror delvis på den låga genomsläppligheten på stort djup, vilket tillsammans med de små gradienterna på stort djup gör att det salta grundvattnet rör sig mycket långsamt på stort djup. En större förflyttning av det salta grundvattnet på stort djup i modellens inre delar kan ta flera miljoner år, och i det perspektivet är en glacial period om 54 000 år inte en lång tidsrymd.

En bidragande orsak till grundvattnets långsamma rörelser på stort djup i modellen är värdet på den effektiva porositeten. I modellen används ett konstant värde på den effektiva porositeten (se sektion 3.10), som eventuellt är något stort för en kristallin bergmassa på stort djup. Det är möjligt att så är fallet, å andra sidan så är genomsläpplighetens djupavtagande troligen av större betydelse för grundvattenflödets storlek och hastighet.

Vid en jämförelse mellan figurerna 3-9 och 7-6 framgår tydligt en skillnad i hur kustlinjens position påverkar salthalterna. Kustlinjens (och havets) påverkan på flödesmönstret är mer uttalad i figur 7-6 (initial villkor *gil*) än i figur 3-9 (initial villkor *sil*). Denna skillnad är delvis en följd av förenklingar som ingår i den glaciala simuleringen. Under den simulerade glaciala tidsperioden ligger iskanten stilla i modellen vid den nuvarande kustlinjen, under hela den glaciala perioden, en 20 000 år till 30 000 år lång period. Vid iskanten blir den hydrauliska gradienten mycket stor, vilket förorsakar betydande grundvatten flöden nära kustlinjen, och en stor andel av dessa flöden uppvisar en betydande vertikal komponent.



Figur 7-2. Modellens geometri och det glaciala istäcket under period 4. t= 30 000 år till t=50 000 år.



Figur 7-3. Efter Period 1. $t = 10\ 000\ \text{ar}$. Salthaltens variation med djupet (salinitet i %). Exempel för en väst-östlig sektion. Profilen är placerad vid Y = 6362890 (rikets nät).



Figur 7-4. Efter Period 3. $t = 30\ 000\ \text{ar}$. Salthaltens variation med djupet (salinitet i %). Exempel för en väst-östlig sektion. Profilen är placerad vid Y = 6362890 (rikets nät).



Figur 7-5. Efter Period 4. $t = 50\ 000\ \text{ar}$. Salthaltens variation med djupet (salinitet i %). Exempel för en väst-östlig sektion. Profilen är placerad vid Y = 6362890 (rikets nät).



Figur 7-6. Efter Period 5. $t = 54\ 000\ \text{ar}$. Salthaltens variation med djupet (salinitet i %). Exempel för en väst-östlig sektion. Profilen är placerad vid Y = 6362890 (rikets nät). Denna situation är det beräknade alternativa initialvillkoret (gil).

Vid den nuvarande kustlinjen (2000 AD) i modellens östra del (se figur 7-6) förekommer ett smalt område med lägre salthalter som tränger ner till stort djup. Orsaken till denna avvikelse i salthalter är deformationszoner nära nuvarande kustlinjen, som tillsammans med den ovan diskuterade stillaliggande iskanten (glaciala perioden) skapar betydande flöden i vertikalplanet nära kustlinjen, särskilt i vertikala deformationszoner.

Att det glaciala istäcket och iskanten ligger still i modellen (vid den nuvarande kustlinjen) under hela den glaciala perioden är också huvudorsaken till att salthalterna är högre under havet i det alternativa initialvillkoret i jämförelse med det ursprungliga initialvillkoret. Området öster om den nuvarande kustlinjen bildar nämligen ett stabilt utströmningsområde för saltvattnet i den glaciala simuleringen.

Nära kustlinjen är den beräknande saltvattenfördelningen för det alternativa initialvillkoret inte den mest sannolika fördelningen; eftersom det inte är sannolikt att den framtida kustlinjen ligger stilla vid nuvarande strandlinje under hela den glaciala perioden.

Simuleringen av den glaciala perioden visar bl a på att placeringen av iskanten (i modellen) under simuleringen av en glacial period är av stor betydelse. Modellens storlek utgör här en viktig begränsande faktor. Iskanten bör nämligen placeras inom modellen.

7.3 Simulering och jämförelse med resultat från ursprungligt initialvillkor

Simuleringarna som presenteras i detta kapitel baseras på basfallet (fall 51). Simuleringar av flödesvägar från förvarsdjup har utförts med de båda initialvillkoren: (i) det ursprungliga initialvillkoret (*sil*) och (ii) det alternativa initialvillkoret (*gil*). Initialvillkoren består av både salinitet och tryck. Simuleringarna kan illustreras med tidslinjen som presenterades i figur 3-6. De resulterande fördelningarna av salinitet i modellen illustreras i figurerna 7-7 och 7-8. En jämförelse av figurerna visar på en fördelning av salt som i ett regionalt perspektiv inte är alltför stora, förutom för området öster om den nuvarande kustlinjen. Skillnaderna öster om kustlinjen följer av de stora skillnaderna i initialvillkoret för detta område, detta diskuteras i sektionen ovan.

Följande beräkningsmetodik användes för att analysera effekten av olika initialvillkor.

- För varje simulering (fall 51si1 och fall 51gi1) beräknades flödesvägar från förvarsdjup. Flödesvägarnas startpunkter placerades i mitten på varje cell, på förvarsdjup. Områden under havet beaktades inte.
- 2. Flödesvägarnas egenskaper utvärderades statistiskt, kumulativa fördelningar beräknas av flödesvägarnas längder, genombrottstider och dessutom beräknas fördelningen av specifika flödet vid startpunkterna (förvarsdjup).
- 3. De kumulativa fördelningarna plottas i figurer. Dessutom jämförs flödesvägarnas egenskaper som förändringar i procent av ett utvalt fall.

Resultat för beräkningsfallen presenteras som:

- Figur 7-9. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas längder.
- Figur 7-10. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas genombrottstider.
- Figur 7-11. Kumulativa fördelningar av specifika flödet vid flödesvägarnas startpunkter.
- Figur 7-12. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas största djup.

Alla resultat som ges nedan gäller flödesvägar inom 1 och 99 percentilerna.



Figur 7-7. Transient simulering av 10 000 år med landhöjning etc, med det ursprungliga initialvillkoret (sil) (salinitet i %). Exempel för en väst-östlig sektion. Profilen är placerad vid Y= 6362890 (rikets nät).



Figur 7-8. Transient simulering av 10 000 år med landhöjning etc, med det alternativa initialvillkoret (gi1) (salinitet i %). Exempel för en väst-östlig sektion. Profilen är placerad vid Y= 6362890 (rikets nät).

Längder

Av figur 7-9 framgår att längden på de allra längsta flödesvägarna, dvs längder över cirka 99 percentilen, blir längre med det alternativa initialvillkoret (*gil*). Vid 95 percentilen, och under 95 percentilen, är skillnaderna små.

Med det alternativa initialvillkoret är flödesvägarna:

- Vid 99 percentilen 48 % längre i jämförelse med flödesvägarna beräknade med det ursprungliga initialvillkoret.
- Vid 95 percentilen 4 % längre i jämförelse med flödesvägarna beräknade med det ursprungliga initialvillkoret.

Genombrottstider

Av figur 7-10 framgår att de allra längsta genombrottstiderna, dvs tiderna över cirka 99 percentilen, blir längre med det alternativa initialvillkoret (*gil*). Vid 95 percentilen, och under 95 percentilen, är skillnaderna små.

Med det alternativa initialvillkoret är flödesvägarna:

- Vid 99 percentilen är genombrottstiderna 3,2 gånger längre i jämförelse med tiderna beräknade med det ursprungliga initialvillkoret.
- Vid 95 percentilen är genombrottstiderna 1,2 gånger längre i jämförelse med tiderna beräknade med det ursprungliga initialvillkoret.
- Vid medianen (50 percentilen) är genombrottstiderna 0,9 gånger längre i jämförelse med tiderna beräknade med det ursprungliga initialvillkoret.
- Vid 1 percentilen är genombrottstiderna 1,1 gånger längre i jämförelse med tiderna beräknade med det ursprungliga initialvillkoret.



Figur 7-9. Analys av modeller med olika initialvillkor. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas längder.



Figur 7-10. Analys av modeller med olika initialvillkor. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas genombrottstider.

Specifika flödet vid startpunkterna

Av figur 7-11 framgår att när de olika beräkningsfallen jämförs med avseende på det specifika flödet vid flödesvägarnas startpunkter (förvarsdjup) så är skillnaderna mycket små. Detta beror på att flödets storlek till stor del beror på genomsläppligheten vid startpunkterna, och genomsläppligheten är densamma i de båda beräkningsfallen. De små skillnader som kan observeras beror på de olika flödesmönster som erhålls i de två olika beräkningsfallen. Det beräknade flödet med det alternativa initialvillkoret (*gi1*) är något mindre än flödet beräknat med det ursprungliga initialvillkoret. Största skillnaderna förekommer för de allra minsta och de allra största flödena: Vid 1 percentilen är flödet med det alternativa initialvillkoret 14 % mindre, vid medianen 2 % mindre och vid 99 percentilen 4 % mindre.



Figur 7-11. Analys av modeller med olika initialvillkor. Kumulativa fördelningar av specifika flödet vid flödesvägarnas startpunkter.

Flödesvägarnas största djup

Av figur 7-12 framgår flödesvägarnas största djup. Under 50 percentilen är resultaten desamma för alla simuleringar. Detta beror på att nära hälften av flödesvägarna strömmar uppåt, och det maximala djupet för dessa flödesvägar är lika med start djupet (förvarsdjup). För flödesvägarna över 50 percentilen producerar simuleringen med det alternativa initialvillkoret (*gi1*) något djupare flödesvägar. Med det alternativa initialvillkoret är det största djupet för 95 percentilen 1,07 gånger djupare, och för 99 percentilen 1,23 gånger djupare.



Figur 7-12. Analys av modeller med olika initialvillkor. Kumulativa fördelningar Största djup som de virtuella partiklarna når under flödesvägarna.

7.4 Slutsats

En slutsats som kan dras av de ovan givna resultaten är att med avseende på flödesvägarnas egenskaper producerar de både studerade initialvillkoren likartade resultat. De allra längsta flödesvägarna (över 95 percentilen) blir längre, och går något djupare med det alternativa initialvillkoret (*gi1*), och därmed blir de längsta genombrottstiderna också längre med det alternativa initialvillkoret.

8 Betydelsen av modellens vertikala randvillkor

8.1 Bakgrund

Modellens vertikala sidor är placerade längs med regionala topografiska ytvattendelare (se figurerna 3-2, 3-3 och 3-4), dessa strukturer utgör gränser för ytvattenflöden och det är sannolikt att de också utgör betydelsefulla barriärer för grundvattenflödet. Det är dock möjligt att det i verkligheten sker ett visst mindre grundvattenflöde också över regionala topografiska ytvattendelare, t ex där större sprickzoner skär vattendelaren, men de regionala vattendelarna är emellertid de bästa hydrauliska gränser som kan identifieras för grundvattenflödet inom det studerade området. I modellen definieras de vertikala sidorna som helt täta, inget grundvattenflöde kan alltså passera över dessa gränder i modellen.

Flödesvägarna som simuleras i denna studie, och i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/, har startpunkter på förvarsdjup, jämt utspridda i över modellområdet, innanför kustlinjen. Både i den tidigare studien och i denna studie släpps inga partiklar exakt på modellens sidor, de yttersta startpunkterna ligger 333 m från modellens sidor. Orsaken till detta är att minimera eventuella numeriska effekter av modellens gränser.

Simuleringar med modellen indikerar att långa flödesvägar erhålls från startpunkter placerade under topografiska ytvattendelare, och även för startpunkter längs med modellens sidor. Frågan är i vilken utsträckning flödesvägar med startpunkter nära modellens sidor systematiskt och felaktigt påverkas av närheten till det applicerade randvillkoret längs med modellens sidor (täta väggar), i synnerhet som modellens sidor är lokaliserade längs med topografiska ytvattendelare.

Syftet med de analyser som presenteras i detta kapitel är att visa hur flödesvägarna längs med modellens sidor och flödesvägar under topografiska ytvattendelare är statistiskt annorlunda än populationen av alla flödesvägar,

8.2 Beräkningsfall

För att analysen inte ska influeras av andra effekter, är dessa beräkningsfall formulerade med en homogen djupavtagande konduktivitet. De olika litologiska enheterna och de kvartära avlagringarna som ingår i basfallet är alltså inte inkluderade i de beräkningsfall som analyseras nedan.

Skillnaden mellan de olika simuleringarna är placeringen av flödesvägarnas startpunkter (inga startpunkter placerades under havet).

- R1: Startpunkternas minsta avstånd till modellens sidor = 666 m.
- R2: Startpunkternas minsta avstånd till modellens sidor = 333 m.
- R3: Startpunkter längs med modellens sidor. Alla startpunkter inom ett avstånd från sidorna lika med = 333 m.
- R4: Startpunkter längs med en av modellens inre ytvattendelare (se figur 8-1).



Figur 8-1. Ljusblå linjer markerar regionala topografiska ytvattendelare inom det studerade området. Den svarta linjen centralt i figuren markerar den regionala ytvattendelare längs med vilken flödesvägar startades i beräkningsfall R4. Den röda linjen i områdets östra del markerar en svagt utvecklad regional ytvattendelare som har specialstuderats i en särskild studie /Holmén 2008/.

8.3 Simuleringar och resultat

Följande beräkningsmetodik användes för att analysera effekten av olika initialvillkor.

- 1. För varje analys (fall R1 till R4) beräknades flödesvägar från förvarsdjup. Flödesvägarnas startpunkter placerades i mitten på de studerade cellerna, på förvarsdjup. Områden under havet beaktades inte.
- 2. Flödesvägarnas egenskaper utvärderades statistiskt, kumulativa fördelningar beräknas av flödesvägarnas längder, genombrottstider och dessutom beräknas fördelningen av specifika flödet vid startpunkterna (förvarsdjup).
- 3. De kumulativa fördelningarna plottas i figurer. Dessutom jämförs flödesvägarnas egenskaper som förändringar i procent av ett utvalt fall.

Resultat för beräkningsfallen presenteras som:

- Figur 8-2. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas längder.
- Figur 8-3. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas genombrottstider.
- Figur 8-4. Kumulativa fördelningar av specifika flödet vid flödesvägarnas startpunkter.
- Figur 8-5. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas största djup.

Alla resultat som ges nedan gäller flödesvägar inom 1 och 99 percentilerna.

I de fyra figurerna representeras populationsegenskaper, dvs statistik baserat på alla flödesvägar av blå och skära linjer. Blå linjer avser en population där startpunkternas minsta avstånd till modellens sidor är 666 m. Skära linjer avser en population där startpunkternas minsta avstånd till modellens sidor är 333 m.

Två subpopulationer förekommer:

- (i) flödesvägar från modellens sidor (ljusblå linjer) och
- (ii) flödesvägar som initierats längs med en inre ytvattendelare (röda linjer).

Subpopulationernas värden ingår i populationens värden.

Figurerna 8-2 och 8-3 visar att flödesvägar som initieras längs med modellens sidor (ljusblå linje) är tydligt längre och har längre genombrottstider än fördelningen av alla flödesvägar (blå och skära linjer).

Det framgår också av figurerna att flödesvägar som initierats längs med en inre ytvattendelare också är tydligt längre och har längre genombrottstider än fördelningen av alla flödesvägar. Det bör noteras att det också bland subpopulationernas flödesvägar förekommer korta längder och korta tider

Med avseende på flödesvägarnas längder och genombrottstider så gör vi följande iakttagelse (baserat på figurerna 8-2 och 8-3). Skillnaden mellan populationens statistik och subpopulationernas statistik är större än skillnaden mellan subpopulationeras statistik, förutom för de största värdena (över 90 percentilen).

De stora skillnaderna över 90 percentilen när de båda subpopulationerna jämförs är rimligtvis en effekt av att flödesvägarna som initieras längs modellens sidor också inkluderar flödesvägar som startas i modellens västra del, långt från havet (fall R3), och som därför har möjlighet att bli mycket längre än flödesvägar som initieras centralt i modellen, betydligt närmare havet (fall R4).

Baserat på iakttagelsen ovan så sluter vi oss till att de längder och genombrottstider som beräknats för flödesvägar som initieras längs med modellens sidor är rimliga värden, som inte är kraftigt numeriskt påverkade av det applicerade randvillkoret längs med modellens sidor.

En jämförelse (figur 8-4) av specifika flödet vid startpunkterna visar på mindre skillnader. Detta beror på att flödets storlek till stor del beror på genomsläppligheten vid startpunkterna, och genom-släppligheten är densamma i de jämförda beräkningsfallen.

Av figur 8-5 framgår flödesvägarnas största djup. Statistiken för subpopulationerna visar på större djup än statistiken för populationen. Vad som också är intressant att notera är att för subpopulationerna är det maximala djupet större än start djupet (förvarsdjup) för ungefär 80 % av värdena. Detta betyder att ungefär 80 % av subpopulationernas flödesvägar strömmar nedåt vid startpunkterna. För populationen är det maximala djupet under 50 percentilen lika med start djupet (förvarsdjup). Detta betyder att för populationen strömmar hälften av flödesvägarna nedåt vid startpunkterna och den andra hälften strömmar uppåt vid startpunkterna.

Modellens sidor följer tydliga regionala topografiska ytvattendelare. Ett exempel på en mindre tydlig vattendelare är den regionala ytvattendelaren väster om Laxemar (se figur 8-1). Denna regionala ytvattendelare (väst Laxemar) är svagt utvecklad och dess betydelse som grundvattendelare har specialstuderats i en särskild studie /Holmén 2008/. Slutsatsen från den studien är att denna regionala ytvattendelare inte är en grundvattendelare för det djupa grundvattenflödet. Detta beror på att denna regionala ytvattendelare inte är särskilt tydlig, med vilket menas att den topografiska skillnaden mot omgivningen är liten. Dessutom är denna ytvattendelare lokaliserat i nästan rät vinkel mot det regionala grundvattenflödet. Följden blir att det sker ett visst grundvattenflöde på stort djup under och genom denna ytvattendelare. Den regionala ytvattendelare som studeras i beräkningsfall R4 (se ovan) är en mycket tydligare ytvattendelare, med vilket menas att den topografiska skillnaden mot omgivningen är stor.



Figur 8-2. Analys av flödesvägarnas startpositioner. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas längder.



Figur 8-3. Analys av flödesvägarnas startpositioner. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas genombrottstider.



Figur 8-4. Analys av flödesvägarnas startpositioner. Kumulativa fördelningar av specifika flödet vid flödesvägarnas startpunkter.



Figur 8-5. Analys av flödesvägarnas startpositioner. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas största djup.

8.4 Slutsats

Flödesvägar som initieras längs med modellens sidor är tydligt längre och har längre genombrottstider i jämförelse med fördelningen av alla flödesvägar. Flödesvägar som initierats längs med en inre ytvattendelare också är tydligt längre och har längre genombrottstider än fördelningen av alla flödesvägar.

Flödesvägar med startpunkter nära modellens sidor påverkas enbart marginellt av närheten till randvillkoret, med avseende på det statistiska beteendet för flödesvägars längder, genombrottstider och flöden på förvarsdjup. Denna slutsats bygger på en jämförelse mellan flödesvägar initierade längs med en tydlig vattendelare i modellens inre och flödesvägar initierade längs med modellens sidor.

9 Ofullständiga och konceptuellt osäkra flödesvägar

9.1 Bakgrund

Ett konceptuellt problem, speciellt utmärkande för storregional modellering, består i att vi beräknar ett flödesfält för en viss tidpunkt, t ex 2000 AD, och vi analyserar sedan detta flödesfält under antagandet att flödesfältet är en rimligt representativ beskrivning av en framtida situation, och vi analyserar det också som om det vore ett stationärt tillstånd. Problemet är att flödesfältet inte nödvändigtvis är representativt för en situation i en fjärran framtid, och flödesfältet som är beräknat för en viss tidpunkt är inte heller ett stationärt tillstånd. De konceptuella diskrepanserna mellan våra antaganden och flödesfältets egenskaper leder till att en viss andel av de beräknade flödesvägarna blir ofullständiga och konceptuellt osäkra.

I denna studie analyseras flödesvägarna genom grundvattensystemet med hjälp av simulerade virtuella partiklar. Dessa partiklar följer grundvattenflödena genom modellen (s k partikelspårning). Metoden för dessa beräkningar diskuteras i sektion 3.13. Flödesvägarna som skapats i modellen representerar endast advektiv transport. Flödesvägarna startas i en flödessituation som representerar den nuvarande flödessituationen (2000 AD). Denna flödessituation hålls konstant under simuleringen av flödesvägarna. Partiklarna rör sig alltså i ett flödesfält som ej förändras med tiden. En svaghet i denna metod är att flödessituationen vid tidpunkten 2000 AD inte är ett stationärt tillstånd, den verkliga studerade flödessituationen är egentligen under förändring. Detta är både ett konceptuellt och ett numeriskt problem.

Det numeriska problemet visar sig främst i de transienta (tidsberoende) simuleringarna. Då densitetsdrivet flöde inkluderas blir simuleringen transient och den erhållna flödessituationen vid 2000 AD är inte ett stationärt tillstånd. Det transienta flödesfältet vid 2000 AD innehåller lokala avvikelser i massbalans, som följer av att flödessituationen är under förändring, kustlinjen retirerar och flödesfältet anpassar sig därtill. Som en följd av att flödessituationen vid 2000 AD är transient så finns det i modellen områden där flödesvägarna inte är helt bestämda, dessa områden förekommer där de transienta effekterna är störst, det vill säga nära den retirerande kustlinjen.

Till exempel så kan vissa flödesvägar beräknas från en startpunkt ett stycke från kustlinjen och fram till ett område nära kustlinjen där flödessituationen är så tydligt transient att de lokala avvikelserna i massbalans (med avseende på det strömmande vattnet) är så stora att flödesvägens fortsatta utveckling inte kan bestämmas. Dessa flödesvägar som inte är helt bestämda benämns som ofullständiga flödesvägar. En fullständig flödesväg kan följas från en startpunkt och fram till en utströmningspunkt på modellens övre yta, en ofullständig flödesväg når aldrig fram till modellens övre yta.

En ofullständig flödesväg är alltså en modellartefakt, som orsakas av att de virtuella partiklar som skapar flödesvägarna rör sig i ett flödesfält som representerar ett fixerat ögonblick av en tidsberoende process; men vi analyserar flödesfältet, med hjälp av flödesvägar, som om flödesfältet inte vore tidsberoende (dvs i ett stationärt tillstånd). Med andra ord; vi beräknar stationära flödesvägar i ett flödesfält som är ett fixerat ögonblick av ett transient flödesfält.

Det är troligt att många av de ofullständiga flödesvägarna skulle förvandlas till fullständiga flödesvägar om de virtuella partiklarna tilläts följa med i ett flödesfält som utvecklas och förändras med tiden. Med andra ord; om vi beräknar transienta flödesvägar i ett transient flödesfält (detta diskuteras också i Appendix D).

En sådan metod för att beräkna flödesvägarna är fullt möjlig, men bedömdes dock ligga utanför denna studies omfattning; huvudsakligen därför att åtskilliga andra komplexa konceptuella frågeställningar blir av stor betydelse med en sådan metod, frågeställningar som inte påverkar beräkningarna om dessa utförs för ett fixerat flödesfält. Exempel på sådana frågeställningar är framtida klimatologiska och hydrogeologiska förhållanden. I Appendix D presenteras några simuleringar av densitetsberoende flöde i vertikala sektioner, i detta appendix diskuteras också transienta flödesvägar, se Appendix D, fall T3.

De analyser av flödesvägarnas egenskaper som har presenterats i de tidigare kapitlen i denna studie är baserade på fullständiga flödesvägar. Syftet med detta kapitel är bl a att beräkna andelen och egenskaperna för de ofullständiga flödesvägarna.

I vissa beräkningsfall i denna studie har *inte* densitetsdrivet flöde inkluderats, sådana simuleringar utförs som stationära simuleringar. Problem med ofullständiga flödesvägar försvinner nästan helt vid stationära förhållanden, eftersom avvikelser i massbalans är minimala för en sådan flödessituation (även om det konceptuella problemet kvarstår).

Det konceptuella problemet består i att det flödesfält som vi analyserar vid tidpunkten 2000 AD, och som vi har beräknat med en stationärt eller transient simulering, knappast är representativt för flödessituationen i en fjärran framtid. Som nämnts ovan hålls den beräknade flödessituationen vid 2000 AD som konstant under simuleringen av flödesvägarna. Konceptuellt osäkra flödesvägar är flödesvägar vars egenskaper till stor del beror av konceptuella förenklingar, t ex att kustlinjen ligger still när flödesvägar beräknas.

Flödesfältets eventuella bristande representativitet för en framtida situation är främst ett problem för de djupa flödesvägarna med långa genombrottstider. Genomsläppligheten på stort djup är mycket liten i modellen, vilket tillsammans med de små gradienterna på stort djup gör att det salta grundvattnet rör sig mycket långsamt på stort djup. En större förflyttning av det salta grundvattnet på stort djup i modellens inre delar kan ta flera miljoner år. Förklaringen till att vi kan beräkna djupa flödesvägar genom modellen är att förändringar i tryck sprids mycket snabbare genom modellen än den tid det tar för grundvattnet att röra sig. Baserat på tryck och nivå kan vi beräkna grundvattenflöden (riktning och storlek) och därmed flödesvägar.

Den advektiva genombrottstiden för flödesvägarna ges dock av grundvattnets rörelsehastighet som är mycket långsam på stort djup, och därför kan genombrottstiderna för de djupa flödesvägarna bli mycket stora (miljoner år). Dessa långa genombrottstider indikerar dock att dessa flödesvägars egenskaper är osäkra, eftersom flödessituation troligen kommer att förändras under en tidsperiod som är många tusentals år lång.

9.2 Beräkningsfall

Alla simuleringar som presenteras i detta kapitel är utförda med basfallet, fall 51si1. En och samma population av flödesvägar har analyserats, populationen har indelats i tre subpopulationer:

A: Alla flödesvägar, fullständiga och ofullständiga (populationen).

B: Fullständiga flödesvägar (subpopulation).

C: Ofullständiga flödesvägar (subpopulation).

9.3 Simuleringar och resultat

Följande metodik användes för att beräkna flödesvägarnas egenskaper:

- 1. Flödesvägar beräknades från förvarsdjup med hjälp av virtuella partiklar. Flödesvägarnas startpunkter placerades i mitten på varje cell, på förvarsdjup. Områden under havet beaktades inte.
- 2. Flödesvägarnas egenskaper utvärderades statistiskt, kumulativa fördelningar beräknas av flödesvägarnas längder, genombrottstider och dessutom beräknas fördelningen av specifika flödet vid startpunkterna (förvarsdjup).
- 3. De kumulativa fördelningarna plottas i figurer.

Resultat för beräkningsfallen presenteras som:

- Tabell 9-1: Andelen fullständiga och ofullständiga flödesvägar.
- Figur 9-1: Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas längder.
- Figur 9-2: Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas genombrottstider.
- Figur 9-3: Kumulativa fördelningar av specifika flödet vid startpunkterna.
- Figur 9-4: Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas största djup.

Tabell 9-1. Andel fullständiga och ofullständiga flödesvägar i basfallet (fall 51si1).

	Andel flöde	esvägar [%]
Alla flödesvägar	100	
Fullständiga flödesvägar	86	
Ofullständiga flödesvägar	14	

Alla resultat som ges nedan gäller flödesvägar inom 1 och 99 percentilerna.

Av tabell 9-1 framgår att andelen ofullständiga flödesvägar är relativt liten (14 %) i jämförelse med andelen fullständiga flödesvägarna (86 %). Eftersom andelen fullständiga flödesvägar är betydligt större än andelen ofullständiga flödesvägar så blir statistiken för alla flödesvägar (population A) mycket lik statistiken för de fullständiga flödesvägarna (subpopulation B), dock förekommer det tydliga skillnader för de långa flödesvägarna och för flödesvägar med stora genombrottstider. Detta framgår av figurerna 9-1 och 9-2.

De ofullständiga flödesvägarna (subpopulation C) har tydligt avvikande egenskaper, det finns ofullständiga flödesvägar av alla längder och genombrottstider, men en stor andel av de ofullständiga flödesvägarna visar på följande egenskaper: de är långa, de har stora genombrottstider, flödena vid startpunkterna är små och de når ned till stort djup. Ett problem med de ofullständiga flödesvägarna är att de beräknade egenskaperna längd, genombrottstid och djup inte är lika pålitliga som för de fullständiga flödesvägarna. Egenskaperna är konceptuellt osäkra eftersom de representerar flödesvägar som är tydligt influerade av modellens transienta beteende. Egenskaperna är också numeriskt osäkra eftersom avslutandet av en ofullständig flödesväg inte är lika matematiskt välbestämd som avslutandet av en fullständig flödesväg (en fullständig flödesväg stannar vid modellens övre yta). En ofullständig flödesväg kan demonstrera extrema egenskaper innan den avslutas, t ex kan den virtuella partikeln som skapar flödesvägen demonstrera en antydan till ett virvelliknande rörelsemönster innan flödesvägens fortsatta utveckling blir obestämd, genombrottstiderna kan också bli extremt långa då den virtuella partikeln i de närmaste kan stå stilla innan dess rörelse till slut blir obestämd.



Figur 9-1. Analys av fullständiga och ofullständiga flödesvägar. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas längder.



Figur 9-2. Analys av fullständiga och ofullständiga flödesvägar. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas genombrottstid.



Figur 9-3. Analys av fullständiga och ofullständiga flödesvägar. Kumulativa fördelningar av specifika flödet vid startpunkterna.



Figur 9-4. Analys av fullständiga och ofullständiga flödesvägar. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas största djup.

De ofullständiga flödesvägarnas startpunkter kan förekomma överallt i modellen, men till övervägande delen förekommer dessa startpunkter relativt nära den nuvarande kustlinjen (inom några kilometer från den nuvarande kustlinjen) de tenderar att representera flödesvägar som efter att ha nått stort djup vänder uppåt mot kustlinjen underifrån och från stort djup. Sådana flödesvägar blir tydligt påverkade av kustlinjens reträtt och havets sjunkande nivå och den blandning av salt och sött vatten som sker under kustlinjen och havet.

Det ska också påpekas att de ofullständiga flödesvägarna också inkluderar flödesvägar som är ofullständiga på grund av det numeriska brus som förekommer i modellen. Alla numeriska lösningar är approximativa och innehåller felaktigheter. Andelen flödesvägar som är ofullständiga av denna anledning demonstreras av andelen ofullständiga flödesvägar i de stationära simuleringarna som *inte* inkluderar densitetseffekter. I dessa simuleringar är andelen ofullständiga flödesvägar normalt betydligt mindre än 1 %.

Ytterligare ett problem med de ofullständiga flödesvägarna är att andelen ofullständiga flödesvägar varierar med den metod som använts för att numeriskt representera den transienta processen, även om denna variation inte behöver vara stor.

Anledningen till att vi i detta kapitel diskuterar de ofullständiga flödesvägarna är att dessa flödesvägars egenskaper kan influera statistiken för flödesvägar som initieras inom vissa områden av modellen, antingen exkluderas dessa flödesvägar – vilket kan anses vara rimligt eftersom egenskaperna för dessa flödesvägar är både numeriskt och konceptuellt osäkra – eller så inkluderas de och då kan en signifikant annorlunda statistik eventuellt erhållas för vissa områden.

Om flödesvägar simuleras och analyseras i en storregional modell med syfte att söka efter potentiellt goda förvarsområden, så är det troligen kontraproduktivt att exkludera de ofullständiga flödesvägarna, eftersom dessa flödesvägar tenderar att vara långa och demonstrera stora genombrottstider, men dessa flödesvägars egenskaper är å andra sidan kopplade till större osäkerheter än övriga flödesvägars egenskaper. I den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/ hanterades de ofullständiga flödesvägarna genom att en maximal advektiv transporttid definierades. Efter 1 miljon år av advektiv transport så avslutades flödesvägarna, oavsett var den virtuella partikeln befann sig i modellen.

I kapitel 10 diskuteras flödesvägar från två områden (i) ett utvalt område med goda egenskaper och (ii) Laxemar regionalt undersökningsområde. En visualisering av dessa flödesvägar ges i kapitel 13.

Ett exempel på en ofullständig flödesväg visas i kapitel 13, figur 13-8, som visar flödesvägar från ett utvalt område. Den rödfärgade flödesvägen längst i öster (med stor genombrottstid) når aldrig fram till markytan.

Konceptuellt osäkra flödesvägar kan uppvisa mycket stora genombrottstider, men dessa beräknade tider kan te.x förutsätta att flödessituationen inte förändras under miljoner år. Flödesvägar som är osäkra av konceptuella skäl kan också vara ett problem i en analys av ett regionalt flödesmönster, eftersom dessa flödesvägar ofta uppvisar långa längder och stora genombrottstider och därför kan påverkar vilka områden som uppvisar de bästa egenskaperna.

Exempel på konceptuellt osäkra flödesvägar visas i figur 13-9, som visar flödesvägar från Laxemar undersökningsområde. De långa rödfärgade flödesvägarna (med mycket stora genombrottstider) i figurens östa del följer grundvattenflödet via deformationszoner (se figur 3-13) till en punkt i modellens nordöstra del där zonerna når fram till kustlinjen. Dessa extrema flödesvägar förutsätter att flödessituationen inte förändras under miljoner år, t ex måste kustlinjen ligger stilla i miljoner år.

10 Flödesvägar från ett fördelaktigt tolkat område och från Laxemar

10.1 Bakgrund

I den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/ diskuterades möjligheten att identifiera förvarsområden med potentiellt goda egenskaper genom analyser i en storregional grundvatten modell. I denna rapports slutsatser skrevs det följande:

"En gemensam analys av förvarsområden med långa genombrottstider, långa flödesvägar och små flöden vid olika systembeskrivningar (olika konceptuella modeller) är ett sätt att analysera osäkerheter i systembeskrivningarna. Grundvattenflödets storlek påverkas mer av olika systembeskrivningar än grundvattnets flödesmönster. En beräkning av grundvattnets flödesmönster är alltså en mer robust analys än en beräkning av storleken på grundvattenflödet. Av detta följer att vid en jämförelse av olika systembeskrivningar med avseende på förvarsområdens egenskaper så förekommer det ett icke obetydligt antal gemensamma förvarsområden som alla har långa flödesvägar och/eller nedåtriktade flöden, även för systembeskrivningar som är mycket olika varandra. Betydligt färre är antalet gemensamma områden då flödets storlek (små flöden) och långa genombrottstider ska beaktas (för olika systembeskrivningar). Med avseende på flödets storlek så är de lokala egenskaperna av stor betydelse och därför blir det få gemensamma områden då flödets storlek ska jämföras för olika systembeskrivningar. Detta illustrerar att förvarsområden med potentiellt intressanta flödesmönster kan identifieras med viss konfidens, men när också grundvattenflödets storlek ska inkluderas i analysen blir osäkerheterna betydligt större."

Syftet med detta kapitel är att demonstrera och jämföra de simulerade egenskaperna för flödesvägar från ett utvalt område i jämförelse med de simulerade egenskaperna för flödesvägar från det regionala undersökningsområdet i Laxemar.

10.2 De studerade områdena

Flödesvägar från två områden kommer att jämföras i detta kapitel: (i) flödesvägar från det regionala undersökningsområdet i Laxemar och (ii) flödesvägar från ett utvalt område.

I den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/ analyserades egenskaper för olika teoretiska förvarsområden. Dessa förvarsområden var av storleken 1 km² och var jämt utspridda över modellområdet, se figur 11-1. Varje förvarsområde representerades av 36 flödesvägar. För varje förvarsområde beräknades statistiska egenskaper baserat på de 36 flödesvägarna.

Baserat på de jämförelser av förvarsområden som presenteras i kapitel 7 i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/ har vi identifierat ett område i Viråns avrinningsområde som baserat på testerna i kapitel 7 i rapporten /Ericsson et al. 2006/ demonstrerar goda och robusta egenskaper. Med robusta egenskaper menas att plasten uppvisar fördelaktiga egenskaper för ett antal olika systembeskrivningar, detta förklaras närmare i kapitel 7 i rapporten /Ericsson et al. 2006/.

De utvalda områdena i kapitel 7 i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/ framgår av de gula fyrkanterna i figur 10-1, de gula fyrkanterna är de samma som i figur 7-8 i rapporten /Ericsson et al. 2006/. De gula fyrkanterna i figur 10-1 markerar de förvarsområden som passerar de tre testerna (i) längsta tiderna, (ii) minsta flödena och (iii) längsta vägarna. Dessa förvarsområden ligger alla i lågpermeabla bergarter, eftersom detta är nödvändigt för att passera test (i) och (ii).

När ett förvarsområde har passerat de tre testerna ovan så finns området samtidigt bland: (i) de 1 000 områdena som uppvisar de längsta genombrottstiderna, (ii) de 1 000 områdena som uppvisar de minsta flödena och (iii) de 1 000 områdena som uppvisar de längsta vägarna.

Det utvalda området framgår av den svarta kurvan figur 10-1 (x=1517000, y=6360600).


Figur 10-1. Horisontal utbredning på litologiska enheter som de är definierade i modellen Koderna förklaras i tabell 2-1. Figuren visar också, med gula fyrkanter, de förvarsområden som passerar de tre testerna (i) längsta tiderna, (ii) minsta flödena och (iii) längsta vägarna. Se kapitel 7, och figur 7-8 i rapporten /Ericsson et al. 2006/. Det utvalda området framgår av den svarta linjen.

Det utvalda området är placerat i den litologiska enheten No. 757 (se figur 10-1). Detta är eventuellt ett problem eftersom denna bergart (Gabbro, delvis ultrabasisk, diorit, amfibolit) kanske inte upp-fyller alla kriterier för en bergart som är lämplig för ett förvar av kärnavfall. Utifrån ett hydrauliskt perspektiv är det dock troligen det bästa området inom det storregionala området, denna slutsats baseras på de jämförande testerna i kapitel 7 i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/. Att den lokala bergarten eventuellt inte uppfyller alla kriterier understryker betydelsen av de lokala egenskaperna som inte är kända i det storregionala perspektivet.

Detta utvalda områdets läge framgår också av figurerna 10-2 och 10-3. Det utvalda områdets geometriska form styrs bland annat av utbredning på kringliggande deformationszoner. Deformationszoner tillåts inte skära igenom det utvalda området.



1430000 1440000 1450000 1460000 1470000 1480000 1490000 1500000 1510000 1520000 1530000 1540000 1550000 1560000 Väst Öst

Figur 10-2. Det regionala undersökningsområdet vid Laxemar (A) och det utvalda området (B)



Figur 10-3. Perspektivvy: Det regionala undersökningsområdet vid Laxemar (A) och det utvalda området (B).

10.3 Beräkningsfall

Beräkningarna som presenteras i detta kapitel är baserat på basfallet fall 51si1, med det tilläget att lokal heterogenitet har inkluderats i de litologiska enheterna, i enlighet med den beskrivning som ges i sektion 3.11. Detta beräkningsfall benämns fall 51si1Sc1, samma metod för lokal heterogenitet användes i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/. Fall 51si1Sc1 kan jämföras med fall 8As2 i den tidigare studien.

Skillnaden mellan de olika simuleringarna är placeringen av flödesvägarnas startpunkter (inga startpunkter placerades under havet).

- F1: Startpunkternas överallt i modellen.
- F2: Startpunkter endast inom det utvalda området.
- F3: Startpunkter endast inom det regionala undersökningsområdet i Laxemar.

10.4 Simuleringar och resultat

Följande beräkningsmetodik användes för att analysera effekten av olika initialvillkor.

- 1. För varje analys (fall F1 till F3) beräknades flödesvägar från förvarsdjup. Flödesvägarnas startpunkter placerades i mitten på varje cell, på förvarsdjup. Områden under havet beaktades inte.
- 2. Flödesvägarnas egenskaper utvärderades statistiskt, kumulativa fördelningar beräknas av flödesvägarnas längder, genombrottstider och dessutom beräknas fördelningen av specifika flödet vid startpunkterna (förvarsdjup).
- 3. De kumulativa fördelningarna plottas i figurer. Dessutom jämförs flödesvägarnas egenskaper som förändringar i procent av ett utvalt fall.

När långa flödesvägar från ett utvalt område med mycket goda egenskaper studeras så betyder detta att en stor andel av de studerade flödesvägarna uppvisar längder som ligger över den 99 percentilen av alla flödesvägarnas längder (från alla områden). För dessa extremt långa flödesvägar (över den 99 percentilen) blir modellens djup av betydelse, eftersom dessa flödesvägar ofta når ner till modellens bas.

Det ska dock påpekas att sådana flödesvägar ofta är tydligt påverkade av en konceptuell och numerisk osäkerhet. Flödesvägar som går ner i det djupt liggande salta grundvattnet (och blandas med det salta grundvattnet) får mycket långa genombrottstider (t ex tider > 1 miljon år). Flödesvägar med extremt långa genombrottstider är konceptuellt osäkra eftersom vissa konceptuella förutsättningarna för de utförda beräkningarna, t ex en fast liggande strandlinje, inga klimatförändringar etc, inte kan anses vara helt tillämpliga i ett miljonårs perspektiv.

Grundvattnets rörelsehastighet på stort djup är mycket litet. I modellen kan det ta mer än 1 miljon år för det tunga saltvattnet på mycket stort djup att röra sig t ex 10 km genom modellen. Inom parentes kan nämnas att det har passerat cirka 50 istider på de senaste 3 miljoner åren /Nationalencyklopedin 1990/.

Analysen av flödesvägar från det utvalda området visar på de tidigare diskuterade problemen med konceptuellt osäkra flödesvägar och ofullständiga flödesvägar (se kapitel 9). Många av flödesvägarna från det utvalda området är långa och sträcker sig mot kustlinjen, dessa långa flödesvägar når ner till stort djup. Alla flödesvägar som når djupt ner i det salta grundvattnet bör betraktas som mycket osäkra. När dessa flödesvägar närmar sig kustlinjen tenderar de att vända uppåt mot kustlinjen från stort djup. Sådana flödesvägar blir tydligt påverkade av kustlinjens reträtt och havets sjunkande nivå och den blandning av salt och sött vatten som sker under kustlinjen och havet. En stor andel av dessa flödesvägar blir ofullständiga, och en del är konceptuellt osäkra därför att de förutsätter att kustlinjen ligger stilla under ren mycket lång framtida tidsperiod (detta diskuteras också i kapitel 9).

Vi har valt att inkludera de ofullständiga flödesvägarna i de analyser som presenteras i detta kapitel. Att exkludera dessa flödesvägar påverkar statistiken från det utvalda området signifikant. Inkluderas de ofullständiga flödesvägarna ökar dock analysens osäkerhet. Resultat för beräkningsfallen presenteras som:

- Figur 10-4. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas längder.
- Figur 10-5. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas genombrottstider.
- Figur 10-6. Kumulativa fördelningar av specifika flödet vid flödesvägarnas startpunkter.
- Figur 10-7. Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas största djup.

Alla resultat som ges nedan gäller flödesvägar inom 1 och 99 percentilerna.

De fyra figurerna visar att flödesvägarna från det utvalda området är betydligt längre, har större genombrottstider och mindre flöden vid startpunkterna samt når djupare ner i modellen. Värt att notera är den stora variation i flödesvägarnas egenskaper som demonstreras inom det utvalda området. Inom det utvalda området förekommer flödesvägar med mycket goda egenskaper, men även flödesvägar med mindre goda egenskaper.

En jämförelse mellan det utvalda området och det regionala undersökningsområdet i Laxemar visar på följande skillnader:

Längder

För 5 percentilen är längderna från det utvalda området 6 gånger längderna från Laxemar. För 50 percentilen är längderna från det utvalda området 11 gånger längderna från Laxemar. För 95 percentilen är längderna från det utvalda området 10 gånger längderna från Laxemar.

Genombrottstider

För 5 percentilen är tiderna från det utvalda området 52 gånger tiderna från Laxemar. För 50 percentilen är tiderna från det utvalda området 105 gånger tiderna från Laxemar. För 95 percentilen är tiderna från det utvalda området 99 gånger tiderna från Laxemar.

Specifika flödet vid startpunkterna

För 5 percentilen är flödet vid det utvalda området 0,5 gånger flödet vid Laxemar. För 50 percentilen är flödet vid det utvalda området 0,2 gånger flödet vid Laxemar. För 50 percentilen är flödet vid det utvalda området 0,2 gånger flödet vid Laxemar.

10.5 Slutsats

Jämförelserna ovan visar att det framför allt är genombrottstiderna som är betydligt längre från det utvalda området, men variationen i genombrottstider är extremt stor inom det utvalda området:

- 5 percentilen visar på tider lika med 6 500 år.
- Medianen (50 percentilen) visar på tider lika med 530 000 år.
- 95 percentilen visar på tider lika med 17 miljoner år.

Denna extrema variation visar på att de lokala egenskaperna är av stor betydelse. Flödesvägar med olika startpunkter placerade inom någon kilometer, inom det utvalda området, uppvisar genombrottstider som varierar inom fyra storleksordningar. Vi bör dock notera att den variation som erhålls för genombrottstider och specifika flödet till stor del beror av den lokala heterogenitet som definierats i modellen. Bergets lokala heterogenitet är skalberoende och den lokala heterogenitet som finns i modellen är representativ för en regional skala.

Variationen i flödesvägarnas längd, som också är mycket stor, är dock inte lika påverkade av bergets lokala heterogenitet utan återspeglar mer den heterogenitet som följer av grundvattnets flödesmönster, som i sin tur huvudsakligen styrs av topografin. Längderna på flödesvägarnas från det utvalda området varierar mellan 1 400 m för den 1 percentilen till 57 km för den 99 percentilen.

En visualisering av flödesvägar från de två studerade områden ges i kapitel 13, i figurerna 13-8 och 13-9.



Figur 10-4. Analys av flödesvägar från utvalda områden Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas längder.



Figur 10-5. Analys av flödesvägar från utvalda områden Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas genombrottstider.



Figur 10-6. Analys av flödesvägar från utvalda områden Kumulativa fördelningar av specifika flödet vid flödesvägarnas startpunkter.



Figur 10-7. Analys av flödesvägar från utvalda områden Kumulativa fördelningar av flödesvägarnas största djup.

11 Betydelsen av heterogenitet i materialegenskaper

11.1 Bakgrund

I den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/ analyserades egenskaper för olika teoretiska förvarsområden. Dessa förvarsområden var av storleken 1 km² och var jämt utspridda över modellområdet, se figur 11-1. Varje förvarsområde representerades av 36 flödesvägar. För varje förvarsområde beräknades statistiska egenskaper baserat på de 36 flödesvägarna.

Samma typ av analys har även utförts i denna studie. Syftet med den analys som utförts i denna studie är att visa på den variation i flödesvägarnas egenskaper som erhålls inom förvarsområdena.

11.2 Beräkningsfall

Beräkningarna som presenteras i detta kapitel är baserat på basfallet fall 51si1, med det tilläget att lokal heterogenitet har inkluderats i de litologiska enheterna, i enlighet med den beskrivning som ges i sektion 3.11. Detta beräkningsfall benämns fall 51si1Sc1, samma metod för lokal heterogenitet användes i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/. Fall 51si1Sc1 kan jämföras med fall 8As2 i den tidigare studien. Analysen avser den variation i flödesvägarnas egenskaper som erhålls inom förvarsområdena med storlek 1 km². (Inga förvarsområden under havet har analyserats).



Figur 11-1. Studerade förvarsområden ovanför kustlinjen. Storleken på varje område är 1 km². Notera att dessa områden inte är samma sak som det numeriska beräkningsnätet som används då grundvattentryck och grundvattenflöden ska beräknas.

11.3 Simuleringar och resultat

Följande metodik användes för att beräkna förvarsområdenas egenskaper:

- 1. Flödesvägar beräknades från förvarsdjup med hjälp av virtuella partiklar. Från varje förvarsområde initierades 36 flödesvägar.
- 2. Förvarsområdenas egenskaper utvärderades utifrån de statistiska egenskaperna på de flödesvägar som initieras i varje förvarsområde. För varje förvarsområde analyserades de 36 flödesvägarna, medianen (P50), 10 percentilen (P10) och 90 percentilen (P90) beräknades för varje förvarsområde, avseende flödesvägarnas längder, genombrottstider och fördelningen av specifika flödet vid startpunkterna (vid förvarsdjup). Spridningen i egenskaper inom ett förvarsområde har definierats som skillnaden mellan 90 percentilen och 10 percentilen (P90–P10).
- 3. Kumulativa fördelningarna beräknades med avseende på förvarsområdenas egenskaper. De kumulativa fördelningarna har plottats i delkapitlets figurer.
- 4. Korrelationen mellan medianen och extrem värden (90 percentilen eller 10 percentilen) plottades i figurer.

Resultat för beräkningsfallen presenteras som:

Längd: Figur 11-2 presenterar kumulativ fördelning av medianen av flödesvägarnas längder och kumulativ fördelning av spridningen i längd. Figur 11-3 presenterar korrelationen mellan 10 percentilen och medianen av flödesvägarnas längd, 10 percentilen representerar extremvärden för de studerade förvarsområdena.

Genombrottstid: Figur 11-4 presenterar kumulativa fördelningar av medianen av flödesvägarnas genombrottstider och spridning i genombrottstid. Figur 11-5, presenterar korrelationen mellan 10 percentilen och medianen av flödesvägarnas genombrottstid, 10 percentilen representerar extremvärden för de studerade förvarsområdena.

Specifika flödet: Figur 11-6 presenterar kumulativa fördelningar av medianen av specifika flödet vid startpunkterna och spridning i startpunkternas specifika flöde. Figur 11-7 presenterar korrelationen mellan 90 percentilen och medianen av specifika flödet vid startpunkterna, 90 percentilen representerar extremvärden för de studerade förvarsområdena.

Figurerna visar att spridningen (variationen) i flödesvägarnas egenskaper inom ett förvarsområde (storlek 1 km²) kan vara betydande. Om vi använder medianen som ett mått på förvarsområdenas karaktäristiska egenskaper så noterar vi det följande:

Längd: Det finns förvarsområden där medianlängden överstiger 10 km, men dessa förvarsområden kan också inkludera mycket kortare flödesvägar. 10 percentilen kan vara mindre än 1 km när medianen är större än 10 km, se figur 11-3. Trenden är dock tydlig, när medianvärdet ökar så tenderar också värdet för 10 percentilen att öka.

Genombrottstid: Det finns förvarsområden där medianen för genombrottstiden överstiger 10 000 år, men dessa förvarsområden kan också inkludera mycket kortare tider. 10 percentilen kan vara mindre än 100 år när medianen är större än 10 000 år, se figur 11-5. Precis som för flödesvägarnas längder är trenden tydlig, när medianvärdet för genombrottstiderna ökar så tenderar också värdet för 10 percentilen att öka.

Specifika flödet: Det finns förvarsområden där medianen för det specifika flödet vid startpunkterna är mycket litet, i storleksordningen 0,1 liter/m² år, men dessa förvarsområden kan också inkludera positioner med mycket större flöden. 90 percentilen kan vara större än 10 liter/m² år, när medianen är nära 0,1 liter/m² år, se figur 11-7. Det förekommer en tydlig trend också för de specifika flödena, när medianvärdet ökar så tenderar också värdet för 90 percentilen att öka.

Vi bör notera att den variation som erhålls för genombrottstider och specifika flödet till stor del beror av den lokala heterogenitet som definierats i modellen. Bergets lokala heterogenitet är skalberoende och den lokala heterogenitet som finns i modellen är representativ för en regional skala. Variationen i flödesvägarnas längd är dock inte lika påverkade av bergets lokala heterogenitet utan återspeglar mer den heterogenitet som följer av grundvattnets flödesmönster, som i sin tur huvudsakligen styrs av topografin.



Figur 11-2. Analys av flödesvägar från förvarsområden. Kumulativ fördelning av medianen av flödesvägarnas längder och kumulativ fördelning av spridningen i längd.



Figur 11-3. Analys av flödesvägar från förvarsområden. Korrelationen mellan 10 percentilen och medianen av flödesvägarnas längd.



Figur 11-4. Analys av flödesvägar från förvarsområden. Kumulativa fördelningar av medianen av flödesvägarnas genombrottstider och spridning i genombrottstid.



Figur 11-5. Analys av flödesvägar från förvarsområden. Korrelationen mellan 10 percentilen och medianen av flödesvägarnas genombrottstid.



Figur 11-6. Analys av flödesvägar från förvarsområden. Kumulativa fördelningar av medianen av specifika flödet vid startpunkterna och spridning i startpunkternas specifika flöde.



Figur 11-7. Analys av flödesvägar från förvarsområden. Korrelationen mellan 90 percentilen och medianen av specifika flödet vid startpunkterna.

En analys av andelen förvarsområden som uppvisar tydligt heterogena egenskaper förutsätter en definition av vad som menas med tydligt heterogena egenskaper. Vad som är av intresse är att veta när både små och stora värden för egenskaperna förekommer inom samma område. Vi har valt att använda följande definition:

• Ett förvarsområde uppvisar tydligt heterogena egenskaper när spridningen i egenskaper (P90–P10) inom området är större än medianvärdet för medianerna (P50) för alla studerade områden.

Längd: Medianvärdena för flödesvägarnas längd visas i figur 11-2, medianvärdet för den kumulativa fördelningen som visas i figuren är lika med 2 000 m. Om vi jämför detta värde med kurvan för spridning i samma figur får vi följande resultat: 35 % av förvarsområdena har tydligt heterogena egenskaper.

Genombrottstid: Medianvärdena för flödesvägarnas genombrottstider visas i figur 11-4, medianvärdet för den kumulativa fördelningen som visas i figuren är lika med 2 600 år. Om vi jämför detta värde med kurvan för spridning i samma figur får vi följande resultat: 80 % av förvarsområdena har tydligt heterogena egenskaper.

Specifika flödet: Medianvärdena för flödesvägarnas genombrottstider visas i figur 11-6, medianvärdet för den kumulativa fördelningen som visas i figuren är lika med 0,5 liter/ m² år. Om vi jämför detta värde med kurvan för spridning i samma figur får vi följande resultat: 80 % av förvarsområdena har tydligt heterogena egenskaper.

Resultaten bör betraktas som kvalitativa snarare än som kvantitativa.

12 Betydelsen av strandlinjeförskjutning

12.1 Bakgrund

I detta kapitel presenteras resultat av simuleringar med modeller där havsnivån har varierats från nivån +100 m ö h och ned till dagens nivå +0 m ö h. Syftet med dessa simuleringar är att i ett storregionalt perspektiv demonstrera principerna för hur flödesvägarna (och flödets storlek) från tre utvalda förvarsplatser kan förändras då havets nivå och kustlinjens läge förändras.

Vi har valt att använda samma modell som i de övriga simuleringarna som presenteras i denna studie. Modellen upprättades ursprungligen i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/. Modellen sträcker sig ett stycke österut under den nuvarande havsnivån, dock inte längre än ungefärligen till mitten av Kalmarsund. Om man önskar studera den strandlinjeförskjutning som bedöms komma äga rum i framtiden, måste modellen expanderas kraftigt år öster och nordöst; eftersom den framtida kustlinjen bedöms komma at retirera i den riktningen. Detta framgår av bottentopografin.

Med avseende på syftet som angivits ovan finns det två alternativ vid en analys av strandlinjeförskjutningens betydelse: Antingen studerar man den strandlinjeförskjutning som har ägt rum, eller studerar man den strandlinjeförskjutning som bedöms komma äga rum i framtiden. Vi har valt att studera den strandlinjeförskjutning som har ägt rum, ett av skälen till detta är att en sådan analys kan utföras med den modell som har använts för de övriga simuleringarna presenterade i denna studie och i den tidigare studien.

12.2 Strandlinjeförskjutning, landhöjning

Östersjöområdets utveckling från den senaste istiden har inneburit en generell landhöjning i östra Småland. Högsta tidigare kustlinjen (HK) återfinns i dag på nivåer av cirka 100 m ö h. Direkt efter inlandsisens avsmältning var strandlinjeförskjutningen relativt snabb (från cirka 14 000 år till cirka 11 500 före nutid). Därefter har strandförskjutningen varit lugnare med en avsänkning från cirka 25 m till nuvarande Östersjönivå. Efter Ancylusstadiets (10 800–9 500 år före nutid) inledningsfas uppvisar området en viss transgression¹ med en förhöjning av kustlinjen av cirka 11 m. I figur 12-3 visas en strandförskjutningskurva från Oskarshamn, se också figur 4-26 i /Rhén et al. 2009/. I figur 12-1 visas en översiktlig bild över vilka landområden som legat över HK. Figur 12-2 visar kustlinjens ungefärliga läge, cirka 25 m högre än dagens nivå, under Ancylustid (10 000 år före nutid). Från figurerna är det uppenbart att merparten av modellregionen ligger över tidigare högsta kustlinje.

¹ Transgression innebär en höjning av havsnivån, dvs strandlinjeförskjutningen är riktad inåt land.



Figur 12-1. Bilden visar att cirka. 30 % av modellregionen ligger under högsta kustlinje. Den röda rektangeln indikerar utbredning för det regionala undersökningsområdet vid Laxemar.



Figur 12-2. Bilden visar att för 10 000 år sedan var enbart cirka 10 % av modellregionen under Östersjöns nivå. Den röda rektangeln indikerar utbredning för det regionala undersökningsområdet vid Laxemar.



Figur 12-3. Strandlinjeförskjutning i Oskarshamns kustområde efter den senaste nedisningen. De blå symbolerna representerar en kurva från /Svensson 1989/ som baserar sig på sjösediment i regionen. Kurvan utan symboler härrör från en modellering av /Påsse 2001/. Se också figur 4-26 i /Rhén et al. 2009/.

12.3 Beräkningsfall

För att analysera strandlinjeförskjutningen och flödesvägarnas egenskaper har vi upprättat 5 olika beräkningsfall:

- Fall 51H1: Som basfallet, men med havets nivå satt till +100 m ö h, inget saltvatten, inga densitetseffekter, stationär lösning. Detta beräkningsfall motsvarar situationen då havets nivå var som högst (HK) efter den senaste istiden för cirka 14 000 år sedan.
- Fall 51H2: Som basfallet, men med havets nivå satt till +75 m ö h, inget saltvatten, inga densitetseffekter, stationär lösning. Detta beräkningsfall motsvarar situationen för cirka 12 500 år sedan.
- Fall 51H3: Som basfallet, men med havets nivå satt till +50 m ö h, inget saltvatten, inga densitetseffekter, stationär lösning. Detta beräkningsfall motsvarar situationen för cirka 11 500 år sedan.
- Fall 51H4: Som basfallet, men med havets nivå satt till +25 m ö h, inget saltvatten, inga densitetseffekter, stationär lösning. Detta beräkningsfall motsvarar situationen för cirka 10 000 år sedan.
- Fall 51H5: Som basfallet, men med havets nivå satt till +0 m ö h, inget saltvatten, inga densitetseffekter, stationär lösning. Detta beräkningsfall motsvarar **dagens situation**.

Simuleringarna som presenteras i detta kapitel baseras på basfallet i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/. I den tidigare studien var modellens basnivå satt till –2 500 m ö h, medan modellen som användes för de simuleringar som presenteras i detta kapitel har en basnivå vid –6 000 m. De studerade beräkningsfallen inkluderar inte någon lokal heterogenitet inom de olika litologiska enheterna. Randvillkor längs med modellen övre yta (topprandvillkor) är specificerad potentiell grundvattenbildning (flödesrandvillkor) och dessutom inkluderar modellen ytvattenflöden. Kustlinjen för de olika beräkningsfallen, +100 m ö h och dagens nivå, framgår av figur 12-4.



(i) Havsytans nivå +100 m.ö.h.



(ii) Havsytans nivå +0 m.ö.h. (nuvarande situation)

Figur 12-4. Kustlinjens läge och havets utbredning för olika nivåer på havsytan. Det utvalda områdena är markerade med svarta linjer.

Så som nämnts ovan är modellen som användes för de simuleringar som presenteras i detta kapitel en sötvattenmodell (inget saltvatten och inga densitetseffekter) och beräkningarna utfördes för stationära förhållanden. En mer avancerad approach hade varit att utföra simuleringen som tidsberoende, med saltvatten och densitetsdrivet flöde. Detta alternativ valdes inte, huvudsakligen av två skäl:

- (i) Initialvillkoret för en sådan simulering måste sättas betydligt före tidpunkten då havsnivån är vid +100 m ö h, alltså en tidpunkt betydligt före inlandsisens avsmältning. Detta leder till att en glacial cykel bör simuleras för att skapa ett lämpligt initialvillkor, alltså en liknande simulering som i kapitel 7. Detta bedömdes dock ligga utanför syftet med de simuleringar som presenteras i detta kapitel.
- (ii) Syftet med simuleringarna som presenteras i detta kapitel är att i ett storregionalt perspektiv demonstrera principerna för hur flödesvägarna från utvalda förvarsplatser kan förändras då havets nivå och kustlinjens läge förändras (dessutom hur storleken på flödet vid startpunkterna förändras). Detta syfte bedömdes kunna uppnås med den förenklad metod, alltså med en stationär lösning, inget saltvatten och inga densitetseffekter.

12.4 Utvalda områden

Flödesvägar från tre områden kommer att jämföras i detta kapitel. De utvalda områdenas läge framgår av figurerna 12-4, 12-5 och 12-6.



Figur 12-5. De utvalda områdena och den regionala topografin. Områdena är markerade med svarta linjer. Topografin under den högsta kustlinjen (HK=+100 m ö h) är markerad med gröna färgtoner.



Figur 12-6. Läge för de tre studerade områdena (B, C och D).

Område B

Område B är ett utvalt inströmningsområde med mycket goda egenskaper med avseende på flödesvägar från förvarsdjup. Det studerade området är detsamma som analyserades i kapitel 10, området beskrivs på följande vis. "Baserat på de jämförelser av förvarsområden som presenteras i kapitel 7 i den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/ har vi identifierat ett område i Viråns avrinningsområde som baserat på testerna i kapitel 7 demonstrerar goda och robusta egenskaper. För en närmare presentation av området hänvisas till kapitel 10.

Område C

Område C är ett område norr om område B, som också ligger nära kustlinjen då havsnivån är +100 m ö h. Området har inte utvalts för att det uppvisar extrema egenskaper med avseende på flödesvägar från förvarsdjup. Området är beläget på en höjdrygg och består huvudsakligen av inströmningsområden, men även av lokala utströmningsområden.

Område D

Område D är ett område nordost om område B. Områdets topografiska nivå är ungefär 50 m ö h, området ligger således under havets nivå, då havets nivå är högre +50 m ö h. Området har utvalts för att det är ett typiskt utströmningsområde. Det är också av intresse att analysera hur områdets egenskaper förändras då kustlinjen passerar över området.

För de tre studerade områdena och för de fem olika beräkningsfallen varierar avståndet till kustlinjen mellan några få kilometer och upp till 27 km.

Flödesvägarna från de tre områdena förändras på olika karaktäristiska vis då kustlinjens läge förändras. Särskilt område B och D utgör två ytterligheter med avseende på frågeställningen om hur flödesvägarna förändras då kustlinjens läge förändras.

12.5 Beräkningsmetodik för analysen av flödesvägarna

Följande beräkningsmetodik användes för att analysera effekten av olika lägen för kustlinjen.

- 1. För varje beräkningsfall och för varje studerat område simuleras flödesvägar från förvarsdjup (500 m).
- 2. Flödesvägarnas egenskaper utvärderades statistiskt, kumulativa fördelningar beräknas av flödesvägarnas längder, genombrottstider och dessutom beräknas fördelningen av specifika flödet vid startpunkterna (förvarsdjup) samt flödesvägarnas största djup.
- 3. Statistiska mått för de ovan nämnda fördelningarna plottas i figurer, som funktioner av avståndet till kustlinjen.

12.6 Resultat

De beräknande flödesvägarna för de fem beräkningsfallen presenteras i figurerna 12-7 till 12-11.

Resultatet av en statistisk analys av flödesvägarnas egenskaper presenteras i ett antal figurer. I figurerna presenteras värden för 10 percentilen, medianen och 90 percentilen, med avseende på kumulativa fördelningar av flödesvägar från de studerade områdena. I figurerna visas hur de statistiska måtten förändras med avståndet till kustlinjen.

Område B

Figur 12-12: Flödesvägarnas längd som funktion av avståndet till kustlinjen.

Figur 12-13: Flödesvägarnas genombrottstid som funktion av avståndet till strandlinje.

Figur 12-14: Specifika flödet vid startpunkterna som funktion av avståndet till strandlinje.

Figur 12-15: Flödesvägarnas största djup som funktion av avståndet till kustlinjen.

Område C

Figur 12-16: Flödesvägarnas längd som funktion av avståndet till kustlinjen.

Figur 12-17: Flödesvägarnas genombrottstid som funktion av avståndet till strandlinje.

Figur 12-18: Specifika flödet vid startpunkterna som funktion av avståndet till strandlinje.

Figur 12-19: Flödesvägarnas största djup som funktion av avståndet till kustlinjen.

Område D

Figur 12-20: Flödesvägarnas längd som funktion av avståndet till kustlinjen.

Figur 12-21: Flödesvägarnas genombrottstid som funktion av avståndet till strandlinje.

Figur 12-22: Specifika flödet vid startpunkterna som funktion av avståndet till strandlinje.

Figur 12-23: Flödesvägarnas största djup som funktion av avståndet till kustlinjen.



Figur 12-7. Flödesvägar från de studerade områdena. Havets nivå= +100 m ö h. *Stationär lösning.*



Figur 12-8. Flödesvägar från de studerade områdena. Havets nivå = +75 m ö h. Stationär lösning.



Figur 12-9. Flödesvägar från de studerade områdena. Havets nivå= +50 m ö h. Stationär lösning.



Figur 12-10. Flödesvägar från de studerade områdena. Havets nivå= +25 m ö h. Stationär lösning.



Figur 12-11. Flödesvägar från de studerade områdena. Havets nivå= +0 m ö h. Stationär lösning.

Område B

Område B är ett utvalt inströmningsområde med mycket goda egenskaper med avseende på flödesvägar från förvarsdjup.

Längder

Av figur 12-12 framgår att längden på de kortare flödesvägarna, dvs längder under 10 percentilen, inte förändras tydligt då kustlinjen förflyttas bort från det studerade området. En viss mycket ringa ökning av längderna äger rum fram tills dess att kustlinjen befinner sig cirka 6 km från det studerade området. De ringa förändringarna av de korta flödesvägarna beror på att de kortare flödesvägarnas rumsliga fördelning ges av grundvattnets lokala flödesmönster, som i sin tur beror av den lokala topografin innanför kustlinjen, och den lokala topografin innanför kustlinjen påverkas inte av att kustlinjen förflyttas.

Den rumsliga fördelningen av flödesvägar med längder kring medianlängden, och med längder över medianlängden, kontrolleras av grundvattnets flödesmönster ett stycke nedströms om det studerade området. Dessa längre flödesvägar tenderar att följa kustlinjen och blir alltså längre då kustlinjen förflyttas bort från det studerade området. Medianlängden växer fram tills dess att kustlinjen befinner sig på avståndet



Figur 12-12. Område B. Analys av strandlinjeförskjutningen betydelse. Flödesvägarnas längd som funktion av avståndet till kustlinjen.

cirka 12 km; därefter förändras inte medianlängden ytterligare. Detta kan tolkas som att flödesvägarnas kring medianlängden tappar kontakten med kustlinjen då kustlinjen befinner sig bortom 12 km.

De allra längsta flödesvägarna, dvs längder över den 90 percentilen, följer den retirerande kustlinjen ända fram till kustlinjens nuvarande läge, faktiskt når vissa flödesvägar ända fram till modellens östra rand. Dessa extremt långa flödesvägar når ner till modellens bas, se figur 12-15. Det ska dock påpekas att dessa extrema flödesvägar är tydligt påverkade av konceptuell och numerisk osäkerhet. Flödesvägar som går ner i det djupt liggande salta grundvattnet (och blandas med det salta grundvattnet) får mycket långa genombrottstider (t ex tider > 1 miljon år). Flödesvägar med extremt långa genombrottstider är konceptuellt osäkra eftersom vissa konceptuella förutsättningarna för de utförda beräkningarna inte kan anses vara helt tillämpliga i ett miljonårs perspektiv. Detta diskuteras också i kapitel 9.

Genombrottstider

Figur 12-13 presenterar genombrottstider, kurvorna i figuren återspeglar till stor del det systembeteende som har beskrivits ovan med avseende på flödesvägarnas längder.

- Genombrottstider för 10 percentilen påverkas endast mycket ringa. Dessa flödesvägar är lokala.
- Medianen för genombrottstiderna växer fram tills dess att kustlinjen befinner sig på cirka 12 km avstånd, därefter ingen förändring. Dessa flödesvägar är regionala.
- Genombrottstider för 90 percentilen växer stadigt allteftersom kustlinjen retirerar, tiderna ökar från 3 miljoner år till 12 miljoner år. Tiderna är långa redan då kustlinjen ligger nära området, och extremt långa genombrottstider erhålls då kustlinjen befinner sig långt från det studerade området. Dessa flödesvägar är storregionala.

Specifika flödet vid startpunkterna

Av figur 12-14 framgår att det specifika flödet vid startpunkterna inte förändras då kustlinjen retirerar. Detta beror på att det specifika flödet vid startpunkterna ges av bergets lokala egenskaper och grundvattnets lokala flödesmönster, och dessa påverkas inte av att kustlinjen förflyttas.



Figur 12-13. Område B. Analys av strandlinjeförskjutningen betydelse. Flödesvägarnas genombrottstid som funktion av avståndet till kustlinjen.



Figur 12-14. Område B. Analys av strandlinjeförskjutningen betydelse. Specifika flödet vid startpunkterna som funktion av avståndet till kustlinjen.



Figur 12-15. Område B. Analys av strandlinjeförskjutningen betydelse. Flödesvägarnas största djup som funktion av avståndet till kustlinjen.

Flödesvägarnas största djup

Kurvorna i figur 12-15 återspeglar till stor del det systembeteende som har beskrivits ovan med avseende på flödesvägarnas längder.

- Största djup för 10 percentilen påverkas endast mycket ringa av att kustlinjen retirerar. Dessa flödesvägar är lokala.
- Medianen för största djup växer fram tills dess att kustlinjen befinner sig på cirka 12 km avstånd, därefter ingen förändring. Dessa flödesvägar är regionala och når stort djup (3 000 m).
- Största djup för 90 percentilen ökar fram tills dess att kustlinjen befinner sig på cirka 12 km avstånd (som för medianen), därefter ingen förändring. Dessa flödesvägar är storregionala och når ner till extremt stora djup, faktiskt ända ner till modellens bas (6 000 m).

Område C

Område C består av huvudsakligen av inströmningsområden, men även av lokala utströmningsområden.

Längder

Figur 12-16 presenterar flödesvägarnas längder, kurvorna i figuren återspeglar ett likartat mönster som för Område B, dock är alla längder kortare.

- Längder för 10 percentilen växer fram tills dess att kustlinjen befinner sig på cirka 6 km avstånd, därefter ingen förändring. Dessa flödesvägar är lokala.
- Medianen för genombrottstiderna växer fram tills dess att kustlinjen befinner sig på cirka 6 km avstånd (som för 10 percentilen), därefter ingen förändring. Dessa flödesvägar är också lokala.
- Längder för 90 percentilen växer stadigt fram tills dess att kustlinjen befinner sig på cirka 12 km avstånd, därefter endast ringa förändring. Dessa flödesvägar är regionala.

När kustlinjen ligger nära Området C så är nästan alla flödesvägar lokala. Notera den stora relativa skillnaden mellan medianen och 90 percentilen. För område C är huvuddelen av flödesvägarna lokala, också när kustlinjen ligger långt från området, endast cirka 10 % av flödesvägarna utvecklas till att få regional utsträckning när kustlinjen retirerar.

Genombrottstider

Figur 12-17 presenterar genombrottstider, kurvorna i figuren återspeglar till stor del det systembeteende som har beskrivits ovan med avseende på flödesvägarnas längder.

- Genombrottstider för 10 percentilen påverkas ringa. Dessa flödesvägar är lokala.
- Medianen för genombrottstiderna växer något fram tills dess att kustlinjen befinner sig på cirka 6 km avstånd, därefter ingen förändring. Dessa flödesvägar är också lokala.
- Genombrottstider för 90 percentilen växer stadigt fram tills dess att kustlinjen befinner sig på cirka 12 km avstånd, därefter endast ringa förändring. Dessa flödesvägar är regionala.

Specifika flödet vid startpunkterna

Av figur 12-18 framgår att det specifika flödet vid startpunkterna ökar fram till dess att kustlinjen befinner sig på cirka 6 km avstånd, därefter ingen förändring. Den ringa förändringen av det specifika flödet vid startpunkterna är en funktion av att grundvattnets lokala flödesmönster kring Område C förändras något fram tills dess att kustlinjen befinner sig på cirka 6 km avstånd, därefter ingen förändring.



Figur 12-16. Område C. Analys av strandlinjeförskjutningen betydelse. Flödesvägarnas längd som funktion av avståndet till kustlinjen.



Figur 12-17. Område C. Analys av strandlinjeförskjutningen betydelse. Flödesvägarnas genombrottstid som funktion av avståndet till kustlinjen.



Figur 12-18. Område C. Analys av strandlinjeförskjutningen betydelse. Specifika flödet vid startpunkterna som funktion av avståndet till kustlinjen.



Figur 12-19. Område C. Analys av strandlinjeförskjutningen betydelse. Flödesvägarnas största djup som funktion av avståndet till kustlinjen.

Flödesvägarnas största djup

Kurvorna i figur 12-19 återspeglar till stor del det systembeteende som har beskrivits ovan med avseende på flödesvägarnas längder och genombrottstider.

- Största djup för 10 percentilen påverkas endast mycket ringa av att kustlinjen retirerar. Dessa flödesvägar är lokala och huvudsakligen uppåtriktade.
- Medianen för största djup växer fram tills dess att kustlinjen befinner sig på cirka 6 km avstånd, därefter ingen förändring. Dessa flödesvägar är också lokala, men initialt är dessa flödesvägar inte uppåtriktade.
- Största djup för 90 percentilen ökar fram tills dess att kustlinjen befinner sig på cirka 12 km avstånd, därefter ingen förändring. Dessa flödesvägar är regionala och når ner till betydande djup.

Område D

Området har utvalts för att det är ett typiskt utströmningsområde. Område D ligger under havets nivå för de två första beräkningsfallen, för dessa två beräkningsfall anges avståndet till kustlinjen med ett negativt tal, detta tal anger avståndet till kustlinjen *uppströms* om det studerade området.

Längder

Figur 12-20 presenterar flödesvägarnas längder, kurvorna i figuren visar på ett systembeteende som tydligt skiljer sig från det mönster som demonstrerats för områdena B och C. All längder är mycket korta, detta är en följd av att området är ett tydligt utströmningsområde, i ett sådant område är alla flödesvägarna är uppåtriktade.

När området ligger under havet är nästan alla flödesvägarna vertikala, längderna är mycket nära 500 m. När kustlinjen kommer närmare området, och så småningom passerar över området, vrids grundvattnets lokala flödesmönster en aning, och en liten andel av flödesvägarnas får något större längder, dock är dessa förändringar små. Inga flödesvägar utvecklas till att få regional utsträckning när kustlinjen retirerar förbi området.



Figur 12-20. Område D. Analys av strandlinjeförskjutningen betydelse. Flödesvägarnas längd som funktion av avståndet till kustlinjen.

Genombrottstider

Figur 12-21 presenterar flödesvägarnas genombrottstider, också kurvorna i denna figur visar på ett systembeteende som tydligt skiljer sig från det mönster som demonstrerats för områdena B och C.

När området ligger under havet är genombrottstiderna mycket stora, detta beror på att grundvattenflödets är litet (se figur 12-22).

När kustlinjen kommer närmare området, och så småningom passerar över området, ökar grundvattenflödets storlek markant, av detta följer att genombrottstiderna minskar kraftigt.

När området ligger över havet är genombrottstiderna relativt korta och de förändras inte ytterliggare då kustlinjen fortsätter att retirerar bortom området. Skillnaden mellan 10 percentilen och 90 percentilen är ungefär en storleksordning, denna skillnad beror av lokala faktorer.

Specifika flödet vid startpunkterna

Figur 12-22 presenterar Specifika flödet vid startpunkterna. Kurvorna i denna figur visar på ett systembeteende som är en spegelbild av hur genombrottstiderna förändrades (se figur 12-21).

När området ligger under havet är grundvattenflödena mycket små, detta beror på att den hydrauliska gradient är mycket liten under havsytan (som inte undulerar).

När kustlinjen kommer närmare området, och så småningom passerar över området, ökar grundvattenflödets storlek markant, eftersom den hydrauliska gradienten ökar.

När området ligger tydligt över havet är utvecklas snabbt ett flödesmönster för grundvattnet, och en storlek på grundvattenflödet, som endast i mycket ringa grad påverkas av att kustlinjen fortsätter att retirerar bortom området. Skillnaden mellan 10 percentilen och 90 percentilen är ungefär en storleksordning, denna skillnad beror av lokala faktorer.



Figur 12-21. Område D. Analys av strandlinjeförskjutningen betydelse. Flödesvägarnas genombrottstid som funktion av avståndet till kustlinjen.



Figur 12-22. Område D. Analys av strandlinjeförskjutningen betydelse. Specifika flödet vid startpunkterna som funktion av avståndet till kustlinjen.



Figur 12-23. Område D. Analys av strandlinjeförskjutningen betydelse. Flödesvägarnas största djup som funktion av avståndet till kustlinjen.

Flödesvägarnas största djup

Figur 12-23 visar att för Område D förändras inte flödesvägarnas största djup med kustlinjens läge. Detta beror på att området är ett tydligt utströmningsområde, i ett sådant område är alla flödesvägarna är uppåtriktade. I ett utströmningsområde blir startpunkternas djup (500 m) också flödesvägarnas största djup.

12.7 Flödesvägarnas förändringshastighet kontra hastigheten för det djupa grundvattnets rörelse

Vi har tidigare nämnt i kapitel 9 att grundvattnet rör sig mycket långsamt på stort djup. En större förflyttning av det (salta) grundvattnet på stort djup i modellens inre delar kan ta flera miljoner år. Förklaringen till att vi kan beräkna djupa flödesvägar genom modellen är att förändringar i tryck sprids mycket snabbare genom modellen än den tid det tar för grundvattnet att röra sig. Baserat på tryck och nivå kan vi beräkna grundvattenflöden (riktning och storlek) och därmed flödesvägar. Flödesvägarna illustrerar således grundvattnets flödesmönster, och flödesvägarna kan förändras allteftersom kustlinjen retirerar. Detta betyder inte att vattnet längs med en flödesväg nödvändigtvis rör sig lika snabbt som flödesvägen förändras. Längs med de djupa regionala flödesvägarna rör sig grundvattnet ofta betydligt långsammare än kustlinjens horisontala förflyttningshastighet.

Detta gäller särskilt för perioden mellan 14 000 år till cirka 10 000 före nutid, under denna period sjönk havsnivån med cirka 75 m. Vilket för det studerade området motsvarar en strandlinjeförflyttning på cirka 25–30 km, vilket motsvarar en horisontal strandlinjeförflyttning av cirka 6 m/år. Under de senaste 10 000 åren har den horisontala strandlinjeförskjutningen i medeltal varit några decimeter per år.

Beräkningarna av genombrottstider för de djupa flödesvägarna är osäkra, eftersom den uppskattade storleken på genomsläpplighet och effektiv porositet är osäkra för stora djup. Modellberäkningarna som presenterats ovan visar dock att vattnet längs med de djupa flödesvägarna från Område C rör sig med en hastighet i storleksordningen några centimetrar på ett år (endast advektiv transport beräknas i denna studie).

Diskussionen ovan kan summeras på följande vis: För det studerade området retirerar kustlinjen från sitt högsta läge (HK) och fram till sitt nuvarande läge på 14 000 år, kustlinjen förflyttas samtidigt horisontalt cirka 25–30 km. Under samma tidsperiod rör sig det djupa grundvattnet mindre än cirka 1 km (advektiv transport).

Ett exempel, om man jämför flödesvägarna från område B och C i figurerna 12-7 till 12-11 får man lätt intrycket att de långa och djupa flödesvägarna kontinuerligt följer med kustlinjens reträtt, och det är en korrekt slutsats om man betraktar hur de djupa och långa flödesvägarnas rumsliga fördelning förändras med tiden. Längden på den studerade tidsperioden är 14 000 år. Man gör dock inte en korrekt slutsats om man tror att dessa förändringar i de djupa och långa flödesvägarnas rumsliga utbredning motsvarar hur grundvattnet har rört sig från Område B eller C under en 14 000 år lång tidsperiod. Som nämnts ovan har vattnet längs med de djupa flödesvägarna från Område C endast rört sig i storleksordningen 1 km under den 14 000 år långa tidsperioden, och vattnet längs med de extremt djupa flödesvägarna från Område B har rört sig ännu mindre (endast advektiv transport och med reservation för osäkerheterna i uppskattningen av det djupa grundvattnets rörelsehastighet).

Om man vågar sig på en liknelse så kan man jämföra de djupa flödesvägarna med ett system av vägar, och vattnet längs med flödesvägarna kan jämföras med de fordon som finns på dessa vägar. Processen som vi beskriver ovan för de djupa flödesvägarna motsvarar att vägnätets längd och riktning förändras snabbare än den hastighet med vilken fordonen rör sig längs med vägarna.

12.8 Slutsats

Syftet med simuleringarna som presenterats ovan är att i ett storregionalt perspektiv demonstrera principerna för hur flödesvägarna från utvalda förvarsplatser kan förändras då havets nivå och kustlinjens läge förändras.

En jämförelse av områdena visar på det följande.

Område B är ett tydligt inströmningsområde, de flesta av flödesvägarna från detta område påverkas tydligt när kustlinjen förflyttas bort från området. Förändringarna i flödesvägarnas egenskaper är störst då kustlinjen är nära området, och minskar då kustlinjen rör sig vidare bortåt. När kustlinjen befinner sig på ett avstånd större än cirka 12 km är det endast de allra längsta och djupaste flödesvägarna (10 %) som fortsätter att påverkas av kustlinjens läge. Det ska dock påpekas att dessa extrema flödesvägar (storregionala flödesvägar) är tydligt påverkade av konceptuell och numerisk osäkerhet.

Område C består av huvudsakligen av inströmningsområden, men även av lokala utströmningsområden: Nästan alla flödesvägar från detta område påverkas tydligt när kustlinjen förflyttas bort från området, men bara då kustlinjens läge är inom ett avstånd av cirka 6 km från området. När kustlinjen förflyttar sig vidare bortåt så är det endast de längsta och djupaste 10 % av flödesvägarna som fortsätter att följa kustlinjen. När kustlinjen befinner sig på ett avstånd större än cirka 12 km påverkas inte flödesvägarna från området av kustlinjens läge.

Område D är ett tydligt utströmningsområde. När hela området ligger tydligt över havet påverkas inte flödesvägarna från området nästan alls av kustlinjens läge.

Flödesvägarna från de tre områdena förändras på olika karaktäristiska vis då kustlinjens läge förändras. Område B och D utgör två ytterligheter med avseende på frågeställningen om hur flödesvägarna förändras då kustlinjens läge förändras.

Under förutsättning att de studerade områdena är tydligt innanför kustlinjen kan vi komma fram till följande slutsats: Flödesvägar från tydliga inströmningsområden påverkas mest av kustlinjens förflyttning, och flödesvägar från tydliga utströmningsområden påverkas nästan inte alls av kustlinjens förflyttning.

För det studerade systemet, med den genomsläpplighet och den topografi som systemet har beskrivits med i modellen, visar de ovan presenterade simuleringarna att även för tydliga inströmningsområden så avtar betydelsen av kustlinjens läge väsentligt då avståndet till kustlinjen är större än cirka 6 km.

13 Visualisering av beräknade flödesvägar och salinitet

I detta kapitel visualiseras vissa beräkningsresultat. Resultaten som presenteras är beräknade för basfallet med densitetsdrivet flöde (fall 51si1 och fall 51gi1) och utan densitetsdrivet flöde (fall 51nd). Resultaten avser den nuvarande flödessituationen (2000 AD). Lokal heterogenitet är inte inkluderad.

I bilaga B framgår även salinitetens fördelning i modelldomänen vid den nuvarande flödessituationen (2000 AD).

Exempel på flödesvägar från förvarsdjup ges i figurerna 13-1 och fram till 13-7. Figurerna visar inte flödesvägar från alla studerade områdena med storlek 1·1 km, utan bara från cirka 20 % av områdena. I figurerna plottas cirka 10 000 slumpvis utvalda flödesvägar. Flödessituationen avser 2000 AD. Flödesvägarnas startpunkter bildar ett regelbundet mönster på djupet 515 m.

Figur 13-1 visar exempel på flödesvägar (fall 51si1) och i figur 13-2 visar samma flödesvägar, men dessutom visas salinitet i en sektion genom modellen. Den övre blå ytan i figur 13-2 representerar modellens topografi, de ljusa punkterna på denna yta indikerar utströmningspunkter för flödesvägar. Av figuren framgår det att utströmningspunkterna tenderar att vara belägna utmed dalgångar.

Figur 13-3 visar flödesvägar från förvarsdjup för fall 51nd (inga densitetseffekter, sötvatten och stationärt tillstånd).

Figur 13-4 visar flödesvägar från förvarsdjup för fall 51sil (saltvatten och densitetseffekter).

Figur 13-5 visar flödesvägar från förvarsdjup för fall 51*gil* (saltvatten och densitetseffekter, initialvillkor baserat på approximativ glacial beräkning).

Notera att betydligt djupare (och längre) flödesvägar erhålls då densitetseffekter inte inkluderas (jämför figur 13-3 med figurerna 13-4 och 13-5).

Vid en jämförelse mellan figurerna 13-4 och 13-5 framgår tydligt en skillnad i hur kustlinjens position påverkar flödesvägarnas rumsliga fördelning (nära kustlinjen). Kustlinjens (och havets) påverkan på flödesmönstret är mer uttalad i figur 13-5 (initial villkor *gi1*) än i figur 13-4 (initial villkor *si1*). Denna skillnad är delvis en följd av förenklingar som ingår i den glaciala simuleringen (se kapitel 7). Under den simulerade glaciala tidsperioden ligger iskanten stilla i modellen vid den nuvarande kustlinjen, under hela den glaciala perioden, en 20 000 år till 30 000 år lång period. Vid iskanten blir den hydrauliska gradienten mycket stor, vilket förorsakar betydande grundvatten flöden nära kustlinjen, och en stor andel av dessa flöden uppvisar en betydande vertikal komponent. Dessa flöden påverkar tydligt fördelningen av salt och tryck nära kustlinjen i det initialvillkor (*gi1*) som användes för den simuleringen som presenteras i figur 13-5. Dessa effekter påverkar flödesvägarna (nära kustlinjen) som presenteras i figur 13-5, fastän de flödesvägar som presenteras i figur 13-5 representerar en situation 10 000 år efter den glaciala simuleringen. Se även figurerna som visar salthalternas fördelning i kapitel 7, särskilt figur 7-6.

Främst med avseende på fall 51sil (densitetsdrivet flöde) diskuteras i sektion 6.3 andelen av flödesvägarnas som uppvisar stora längder, stora djup och stora salthalter längs med flödesvägarna. Flödesvägar för fall 51sil (densitetsdrivet flöde) presenteras i

- För fall 51si1 (densitetsdrivet flöde) och med avseende på 99 percentilen är det största djup som de virtuella partiklarna når under flödesvägarna cirka 1 800 m. Med avseende på 95 percentilen och densitetsdrivet flöde är det största djup som de virtuella partiklarna når under flödesvägarna cirka 1 100 m. Se figur 13-4.
- I sektion 6.3 diskuteras också andelen långa flödesvägar i modellen. Med avseende på fall 51si1 (densitetsdrivet flöde) är medianen för flödesvägarnas längd cirka 1 200 m, 95 percentilen är cirka 3 900 m och 99 percentilen cirka 7 200 m. Se figur 13-4.

I figur 13-4, är det mindre än 1 % av flödesvägarna som är längre än 7 200 m, och mindre än 1 % av flödesvägarna når större djup än 1 800 m.



Figur 13-1. Flödesvägar från förvarsdjup för fall 51si1. Flödessituationen avser 2000 AD. Flödesvägarnas startpunkter bildar ett regelbundet mönster på djupet 515 m. Antalet flödesvägar i figuren är 10 000. Flödesvägarnas färger är slumpmässigt valda.



Figur 13-2. Flödesvägar från förvarsdjup för fall 51si1 och salinitet. Flödessituationen avser 2000 AD. Flödesvägarnas startpunkter bildar ett regelbundet mönster på djupet 515 m. Figuren visar också salinitet i en sektion genom modellen. Den övre blå ytan representerar modellens topografi, de ljusa punkterna på denna yta indikerar utströmningspunkter för flödesvägar. Av figuren framgår det att utströmningspunkterna tenderar att vara belägna utmed dalgångar. Flödesvägarnas färger är slumpmässigt valda.



Figur 13-3. Flödesvägar från förvarsdjup för fall fall 51nd (inga densitetseffekter, sötvatten och stationärt tillstånd). Flödessituationen avser 2000 AD. Flödesvägarnas startpunkter bildar ett regelbundet mönster på djupet 515 m (10 000 flödesvägar). Flödesvägarnas färger är slumpmässigt valda. Kustlinjen är markerad med svart pil.



Figur 13-4. Flödesvägar från förvarsdjup för fall 51si1 (saltvatten och densitetseffekter). Flödessituationen avser 2000 AD. Flödesvägarnas startpunkter bildar ett regelbundet mönster på djupet 515 m (10 000 flödesvägar). Flödesvägarnas färger är slumpmässigt valda. Kustlinjen är markerad med svart pil.



Figur 13-5. Flödesvägar från förvarsdjup för fall 51gi1 (saltvatten och densitetseffekter, initialvillkor baserat på approximativ glacial beräkning). Flödessituationen avser 2000 AD. Flödesvägarnas startpunkter bildar ett regelbundet mönster på djupet 515 m. (10 000 flödesvägar). Flödesvägarnas färger är slumpmässigt valda. Kustlinjen är markerad med svart pil.

De största salthalter som förekommer längs med flödesvägarna för fall 51sil (densitetsdrivet flöde) diskuteras också i sektion 6.3. Från figur 6-6 kan vi dra följande slutsatser:

- 95 % av flödesvägarna når aldrig ner till saltvatten med större salinitet än 1,4 %, se figur 13-6.
- 99 % av flödesvägarna når aldrig ner till saltvatten med större salinitet än 4,1 %, se figur 13-7.

Om vi studerar vatten med en salthalt större än 5 %, så når endast 1 % av flödesvägarna ner till vatten med en sådan salthalt.

Det ska dock påpekas att de extremt djupa och långa flödesvägar som förekommer på stort djup i modellen är tydligt påverkade av konceptuell och numerisk osäkerhet. Flödesvägar som går ner i det djupt liggande salta grundvattnet (och blandas med det salta grundvattnet) får mycket långa genombrottstider (tex tider > 1 miljon år). Flödesvägar med extremt långa genombrottstider är konceptuella törutsättningarna för de utförda beräkningarna inte kan anses vara helt tillämpliga i ett miljonårs perspektiv. Detta diskuteras också i kapitel 9.

I kapitel 10 diskuteras flödesvägar från två områden (i) ett utvalt område med goda egenskaper och (ii) Laxemar regionalt undersökningsområde. En visualisering av dessa flödesvägar ges i figurerna 13-8 (utvalt område) och 13-9 (Laxemar).



Figur 13-6. Flödesvägar från förvarsdjup för fall 51si1 (saltvatten och densitetseffekter). Flödessituationen avser 2000 AD. Flödesvägarnas startpunkter bildar ett regelbundet mönster på djupet 515 m. Antalet flödesvägar i figuren är 10 000. Dessutom visas i figuren en iso-yta (blå) som representerar salinitet 1,4 %. Andelen flödesvägar ovanför iso-ytan är 95 %. Flödesvägarnas färger är slumpmässigt valda.



Figur 13-7. Flödesvägar från förvarsdjup för fall 51si1 (saltvatten och densitetseffekter). Flödessituationen avser 2000 AD. Flödesvägarnas startpunkter bildar ett regelbundet mönster på djupet 515 m. Antalet flödesvägar i figuren är 10 000. Dessutom visas i figuren en iso-yta (grön) som representerar salinitet 4,1 %. Andelen flödesvägar ovanför iso-ytan är 99 %. Flödesvägarnas färger är slumpmässigt valda.



Figur 13-8. Flödesvägar från det utvalda området för fall 51si1. Flödessituationen avser 2000 AD. Flödesvägarnas startpunkter ligger på djupet 515 m. Antalet flödesvägar i figuren är 400. Färgskalan avser flödesvägarnas genombrottstid.



Figur 13-9. Flödesvägar från Laxemar regionalt undersökningsområde (inga startpunkter under havet) för fall 51si1. Flödessituationen avser 2000 AD. Flödesvägarnas startpunkter ligger på djupet 515 m. Antalet flödesvägar i figuren är 7 300. Färgskalan avser flödesvägarnas genombrottstid.
14 Slutsatser

14.1 Specifika slutsatser

Ett antal antaganden och modellförenklingar vid storregional grundvattensimulering har studerats i föreliggande studie. Med den metodik som tillämpats kan man dra följande generella slutsatser.

Topprandvillkor

Jämfört med topografistyrt topprandvillkor så innebär en infiltrationsstyrd rand vid en topografi liknande östra Smålands att såväl flödesvägars längder som genombrottstider från ett förvar endast ökar marginellt (mindre än 10 %). Specifika flöden vid flödesvägars startpunkter minskar marginellt (mindre än 10 %).

Modelldjup

Det tunga saltvattnet på nivåer djupare än förvarsdjup förhindrar till stor del grundvattnets omsättning från att ingå i vidsträckta flödesceller till stora djup. En storregional saltvattenmodell (med densitetsdrivet flöde) som ska användas för att simulera flödesvägar från förvarsdjup behöver därför inte vara 6 km djup (vid en topografi liknande östra Smålands), mycket likartade resultat erhålls för en modell med cirka 3 km djup. En rimlig generell slutsats för den storregionala modellen är att flödesvägar som når djupt ner i saltvattnet bör betraktas som mycket osäkra.

Initialvillkor för salthaltsfördelning vid transient modellering

I den tidigare studien /Ericsson et al. 2006/ användes initialvillkor (initialtillstånd) i vilka salthalterna baserades på observerade salthalter i djupa borrhål. En alternativ uppskattning av den initiala situationen (cirka 10 000 år BP) kan erhållas genom en förenklad grundvattensimulering av en hel föregående glacial period. En sådan simulering har utförts i denna studie enbart med syftet att erhålla en alternativt initial situation vid tidpunkten cirka 10 000 år BP.

Om flödesvägarnas statistik jämförs finner man att simuleringar baserade på de båda studerade initialvillkoren producerar likartade resultat. En viss skillnad föreligger för de allra längsta flödesvägarna (över 95 percentilen för populationen) som är längre och går något djupare med det alternativa initialvillkoret. Därmed blir de längsta genombrottstiderna också längre med ett initialvillkor som beräknats råda efter en glaciationscykel.

Randvillkor för modelldomänens yttre begränsningssidor

Modellens sidor följer tydliga regionala ytvattendelare. Randvillkoret längs med modellens sidor är att inget vattenflöde kan passera genom modellens sidor (dvs täta väggar längs med ytvattendelare). Flödesvägar som initieras längs med modellens sidor är tydligt längre och har längre genombrottstider i jämförelse med fördelningen av alla flödesvägar. Flödesvägar som initierats längs med en inre ytvattendelare också är tydligt längre och har längre genombrottstider än fördelningen av alla flödesvägar.

Flödesvägar med startpunkter nära modellens sidor påverkas enbart marginellt av närheten till randvillkoret, med avseende på det statistiska beteendet för flödesvägars längder, genombrottstider och flöden på förvarsdjup. Denna slutsats bygger på en jämförelse mellan flödesvägar initierade längs med en tydlig vattendelare i modellens inre och flödesvägar initierade längs med modellens sidor.

Modellens sidor följer alltså tydliga regionala ytvattendelare. Ett exempel på en mindre tydlig vattendelare är den topografiska ytvattendelaren väster om Laxemar. Den topografiska ytvattendelaren väst Laxemar är svagt utvecklad och dess betydelse som grundvattendelare har specialstuderats i en särskild studie /Holmén 2008/. Slutsatsen från den studien är att ytvattendelaren väst Laxemar inte är en grundvattendelare för det djupa grundvattenflödet. Detta beror på att den topografiska ytvattendelare väst Laxemar inte är särskilt tydligt, med vilket menas att den topografiska skillnaden mot omgivningen är liten. Dessutom är denna ytvattendelare lokaliserad i nästan rät vinkel mot det regionala grundvattenflödet. Följden blir att det sker ett visst grundvattenflöde på stort djup under och genom denna ytvattendelare.

Konceptuellt osäkra flödesvägar

Ett konceptuellt problem, speciellt utmärkande för storregional modellering, består i att vi beräknar ett flödesfält för en viss tidpunkt, t ex 2000 AD, och vi analyserar sedan detta flödesfält under antagandet att flödesfältet är en rimligt representativ beskrivning av en framtida situation, och vi analyserar det också som om det vore ett stationärt tillstånd. Problemet är att flödesfältet inte nödvändigtvis är representativt för en situation i en fjärran framtid, och flödesfältet som är beräknat för en viss tidpunkt är inte heller ett stationärt tillstånd. De konceptuella diskrepanserna mellan våra antaganden och flödesfältets egenskaper leder till att en viss andel av de beräknade flödesvägarna blir ofullständiga och konceptuellt osäkra. Exempelvis kan vissa flödesvägar beräknas från en startpunkt ett stycke från kustlinjen och fram till ett område nära kustlinjen där flödessituationen är så tydligt transient att de lokala avvikelserna i massbalans är så stora att flödesvägens fortsatta utveckling inte kan bestämmas.

Flödesvägar som inte är helt bestämda benämns som ofullständiga flödesvägar medan en fullständig flödesväg kan följas från en startpunkt och fram till en utströmningspunkt på modellens övre yta. En ofullständig flödesväg når aldrig fram till modellens övre yta. I projektet genomfördes en transient simulering för ett beräkningsfall (fall 51si1), detta fall analyserades med avseende på osäkra flödesvägar. Andelen fullständiga flödesvägar utgjorde 86 % och ofullständiga 14 %.

Det finns ofullständiga flödesvägar av alla längder och genombrottstider, men en stor andel av de ofullständiga flödesvägarna visar på följande egenskaper: De är långa, de har stora genombrottstider, flödena vid startpunkterna är små och de når ned till stort djup.

Konceptuellt osäkra flödesvägar är också flödesvägar vars egenskaper till stor del beror av konceptuella förenklingar, t ex att kustlinjen ligger still när flödesvägar beräknas. Konceptuellt osäkra flödesvägar kan uppvisa mycket stora genombrottstider, men dessa beräknade tider kan t ex förutsätta att flödessituationen inte förändras under miljoner år, t ex måste kustlinjen ligger stilla i miljoner år. Flödesvägar som är osäkra av konceptuella skäl kan också vara ett problem i en analys av ett regionalt flödesmönster, eftersom dessa flödesvägar ofta uppvisar långa längder och stora genombrottstider och därför kan påverkar vilka områden som uppvisar de bästa egenskaperna. Om flödesvägar simuleras och analyseras i en storregional modell med syfte att söka efter potentiellt goda förvarsområden, så blir statistiken för vissa goda områdena mindre fördelaktig då de ofullständiga flödesvägarna exkluderas, eftersom dessa flödesvägar tenderar att vara långa och demonstrera stora genombrottstider, men dessa värden är kopplade till stora osäkerheter.

Jämförelse av område nära Hultsfred med Laxemar

Ett ur hydraulisk synvinkel fördelaktigt tolkat område cirka 15 km sydost om Hultsfred har jämförts med Laxemarområdet med avseende på flödesvägarnas egenskaper. Jämförelserna visar att det framför allt är genombrottstiderna som är betydligt längre från det utvalda området. För 50 percentilen är genombrottstiderna cirka 100 gånger större vid det utvalda området jämfört med Laxemar. Variationen i genombrottstider är emellertid extremt stor inom det utvalda området: 5 percentilen visar på tider lika med 6 500 år, medianen (50 percentilen) visar på tider lika med 530 000 år och 95 percentilen visar på tider lika med 17 miljoner år. Denna extrema variation visar på att de lokala egenskaperna är av stor betydelse. Flödesvägar med olika startpunkter placerade inom någon kilometer, inom det utvalda området, uppvisar genombrottstider som varierar inom fyra storleksordningar. Variationen i flödesvägarnas längd, som också är mycket stor, är dock inte lika påverkade av bergets lokala heterogenitet utan återspeglar mer den heterogenitet som följer av grundvattnets flödesmönster, som i sin tur huvudsakligen styrs av topografin. Längderna på flödesvägarna från det utvalda området varierar mellan 1 400 m för den 1 percentilen till 57 km för den 99 percentilen.

Lokala variationer

En analys har utförts för att studera den variation i flödesvägarnas egenskaper som kan förekomma inom ett förvarsområde och mellan olika förvarsområden. Resultaten visar att spridningen (variationen) i flödesvägarnas egenskaper inom ett förvarsområde (storlek 1 km²) kan vara betydande.

Om vi använder medianen som ett mått på förvarsområdenas karaktäristiska egenskaper så noterar vi det följande: Det finns förvarsområden där medianlängden överstiger 10 km, men dessa förvarsområden kan också inkludera mycket kortare flödesvägar. 10 percentilen kan vara mindre än 1 km när medianen är större än 10 km. Det finns förvarsområden där medianen för genombrottstiden överstiger 10 000 år, men dessa förvarsområden kan också inkludera mycket kortare tider. 10 percentilen kan vara mindre än 100 år när medianen är större än 10 000 år. Vidare finns det förvarsområden där medianen för det specifika flödet vid startpunkterna är mycket litet, i storleksordningen 0,1 liter/m² år, men dessa förvarsområden kan också inkludera positioner med mycket större flöden. 35 % av förvarsområdena har tydligt heterogena egenskaper när det gäller flödeslängder. 80 % av förvarsområdena har heterogena egenskaper när det gäller genombrottstider och 80 % av förvarsområdena har heterogena egenskaper med avseende på specifika flöden på förvarsdjup. Resultaten bör betraktas som kvalitativa snarare än som kvantitativa.

Strandlinjeförskjutning och flödesvägar

Simuleringar har utförts där havsnivån har varierats från nivån +100 m ö h och ned till dagens nivå +0 m ö h. Syftet med dessa simuleringar är att i ett storregionalt perspektiv demonstrera principerna för hur flödesvägarna från utvalda förvarsplatser kan förändras då havets nivå och kustlinjens läge förändras.

Område B är ett tydligt inströmningsområde, de flesta av flödesvägarna från detta område påverkas tydligt när kustlinjen förflyttas bort från området. Förändringarna i flödesvägarnas egenskaper är störst då kustlinjen är nära området, och minskar då kustlinjen rör sig vidare bortåt. När kustlinjen befinner sig på ett avstånd större än cirka 12 km är det endast de allra längsta och djupaste flödesvägarna (10 %) som fortsätter att påverkas av kustlinjens läge. Det ska dock påpekas att dessa extrema flödesvägar (storregionala flödesvägar) är tydligt påverkade av konceptuell och numerisk osäkerhet.

Område C består av huvudsakligen av inströmningsområden, men även av lokala utströmningsområden: Nästan alla flödesvägar från detta område påverkas tydligt när kustlinjen förflyttas bort från området, men bara då kustlinjens läge är inom ett avstånd av cirka 6 km från området. När kustlinjen förflyttar sig vidare bortåt så är det endast de längsta och djupaste 10 % av flödesvägarna som fortsätter att följa kustlinjen. När kustlinjen befinner sig på ett avstånd större än cirka 12 km påverkas inte flödesvägarna från området av kustlinjens läge.

Område D är ett tydligt utströmningsområde. När hela området ligger tydligt över havet påverkas inte flödesvägarna från området nästan alls av kustlinjens läge.

Flödesvägarna från de tre områdena förändras på olika karaktäristiska vis då kustlinjens läge förändras. Område B och D utgör två ytterligheter med avseende på frågeställningen om hur flödesvägarna förändras då kustlinjens läge förändras. Under förutsättning att de studerade områdena är tydligt innanför kustlinjen kan vi komma fram till följande slutsats: Flödesvägar från tydliga inströmningsområden påverkas mest av kustlinjens förflyttning, och flödesvägar från tydliga utströmningsområden påverkas nästan inte alls av kustlinjens förflyttning. För det studerade systemet, med den genomsläpplighet och den topografi som systemet har beskrivits med i modellen, visar de ovan presenterade simuleringarna att även för tydliga inströmningsområden så avtar betydelsen av kustlinjens läge väsentligt då avståndet till kustlinjen är större än cirka 6 km.

14.2 Övergripande slutsatser

Med hänsyn till ovanstående har de genomförda känslighetsstudierna av antaganden och modellförenklingar ej förändrat de generella slutsatser som presenterats i SKB-rapporten /Ericsson et al. 2006/.

Den upprättade modellen har en hög diskretiseringsgrad i relation till det studerade områdets storlek. Särskilt i vertikal riktning är cellstorlekarna små nära markytan. Eftersom topprandvillkor med infiltration har tillämpats i denna studie, och eftersom det upprättade beräkningsnätet följer topografins undulation, har inga explicita sensitivitetsstudier genomförts av beräkningscellernas horisontala diskretisering och dess påverkan på grundvattenomsättningen vid markytan eller grundvattenbildning. Man kan konstatera att vid de hydrauliska konduktivitetsfält som förekommer i det studerade området och med den cellindelning som användes i den tidigare SKB-rapporten /Ericsson et al. 2006/ så bedöms de vertikala flödeshastigheterna vid markytan vara rimliga i den tidigare studiens referensfall (jämför även /Marklund 2009/ och /Wörman et al. 2006/). Denna slutsats baseras delvis på de känslighetsanalyser som utförts i denna studie (se sektionen som diskuterar topprandvillkoret och flödesvägarnas egenskaper).

I föreliggande studie konstateras att, utifrån antagna konduktivitetsfält och ansatt grundvattenbildning, den lokala heterogeniteten i förvarsskalan kan vara betydande vad gäller flödeslängder, genombrottstider och flöden på förvarsdjup. En storregional modellering baseras med nödvändighet på generaliserade data med en skalupplösning relevant för att kunna ge indikativa resultat i ett översiktligt modelleringsproblem. Detta kräver vanligtvis en medelvärdesbildning av indata och det finns en risk att modelleringen kan ge resultat i regional skala som övertolkas. Strukturer eller zoner och vattengenomsläpplighet kan emellertid lokalt ha en betydande hydrogeologisk påverkan i de relativt begränsade flödesceller, kilometerskala, som är vanliga i Baltiska sköldens topografi. De lokala egenskaperna måste kartläggas vid platsundersökningar.

Storregional grundvattenmodellering leder ofta till att vissa, men ett fåtal, flödesvägar kan bli extremt långa. Flödestiderna blir följaktligen även extremt långa t.o.m. i ett geologiskt perspektiv. Dessa flödesvägar är konceptuellt och beräkningsmässigt osäkra vilket i sin tur kan innebära att felaktiga slutsatser dras om flödesregimen. Man kan utifrån de känslighetsstudier som genomförts i denna studie konstatera att det finns ett behov att utveckla modelleringsmetodiken med hänsyn till transienta randvillkor.

15 Referenser

Publikationer utgivna av SKB (Svensk Kärnbränslehantering AB) kan hämtas på www.skb.se/publikationer.

Bear J, Verruijt A, 1987. Modeling groundwater flow and pollution. Dordrecht: Reidel.

Brandt M, Jutaman T, Alexandersson H, 1994. Sveriges vattenbalans. Årsmedelvärden 1961–1990 av nederbörd, avdunstning och avrinning. SMHI rapport Hydrologi 49.

Dverstorp B, 2007. SSI:s granskning av SKB:s storregionala grundvattenmodellering för östra Småland (SKB Rapport 06-64). SSI Rapport 2007:11, Statens strålskyddsinstitut.

Ericsson L O, Holmén J, Rhén I, Blomquist N, 2006. Storregional grundvattenmodellering – fördjupad analys av flödesförhållanden i östra Småland. Jämförelse av olika konceptuella beskrivningar. SKB R-06-64, Svensk Kärnbränslehantering AB.

Fetter C W, 1993. Contaminant hydrogeology. New York: Macmillan.

Follin S, Svensson U, 2003. On the role of mesh discretisation and salinity for the occurrence of local flow cells. Results from a regional-scale groundwater flow model of Östra Götaland. SKB R-03-23, Svensk Kärnbränslehantering AB.

Geier J, 2006. Review of supraregional modeling of groundwater flow in eastern Småland SKB R-06-64. SKI-INSITE TRD-06-04, Statens kärnkraftinspektion.

Gleeson T, Manning A H, 2008. Regional groundwater flow in mountainous terrain: Threedimensional simulations of topographic and hydrologic controls. Water Resources Research, 44, W10403, doi:10.1029/2008WR006848.

Gustafson G, 2009. Hydrogeologi för bergbyggare. Stockholm: Formas. (T / Forskningsrådet Formas 2009:2)

Gustafson G, Stanfors R, Wikberg P, 1989. Swedish Hard Rock Laboratory. Evaluation of 1988 year preinvestigations and description of the target area, the island of Äspö. SKB TR 89-16, Svensk Kärnbränslehantering AB.

Gustafsson B G 2004. Millenial changes of the Baltic Sea salinity. Studies of the sensitivity of the salinity to climate change. SKB TR-04-12, Svensk Kärnbränslehantering AB.

Holmén J G, 1997. On the flow of groundwater in closed tunnels. Generic hydrogeological modelling of nuclear waste repository, SFL 3-5. SKB TR 97-10, Svensk Kärnbränslehantering AB.

Holmén J G, 2008. Premodelling of the importance of the location of the upstream hydraulic boundary of a regional flow model of the Laxemar-Simpevarp area. Site descriptive modeling, SDM-Site Laxemar. SKB R-08-60, Svensk Kärnbränslehantering AB.

Holmén J G, 2010. Geoan user's guide, Version 54a. Internal company document, available upon request from Golder Associates, e-mail: johan_holmen@golder.se.

Holmén J G, Forsman J, 2005. Flow of groundwater from great depths into the near surface deposits – modelling of a local domain in northeast Uppland. SKB R-04-31, Svensk Kärnbränslehantering AB.

Holmén J G, Stigsson M, Marsic N, Gylling B, 2003. Modelling of groundwater flow and flow paths for a large regional domain in northeast Uppland. A three-dimensional, mathematical modelling of groundwater flows and flow paths on a super-regional scale, for different complexity levels of the flow domain. SKB R-03-24, Svensk Kärnbränslehantering AB.

Landau L D, Lifshitz E M, 1960. Electrodynamics of continuous media. Oxford: Pergamon.

Lantmäteriverket, 2001. GSD-Elevation database (50 m resolution). Medgivande M2001/5268, Lantmäteriet, Gävle.

Marklund L, 2009. Topographic control of groundwater flow. Ph. D. thesis. Royal Institute of Technology (KTH), Stockholm, Sweden. (TRITA-LWR PHD 1052)

Marklund L, Wörman A, Geier J, Simic E, Dverstorp B, 2008. Impact of landscape topography and quarternary overburden on the performance of a geological repository of nuclear waste. Nuclear Technology, 163, s 165–179.

Matheron G, 1967. Eléments pour une théorie des milieux poreux. Paris: Masson et Cie.

Nationalencyklopedin, 1993. Höganäs: Bra böcker.

Neuman S P, 1987. Stochastic continuum representation of fractured rock permeability as an alternative REV and fracture network concepts. In: Farmer I W (ed). Rock mechanics: proceedings of the 28th U.S. Symposium, University of Arizona, Tucson, 29 June – 1 July 1987. Rotterdam: Balkema.

Pollock D W, 1989. Documentation of computer programs to compute and display pathlines using results from the U.S. Geological Survey modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model. Denver, CO: U.S. Geological Survey.

Påsse T, 2001. An empirical model of glacio-isostatic movements and shore-level displacement in Fennoscandia. SKB R-01-41, Svensk Kärnbränslehantering AB.

RETROCK, 2005. RETROCK: Treatment of geosphere retention phenomena in safety assessments. Final report of the RETROCK Concerted Action. Work performed as part of the European Atomic Energy Community's (Euratom) framework of the specific research and training programme. Contract No FIKW-CT-2001-20201, EUR 21230 EN, European Commission.

Rhén I, Hartley L, 2009. Bedrock hydrogeology Laxemar. Site descriptive modelling, SDM-Site Laxemar. SKB R-08-92, Svensk Kärnbränslehantering AB.

Rhén I, Forsmark T, Forssman I, Zetterlund M, 2006. Evaluation of hydrogeological properties for Hydraulic Conductor Domains (HCD) and Hydraulic Rock Domains (HRD). Laxemar subarea – version 1.2. SKB R-06-22, Svensk Kärnbränslehantering AB.

Rhén I, Forsmark T, Hartley L, Jackson P, Roberts D, Swan D, Gylling B, 2008. Hydrogeological conceptualisation and parameterisation. Site descriptive modelling, SDM-Site Laxemar. SKB R-08-78, Svensk Kärnbränslehantering AB.

Rhén I, Forsmark T, Hartley L, Joyce S, Roberts D, Gylling B, Marsic N, 2009. Bedrock hydrogeology. Model testing and synthesis. Site descriptive modelling, SDM-Site Laxemar. SKB R-08-91, Svensk Kärnbränslehantering AB.

SGU, **1981.** Hydrogeologisk karta över Kalmar län. SGU ser Ah1. Uppsala: SGU. (Sveriges Geologiska Undersökning, serie Ah 1)

SGU, **1989**. Karta över grundvattnet i Jönköpings län. Uppsala: SGU. (Sveriges Geologiska Undersökning, serie Ah 11)

SGU, 2005a. Den svenska delen av den digitala geologiska kartan över Fennoskandiska skölden. I: Koistinen T, Stephens M, Bogatchev V, Nordgulen Ø, Wennerstrom M, Korhonen J V, 2004. Geological map of the Fennoscandian Shield 1:2,000,000. Espoo: Geological Survey of Finland, Trondheim: Geological Survey of Norway, Uppsala: Geological Survey of Sweden, Moscow: Ministry of Natural Resources of Russia.

SGU, 2005b. Databaser © Sveriges geologiska undersökning, Dnr: 30-414/2005, Uppsala.

SKB, **1992.** Characterization of crystalline rocks in deep boreholes. The Kola, Krivoy Rog and Tyrnauz boreholes. SKB TR 92-39, Svensk Kärnbränslehantering AB.

SKB, **2003.** Grundvattnets regionala flödesmönster och sammansättning – betydelse för lokalisering av djupförvaret. SKB R-03-01, Svensk Kärnbränslehantering AB.

Söderbäck B (red), 2008. Geological evolution, palaeoclimate and historical development of the Forsmark and Laxemar-Simpevarp areas. Site descriptive modelling, SDM-Site. SKB R-08-19, Svensk Kärnbränslehantering AB.

Smellie J, 2004. Recent geoscientific information relating to deep crustal studies. SKB R-04-09, Svensk Kärnbränslehantering AB.

SNA, 2002. Sveriges nationalatlas. Berg och jord. 3. utg. Stockholm: SNA Förlag.

SSI-SKI, 2007. Brev daterat 2007-10-22, SSI dnr 2007/1562/26 och SKI dnr 2007/598.

Svensson N-O, 1989. Late Weichselian and early Holocene shore displacement in the central Baltic, based on stratigraphical and morphological records from eastern Småland and Gotland, Sweden. Ph.. D. thesis. Lund University, Sweden.

Vidstrand P, Follin S, Zugec N, 2010. Groundwater flow modelling of periods with periglacial and glacial climate conditions – Forsmark. SKB R-09-21, Svensk Kärnbränslehantering AB.

Voss C I, Provost A M, 2001. Recharge-area nuclear waste repository in Southeastern Sweden. Demonstration of hydrogeologic siting concepts and techniques. SKI Report 01:44, Statens kärn-kraftinspekton (Swedish Nuclear Power Inspectorate).

Westman P, Wastegård S, Schoning K, Gustafsson B, Omstedt B, 1999. Salinity change in the Baltic Sea during the last 8,500 years: evidence, causes and models. SKB TR-99-38, Svensk Kärnbränslehantering AB.

Wikberg P (red), Gustafson G, Rhén I, Stanfors R, 1991. Äspö Hard Rock Laboratory. Evaluation and conceptual modelling based on the pre-investigations 1986–1990. SKB TR 91-22, Svensk Kärnbränslehantering AB.

Wörman A, Packman A I, Marklund L, Harvey J W, Stone S H, 2006. Exact three-dimensional spectral solution to surface-groundwater interactions with arbitrary surface topography. Geophysical Research Letters, 33, L07402, doi:10.1029/2006GL025747.

Wörman A, Packman A I, Marklund L, Harvey J W, Stone S H, 2007. Fractal topography and subsurface water flows from fluvial bedforms to the continental shield. Geophysical Research Letters, 34, L07402, doi:10.1029/2007GL029426.

Metod för att generera lokal heterogenitet

För några av de studerade beräkningsfallen har en lokal heterogenitet i den hydrauliska konduktiviteten införts för berget mellan deformationszonerna och diabasgångarna. Nedan presenteras metoden som har använts för att skapa denna heterogenitet.

I avsnitt 3.11 diskuterades olika metoder för att representera de heterogena egenskaperna för det sprickiga berget. I ett stokastiskt kontinuum beskrivning tilldelas olika bergblock egenskaper utifrån sannolikhets fördelningar som representerar det sprickiga bergets varierande egenskaper (se /Neuman 1987/. Med en stokastisk beskrivning kan modellen representera bergets lokala heterogenitet och anisotropi.

För att kunna använda en stokastiskkontinuum beskrivning i en matematisk modell är det nödvändigt att bestämma egenskaperna för de sannolikhetsfördelningar som ska användas för att tilldela bergblocken olika egenskaper.

Uppmätta värden på genomsläpplighet (i en viss skala i ett sprickigt berg) varierar från mätpunkt till mätpunkt, mätningarna visar alltså att det sprickiga bergets genomsläpplighet är en heterogen storhet. De uppmätta värdena är ofta lognormalfördelade. Dessutom visar fältobservationer vid t ex Äspölaboratoriet (Äspö HRL) att heterogeniteten är skalberoende. Detta skalberoende finns dokumenterat i flera olika studier t ex /Gustafson et al. 1989, Wikberg et al. 1991/. Skalberoendet i genomsläpplighet (konduktivitet) kan vara mycket komplicerat, eftersom det skapas av ett underliggande system av sprickor med mycket olika egenskaper, dessutom är sprickornas konnektivitet (hur de är sammankopplade i ett nätverk) också av stor betydelse för skalberoendet.

Den hydrauliska konduktiviteten varierar från plats till plats, men den varierar också med skalan över vilken konduktiviteten mätes. Det observerade skalberoendet i konduktivitet vid Äspölaboratoriet (Äspö HRL) kan tolkas på följande vis:

- För små volymer är variansen stor och för stora volymer är variansen liten.
- För små volymer är medianvärdet litet och för stora volymer är medianvärdet stort.

Baserat på observationen ovan kan vi anta att det kan finnas ett effektivvärde för den hydrauliska konduktiviteten. *Effektivvärdet* är det värde som erhålls vid så stora skalor att variansen är så liten att den kan försummas. Vid mindre skalor erhålls ett *ekvivalent värde* för den hydrauliska konduktiviteten, det ekvivalenta värdet bör kopplas till en viss skala och till en varians.

Ett effektivvärde förutsätter en stor volym. Dessutom förutsätts det att för mindre volymer (mindre skalor) inom denna volym är variationen i konduktivitet statistisk homogen. Med statistisk homogenitet menar vi att de statistiska egenskaperna (parametrarna) som beskriver konduktivitetens variation (i en viss skala) inte förändras inom den studerade volymen – alltså att alla olika värden på konduktivitet (stickprover) beskriver ett berg med samma statistiska egenskaper (eller med andra ord: att alla stickprov kommer från samma population).

I verkligheten kan ett effektivvärde vara svårt att mäta i fält, eftersom mätskalan kan bli mycket stor och statistisk homogenitet inte nödvändigtvis förekommer. Detta är dock ett mindre bekymmer för en teoretisk modell vars syfte det är att matematiskt beskriva ett heterogent medium vid olika skalor.

I en modell av ett flödesmedium, definierat som ett stokastiskt kontinuum (statistiskt homogent), indelas den studerade domänen i ett stort antal mindre volymer, kallade block. Varje block tilldelats slumpmässigt ett värde på hydraulisk konduktivitet, som härstammar från en lognormalfördelning.

Med avseende på ett uniformt flöde (som medelvärde) genom ett sådant heterogent medium (block med olika konduktivitet) har flera författare tagit fram analytiska matematiska lösningar för hur ett effektivvärde kan beräknas, t ex /Landau och Lifshitz 1960/ och /Matheron 1967/. De analytiska lösningarna beskriver effektivvärdet som en funktion av ett medianvärde och en standardavvikelse för den lognormalfördelning som definierar blockens konduktivitet.

För olika realiseringar av blockens konduktivitet kommer systemet av block att tillsammans producera olika värden på konduktivitet med avseende på flöde genom hela modellen av block. Dessa konduktivitetsvärden är ekvivalenta värden på hydraulisk konduktivitet för den studerade modellskalan.

Om modellens storlek ökas genom att antalet block i modellen ökas, då kommer den ekvivalenta hydrauliska konduktiviteten att asymptotiskt närma sig ett effektivvärde.

Modellskalan vid vilket ett effektivvärdet kan anses förekomma beror av variansen i den lognormalfördelning som används för att generera blockens konduktivitet, antalet block och blockens storlek, samt dessutom av en accepterbar avvikelse mellan den observerade ekvivalenta hydrauliska konduktiviteten och det teoretiska effektivvärdet.

I denna studie är lokal heterogenitet i hydraulisk konduktivitet (K-värde) definierad som ett stokastiskt kontinuum i enlighet med en metod presenterad i /Holmén 1997/. Heterogeniteten i K-värde (genomsläpplighet) för olika blockstorlekar definieras av olika lognormalfördelningar. Dessa lognormalfördelningar har egenskaper som varierar med skalan – median och standardavvikelse varierar med skalan – men egenskaperna är beräknade på ett sådant sätt att för alla olika skalor så producerar lognormalfördelningarna samma teoretiska effektivvärde (beräknat med den metod som föreslås av /Matheron 1967/). Dessutom är lognormalfördelningarnas egenskaper beräknade på ett sådant sätt att de reproducerar den varians i uppmätt konduktivitet, vid skalan 100 m, som har iakttagits vid fältmätningar (hydraultester) utförda vid SKB's platsunderökningar vid Oskarshamn (se Table A9-1 i /Rhén et al. 2008/).

Det finns alltså två processer i den metod som presenteras i /Holmén 1997/ som båda teoretiskt ska producera samma ekvivalenta värde på hydraulisk konduktivitet för den studerade modellskalan. Vilket kan beskrivas som följer:

- Om antalet block är konstant i modellen, men storleken på blocken ökas, så kommer modellens ekvivalenta hydrauliska konduktivitet att asymptotiskt närma sig ett effektivvärde. Detta beror på att blockens genomsläpplighet beskrivs av lognormalfördelningar, och dessa fördelningars egenskaper förändras med blockstorlek (fördelningarnas standardavvikelse minskar då blockstorleken ökar).
- Om blockstorleken är konstant, men antalet block i modellen ökas, så kommer modellens ekvivalenta hydrauliska konduktivitet att asymptotiskt närma sig ett effektivvärde. Detta beror inte på att blockens egenskaper förändras, utan på att antalet block ökar i modellen.

Följande metodik har använts för varje litologisk enhet i modellen, för deformationszonerna och för diabasgångarna.

- i. Effektivvärdet för den hydrauliska konduktiviteten i modellen med lokal heterogenitet sätts till det värde som användes i motsvarande modell (och motsvarande struktur) med lokal homogenitet. Om konduktiviteten i den homogena modellen har definierats som djupavtagande så avtar också effektivvärdet med djupet i den heterogena modellen.
- ii. Varje cell i beräkningsnätet tilldelas parametrar för en lognormalfördelning av konduktiviteten. Geometriska medelvärden och standardavvikelser för denna fördelning beräknas på ett sådant sätt att vid alla olika skalor så producerar lognormalfördelningarna samma effektivvärde för ett stokastiskt kontinuum. Cellerna tilldelas olika fördelningar beroende på cellstorlek, eftersom celler av olika storlek representerar olika skalor Dessutom är lognormalfördelningarnas egenskaper beräknade på ett sådant sätt att de på ett rimligt vis reproducerar den varians i uppmätt konduktivitet, vid skalan 100 m, som har iakttagits vid fältmätningar (hydrauliktester) utförda vid SKB's platsunderökningar vid Oskarshamn (se Table A9-1 i /Rhén et al. 2008/).
- iii. Varje cell i beräkningsnätet tilldelas slumpmässigt ett värde på den hydrauliska konduktiviteten utifrån den lognormalfördelning som tilldelats cellen.

Ingen rumslig korrelation är inkluderad när den lokala heterogeniteten genereras eftersom de flesta av modellens celler är större än 100 m (horisontalt).

När en lokal heterogenitet ska genereras stokastiskt i en modell som bygger på kontinuumbetraktelsen är det viktigt att tillämpa en metod för att generera den lokala heterogeniteten som är konsistent med teoretiska aspekter för ett stokastiskt kontinuum.

Effektivvärdet är ett betydelsefullt koncept när olika formuleringar av heterogenitet ska jämföras, och alldeles särskilt viktigt när en modell med homogen konduktivitet ska jämföras med en modell med heterogen konduktivitet. Effektivvärdet är nämligen bron mellan en homogen modells konduktivitet och konduktiviteten i en stokastisk kontinuummodell. Om båda modellerna ska ha jämförbara egenskaper vid stora skalor så ska effektivvärde för konduktiviteten i den heterogena modellen vara lika med den homogena modellens konduktivitet.

Ekvationer som beskriver den lokala heterogenitetens skalberoende (stokastiskt kontinuum:

Geometriskt medelvärde för lognormalfördelning som definierar bergblockens hydrauliska konduktivitet. Det geometriska medelvärdet baseras på en interpolerad kurva (A) se figur A-1.

 $K_{BG} = \frac{2((\arctan X)^{P_2}) - (\arctan P_1)^{P_2}}{(\arctan P_1)^{P_2}} \frac{\arctan(X P_3)}{\arctan(P_1 P_3)} \frac{X^{P_4}}{P_1^{P_4}} K_E$

Standardavvikelse (för eLog-värden) för lognormalfördelningen som definierar bergblockens hydrauliska konduktivitet. /Matheron 1967/. Se kurva (B) i figur A-2.

$$\sigma_{eLog KB} = \sqrt{6 eLog \left(\frac{K_E}{K_{BG}}\right)}$$

 $K_E = Effektivvärdet$ för den hydrauliska konduktiviteten (stokastiskt kontinuum).

- K_{BG} = Geometriskt medelvärde för lognormalfördelningen som definierar bergblockens hydrauliska konduktivitet.
- $\sigma_{eLog KB}$ = Standardavvikelse (för eLog-värden) för lognormalfördelningen som definierar bergblockens hydrauliska konduktivitet.
- *X* = *Representativ skala för fältmätningar och för bergblocken i modellen (stokastiskt kontinuum).*

Kurvpassningsparametrar

 $P_1 = Kurvpassningparameter som representerar den skala där skillnaden mellan den ekvivalenta konduktiviteten och effektivvärdet kan anses vara försumbar.$

 $P_2 = Kurvpassningparameter.$

- $P_3 = Kurvpassningparameter.$
- $P_4 = Kurvpassningparameter.$

Kurvpassningsparametrar som definierar kurvorna A och B (se figurerna A-1 och A-2)

	P ₁	P ₂	P ₃	P_4	K _E
Kurva A och B	1 000	2,65	0,14	0,5	Definieras av den homogena modellens konduktivitet

Modellen inkluderar beräkningsceller av olika storlek. Den representativa skalan beräknas som sidan på en kub med samma volym.

 $X = \sqrt[3]{C_x C_y C_z}$

 $C_x = Cellens \ längd \ i \ x-riktning$

 $C_y = Cellens \ längd \ i \ y$ -riktning

 $C_z = Cellens \ längd \ i \ z$ -riktning



Figur A-1. Lokal heterogenitet. Skalberoende i konduktivitet. Geometriskt medelvärde (relativt) vid olika skalor.



Figur A-2. Lokal heterogenitet. Skalberoende i konduktivitet. Standardavvikelse (för 10Log-värden) vid olika skalor. Data från platsundersökningarna avser skalan 100 m.

Visualisering av salinitet för basfallet

I figurerna B-1 till och med B-7 visuliseras salinitetens fördelning i modelldomänen. Resultaten som presenteras är beräknade för basfallet: Fall 51si1. Modellens basnivå är definierad till –6 000 m ö h. Simuleringen inkluderar densitetsdrivet flöde. Initialvillkoret är *si1*. Resultaten avser den nuvarande flödessituationen (2000 AD).





Färgskala som representerar salinitet i procent (massfraktion).

Figur B-1. Salinitet i modellen för fall 51si1. Flödessituationen avser 2000 AD. Figurerna (1)–(6) presenterar olika sektioner av modellen i riktning väst-öst. Delfigur (7) visar hela modellen.



Figur B-2. Salinitet i modellen för fall 51si1. Flödessituationen avser 2000 AD. Figuren visar en sektion genom modellen på djupet 515 m, detta djup motsvarar förvarsdjup (L18).



Figur B-3. Salinitet i modellen för fall 51si1. Flödessituationen avser 2000 AD. Figuren visar en sektion genom modellen på djupet 875 m (L15).



Figur B-4. Salinitet i modellen för fall 51si1. Flödessituationen avser 2000 AD. Den tre dimensionella ytan ovan representerar fördelningen av saltvatten med koncentrationen 1,4 % (en iso-yta). Ytan är delvis en inverterad bild av topografin – höga nivåer under dalgångar och låga nivåer under höglänt topografi. Jämför med figur B-3.



Figur B-5. Salinitet i modellen för fall 51si1. Flödessituationen avser 2000 AD. Transparent vy genom modellen. En iso-yta med koncentrationen 1,4 % är också inlagd i figuren.



Figur B-6. Salinitet i modellen för fall 51si1. Flödessituationen avser 2000 AD. Den tre dimensionella ytan ovan representerar fördelningen av saltvatten med koncentrationen 4,1 % (en iso-yta). Ytan är delvis en inverterad bild av topografin – höga nivåer under dalgångar och låga nivåer under höglänt topografi. Jämför med figur B-3.



Figur B-7. Salinitet i modellen för fall 51si1. Flödessituationen avser 2000 AD. Transparent vy genom modellen. En iso-yta med koncentrationen 4,1 % är också inlagd i figuren.

Dispersion coefficient

The text presented below is an extract from the Geoan manual /Holmen 2010/.

The movement of the dissolved component (i.e. salt) is calculated by use of a transport equation, often called the advection-dispersion equation, see Section 3.2 and ekvation 3-3.

- Dissolved components will move with the flowing water, this process is called advection. Advection follows directly from the flow of water; it is given by the movement of water with respect to differences in elevation, pressure and density.
- Dissolved components will also move towards lower concentrations, this process is called molecular diffusion, which is described by Ficks 1st law.
- In addition, the dissolved components will spread out as they move through the flow medium due to hydro-mechanical effects; this process is called hydro-mechanical dispersion. The hydro-mechanical effects follow from several different processes: varying velocities inside the pores/fractures, varying velocities between different pores/fractures and varying velocities as the flow change direction in space and time, etc.

The dispersion (also called hydrodynamic dispersion or physical dispersion) is the sum of molecular diffusion and hydro-mechanical dispersion. Dispersion is described by a parameter called the dispersion coefficient tensor D.

 $D = D^H + D^*$

 $D = Dispersion \ coefficient \ [m^2/s]$

 D^{H} = Coefficient of hydro-mechanical dispersion [m^{2}/s]

 D^* = Coefficient of molecular diffusion [m^2/s]

The coefficient of hydro-mechanical dispersion is calculated based on a property called dispersivity or dispersion length (α) that together with the average velocity of the moving water describes the hydro-mechanical effects.

$$D^H = \alpha v$$

 $\alpha = Dispersivity [m]$

v = Average intrinsic water velocity [m/s]

The dispersivity (α) is scale dependent and very large values have been reported in the literature for large scales. Large values of the dispersivity reflect a heterogeneous flow medium.

It has been concluded based on field experiments that the dispersion has a maximum value in the direction of the flow and a minimum value at right angle to the flow; this can be described by a longitudinal dispersion coefficient and transverse dispersion coefficient. In Equation C-3 below, the index $_L$ denotes *longitudinal* and $_T$ denotes *transverse*. The index $_i$ in v_i denotes that it is the average velocity along the flow vector that is considered. Hence, it is the same value of groundwater velocity that is used when calculating both D_L^H and D_T^H , see /Bear and Verruijt 1987/ or /Fetter 1993/.

$$D_L^H = \alpha_L v_i$$

 $D_T^H = \alpha_T v_i$

R-10-43

 $D_{L}^{H} = Hydro-mechanical dispersion in longitudinal direction [m²/s]$

 D_T^H = Hydro-mechanical dispersion in transverse direction [m²/s]

 $\alpha_L = Longitudinal dispersivity [m]$

 $\alpha_T = Transverse \ dispersivity \ [m]$

 v_i = Average intrinsic water velocity along the flow vector [m/s]

Equation C-2

Equation C-1

Equation C-3

The longitudinal dispersivity (α_L) can be defined in relation to the transverse dispersivity (α_T), by use of a longitudinal dispersivity factor (F_L).

$$\alpha_L = F_L \alpha_T$$
 $F_L = \frac{\alpha_L}{\alpha_T}$ Equation C-4

The longitudinal dispersivity factor varies dependent on properties of the flow medium; and values between 5 and 20 are reported in the literature.

With the introduction of transverse and longitudinal dispersivities, the dispersion coefficient becomes a second order tensor in space, dependent on the groundwater velocity vector. Both the direction and the length of the velocity vector changes as the flow changes, consequently the dispersion coefficients need to be recalculated at each time step of the simulation.

A direction and velocity dependent formulation of the hydro-mechanical dispersion coefficient, based on the concept of a second order tensor, is presented below in Equation C-5, considering the three cardinal directions (x, y and z). A more detailed discussion of the dispersion coefficient and direction dependency is given in /Bear and Verruijt 1987/.

$$D_x^H = \alpha_T v_i + (F_L \alpha_T - \alpha_T) \frac{v_x^2}{v_i}$$

$$D_y^H = \alpha_T v_i + (F_L \alpha_T - \alpha_T) \frac{v_y^2}{v_i}$$

$$D_z^H = \alpha_T v_i + (F_L \alpha_T - \alpha_T) \frac{v_z^2}{v_i}$$

 D_x^H , D_y^H , D_z^H = Hydro-mechanical dispersion coefficients along cardinal directions [m²/s] α_T = Transverse dispersivity [m] v_i = Average velocity along the flow vector [m/s] v_x , v_y and v_z = Average intrinsic velocities values along the cardinal directions [m/s] F_L = Longitudinal dispersivity factor [-]

It is not uncommon that numerical groundwater flow models represent geological layers by use of computational cells that have a large horizontal extension, but a much smaller vertical extension. For such a situation it can be useful to introduce a reduction in dispersion in the vertical direction, by use of a reduction factor ($F_{vertical}$), the value of the vertical dispersion coefficient ($\alpha_{Tvertical}$) will be smaller than the corresponding horizontal value.

$$\alpha_{T vertical} = \alpha_T F_{vertical}$$

$$D_z^H = \alpha_T F_{vertical} v_i + (F_L \alpha_T F_{vertical} - \alpha_T F_{vertical}) \frac{v_z^2}{v_i}$$
Equation C-6

The hydrodynamic dispersion is the sum of molecular diffusion and hydro-mechanical dispersion. Hence, the hydrodynamic dispersion along the cardinal directions will be:

$$D_{x} = D_{x}^{H} + D^{*}$$

$$D_{y} = D_{y}^{H} + D^{*}$$
Equation C-7
$$D_{z} = D_{z}^{H} + D^{*}$$

 D_x , D_y , $D_z = Dispersion$ coefficients along cardinal directions $[m^2/s]$ D_x^H , D_y^H , $D_z^H = Hydro$ -mechanical dispersion coefficients along cardinal directions $[m^2/s]$ $D^* = Coefficient of molecular diffusion <math>[m^2/s]$

Equation C-5

...

The discussion above follows the classical approach on how to formulate the hydro mechanical dispersion coefficient (Equation C-5); the velocity values discussed above are the intrinsic average velocity and not the Darcy velocity (Darcy velocity is the same thing as the specific flow).

It should however be pointed out that when Equation C-5 is combined with the transport equation (ekvation 3-3), the calculated Dispersion values (as given by Equation C-5) need to be corrected for the effective porosity of the flow medium; because the transport equation considers a unit area at right angle to the flow, and the flow will only occur in the effective pores of the flow medium and not along the whole area. The effective dispersion is calculated as follows:

 $D_{effective} = D \eta$

Equation C-8

 $D_{effective} = Effective \ dispersion \ coefficient \ [m^2/s]$ $D = Dispersion \ coefficient \ [m^2/s]$ $\eta = Effective \ porosity \ of \ flow \ medium \ [-]$

Hence, the result of Equation C-5 (the hydromechanical dispersion) should be multiplied with the effective porosity, and this is the approach taken in the Geoan computer code. Note that with this approach the coefficient of molecular diffusion (D^*) should **not** be defined as an effective value. For the purpose of avoiding confusion, the above discussed correction for the effective porosity should be clearly and explicitly included in the transport equation. The mixing of the concepts of dispersion and effective dispersion has lead to some confusion in the literature.

The transport equation considers movement of mass due to both advection and dispersion. (See Section 3.2 and ekvation 3-3.)

Equations for the movement of mass can be written as follows:

$$M_{x} = \rho u_{x} \theta_{F} - \rho \eta D_{x} \frac{\partial \theta_{F}}{\partial x} ;$$

$$M_{y} = \rho u_{y} \theta_{F} - \rho \eta D_{y} \frac{\partial \theta_{F}}{\partial y} ;$$

$$M_{z} = \rho u_{z} \theta_{F} - \rho \eta D_{z} \frac{\partial \theta_{F}}{\partial z}$$

Equation C-9

 $M_x = Mass flow in x-direction (horizontal) [kg/s m²]$

 $M_y = Mass flow in y-direction (horizontal) [kg/s m²]$

 $M_z = Mass flow in z$ -direction (vertical) [kg/s m²]

 ρ = Density of water (with dissolved components) [kg/m³]

 η = *Effective porosity of flow medium* [–]

 u_x , u_y , $u_z = Darcy$ velocity of water in x, y and z directions [m/s]

 θ_F = Concentration factor (0=concentration without dissolved components) [-]

 D_x , D_y , D_z = Dispersion coefficients in x, y and z directions $[m^2/s]$

In the equations above the concentration of the dissolved component (e.g. salt) is defined as a dimensionless concentration – a concentration factor. The concentration factor is defined by Equation C-10 (below). The concentration factor for fresh water is equal to zero. If the mass concentration [kg/m³] of the dissolved component (i.e. salt) is larger than zero, the concentration factor will also be larger than zero.

$$\theta_F = \frac{\theta}{W_{Fresh}}$$
 Equation C-10

 $\theta_F = Concentration factor [-]$ $\theta = Mass concentration [kg/m³]$ $W_{Fresh} = Weight of 1 m³ of water without dissolved component [kg/m³]$ The first term of the motion equations (Equation C-9) represents mass flow due to advection:

 $\rho u_x \theta_F$

The second term of the motion equations (Equation C-9) represents mass flow due to dispersion:

 $\rho\eta D_x \frac{\partial \theta_F}{\partial x}$

In connection to the above discussion of physical dispersion, we should also mention the concept of numerical dispersion. It is a disturbing, and in most models unavoidable, phenomenon that will appear in a numerical model in which the transport equation is solved by use of a computational grid.

The actual total dispersion that will take place in a model consists of the original physical dispersion, discussed above, and a numerical dispersion which depends on the size of the cells of the computational grid, the length of the time step and of the numerical method used for approximating (representing) the fundamental differential equations. In a large three dimensional model, the numerical dispersion will vary inside the model; but the spreading of a dissolved component due to numerical dispersion is often comparable to the length of the cell in which the dissolved component occur, or half of the length of the cell. It follows that for most flow simulations it is not useful to set the dispersivity to a value smaller than half of the length of the cells.

For a large three dimensional model the only way to suppress numerical dispersion is to use a computational grid in which the lengths of the cells are small compared to the dispersivity. (This is also discussed in /Bear and Verruijt 1987/.)

Densitetsdrivet flöde och flödesvägar i vertikala sektioner

D1 Inledning och syfte

Simuleringar av densitetsdrivet flöde i vertikala sektioner har utförts som en del av denna studie. Syftet är att demonstrera grundvattnets flödesmönster vid gränsskiktet mellan sött och salt grundvatten, och att demonstrera exempel på det teoretiska flödesmönstret för saltvattnet vid stationära förhållanden.

Tre beräkningsfall presenteras:

- Fall T1. En lokal 2-dim modell med homogena egenskaper, simuleringen representerar stationära förhållanden.
- Fall T2. En lokal 2-dim modell med heterogena egenskaper, simuleringen representerar stationära förhållanden.
- Fall T3. En förenklad regional modell med heterogena egenskaper, simuleringen representerar både transienta och stationära förhållanden.

D2 Partikelspårning och flödesvägar

De beräknade flödesfälten analyserades med hjälp av partikelspårning, på samma sätt som beskrivits i huvudtexten. En partikel representerar flödesvägen från ett visst givet område i modellen (en startpunkt). Grundvattenflödets storlek varierar från startpunkt till startpunkt och därmed för de olika partiklarna. Flödesvägarna som skapats i flödesmodellen representerar endast advektiv transport. Dispersiv avvikelse från den advektiva flödesvägen har inte inkluderats när flödesvägarna genererades. Ett diffusivt utbytet mellan flödande vätska och stagnant vätska har inte heller simulerats när flödesvägarna beräknats. (Numerisk dispersion är inte inkluderad i de skapade flödesvägarna, eftersom flödesvägarna beräknates genom partikelspårning och inte genom att direkt lösa advektions-dispersionsekvationen.) Flödesvägarna. Partiklarna rör sig alltså i ett flödesfält som ej förändras med tiden.

D3 Fall T1 och T2

Fall T1 och T2 är 2-dim modeller, i lokal skala, längd och höjd är 900 m. Randvillkoren liknar de som används för den storregionala modellen; randvillkoren presenteras i figur D-1. Grundvattenpotentialen är definierad längs med modellens topografi så att ett grundvattenflöde skapas i modellen, från vänster till höger. Modellegenskaper framgår av tabell D-1, dessa egenskaper är delvis desamma som för den storregionala modellen. Simuleringarna representerar stationära förhållanden.

Parameter	Värde	
Längd	900 m (vertikal sektion)	
Höjd	900 m (vertikal sektion)	
Skillnad i potential längs med modellens topografi, linjärt minskande	Potentialskillnad = 10 m	
från vänster till höger.	Från 310 m ö h (vänster) till 300 m ö h (höger)	
Effektiv porositet	0,001	
Genomsläpplighet	Djupberoende, se ekvation D-1	
(hydraulisk konduktivitet för sötvatten)	Fall T1 = Homogen	
	Fall T2 = Heterogen	
Viskositet (dynamisk)	1,334E–4 Pa s	
Densitet utan salt (sötvatten)	1 000 kg/m³	
Specificerad konstant saltkoncentration längs med modellens bas	100 kg/m ³	
Longitudinell dispersionslängd	20 m	
Transversell dispersionslängd	5 m	
Molekylär diffusivitet	1,5E–9 m²/s	

Tabell D-1. Fall T1 och T2. Modellegenskaper.





Ekvation D-1



Icke genomsläpplig

Specificerad grundvattenpotential längs med topografin. Linjärt avtagande potential från vänster till höger.

Inströmmande vatten: Specificerad koncentration = Noll. Utströmmande vatten: Koncentrationen beräknas av modellen.

Figur D-1. Fall T1 och T2. Randvillkor: Flödesrandvillkor (blå) och koncentrationsrandvillkor (röd).

Fall T1 och T2 är 2-dim vertikala sektioner.

Genomsläppligheten är definierad som djupberoende, på samma sätt som i den storregionala modellen. Bergmassan har samma egenskaper som den Litologiska enheten No. 756 (Granit, Granodiorit, etc), se nedan.

 $d > 67 m \rightarrow K = C d^L$

 $d < = 67 m \rightarrow K = K_m$

d = Djup

K = Bergets konduktivitet

 $K_m = Bergets$ konduktivitet, representativt värde från brunnsarkivet

C = En koefficient som väljs på ett sådant sätt att K vid djupet 67 m = K_m

L = -2,0205 (trend för djupavtagandet)

Berget i fall T1 är definierat som homogent, berget i fall T2 är definierat som heterogent. Den lokala (småskaliga) heterogeniteten i fall T2 baseras på en stokastiskt-kontinuum beskrivning, i enlighet med den metod som presenteras i Appendix A. Konduktivitetsvärdena för fall T1 och T2 framgår av figur D-2.



Figur D-2. Fall T1 och T2: Bergets hydraulisk konduktivitet för sötvatten mot djupet. De djupberoende K-värdena för fall T1 framgår av den blå linjen. De djupberoende och heterogena K-värdena för fall T2 framgår av de skära punkterna (exempel på 300 slumpmässigt valda värden från den upprättade modellen).

Resultat för stationära förhållanden, med och utan densitetseffekter, framgår av figurerna D-3 (fall T1) och D-4 (fall T2). Flödesvägar initierades längs med modellens topografi (blå linjer), flödesvägar initierades även på ett djup av 500 m i den vänstra delen av modellen (gröna linjer).

Av resultaten för beräkningsfallet utan densitetseffekter (figur i) framgår att det bara finns en flödescell i modellen (A). Flödescell A är en sötvattenflödescell; vattnet strömmar in i modellen längs med modellens övre vänstra del och lämnar modellen längs med modellens övre högra del. Vissa flödesvägar som initieras på förvarsdjup i modellens vänstra del når hela vägen ner till modellens bas

Av resultaten för beräkningsfallet med densitetseffekter (figur **ii**) framgår att det finns två flödesceller i modellen (A och B). Flödescell A, är främst en sötvattenflödescell. Vattnet strömmar in i modellen längs med modellens övre vänstra del och lämnar modellen längs med modellens övre högra del. Flödescell B är en sluten virvel i domänen med saltvatten. Inga flödesvägar från förvarsdjup (500 m) når ner till botten av modellen. Saltvattnet med koncentrationer över cirka 10 kg/m³, och flödes-cell B, fungerar som en gräns, som förhindrar advektiva flödesvägar från sötvattendomänen att nå ner till modellens bas.

Den slutna flödescellen B i saltvattnet uppkommer och drivs huvudsakligen av följande processer:

- Densitetsskillnaden mellan det tunga saltvattnet och det lättare sötvattnet, som får det tunga saltvattnet att pressa undan sötvattnet.
- Lateral dispersion längs med gränsskiktet mellan sötvatten och saltvatten, som transporterar salt från saltvattendomänen till sötvattendomänen.
- Sötvattnets rörelse i flödescell A, från inströmningsområde till utströmningsområde, som plockar upp salt längs med gränsskiktet och transporterar saltet ut ur modellen.
- God tillgång på salt längs med modellens bas så att koncentrations och densitetsskillnaderna kan upprätthållas mellan söt- och saltvattendomänerna.



(**i**) Stationär situation.

Inga densitetseffekter.

Det finns bara en flödescell i modellen. Flödescell A är främst en sötvattenflödescell. Vattnet strömmar in i modellen längs med modellens övre vänstra del och lämnar modellen längs med modellens övre högra del.

Vissa flödesvägar som initieras på förvarsdjup i modellens vänstra del når hela vägen ner till modellens bas.

(**ii**) Stationär situation.

Med densitetseffekter.

Koncentrationen är specificerad till 100 kg/m³ längs med modellens bas.

Det finns två flödesceller i modellen, A och B. Flödescell A är främst en sötvattenflödescell. Vattnet strömmar in i modellen längs med modellens övre vänstra del och lämnar modellen längs med modellens övre högra del. Flödescell B är en sluten virvel i domänen med tungt saltvatten. Inga flödesvägar från förvarsdjup (500 m) kommer att nå ner till botten av modellen. Saltvattnet med koncentrationer över ca 10 kg/m³ fungerar som en gräns, som förhindrar advektiva flödesvägar från sötvattendomänen att nå ner till modellens bas.

Figur D-3. Fall T1 Stationära simuleringar utan (i) och med (ii) densitetseffekter. Flödesvägar initierades längs med modellens topografi (blå linjer), flödesvägar initierades även på ett djup av 500 m i den vänstra delen av modellen (gröna linjer). Pilar betecknar grundvattnets flödesriktning. De ljusblå linjerna representerar grundvattenpotential i meter sötvattenpelare. Röda nyanser representerar saltkoncentrationen i domänen med saltvatten. Berget i fall T1 är definierat som homogent.



(i) Stationär situation.

Inga densitetseffekter.

Det finns bara en flödescell i modellen. Flödescell A är främst en sötvattenflödescell. Vattnet strömmar in i modellen längs med modellens övre vänstra del och lämnar modellen längs med modellens övre högra del.

Vissa flödesvägar som initieras på förvarsdjup i modellens vänstra del når hela vägen ner till modellens bas. Det undulerande flödesmönstret följer av bergets småskaliga heterogenitet.

(**ii**) Stationär situation.

Med densitetseffekter.

Koncentrationen är specificerad till 100 kg/m³ längs med modellens bas.

Det finns två flödesceller i modellen, A och B. Flödescell A är främst en sötvattenflödescell. Vattnet strömmar in i modellen längs med modellens övre vänstra del och lämnar modellen längs med modellens övre högra del. Flödescell B är en sluten virvel i domänen med tungt saltvatten. Inga flödesvägar från förvarsdjup (500 m) kommer att nå ner till botten av modellen. Saltvattnet med koncentrationer över ca 10 kg/m³ fungerar som en gräns, som förhindrar advektiva flödesvägar från sötvattendomänen att nå ner till modellens bas. Det undulerande flödesmönstret följer av bergets småskaliga heterogenitet.

Figur D-4. Fall T2 Stationära simuleringar utan (i) och med (ii) densitetseffekter. Flödesvägar initierades längs med modellens topografi (blå linjer), flödesvägar initierades även på ett djup av 500 m i den vänstra delen av modellen (gröna linjer). Pilar betecknar grundvattnets flödesriktning. De ljusblå linjerna representerar grundvattenpotential i meter sötvattenpelare. Röda nyanser representerar saltkoncentrationen i domänen med saltvatten. Berget i fall T2 är definierat som heterogent.

Resultaten för fall T1 och T2 är mycket lika varandra; skillnaderna mellan fall T1 och T2 beror på den småskaliga heterogeniteten i fall T2. I fall T2 erhålls ett heterogent flödesmönster i den mindre skalan pga av bergets småskaliga heterogenitet. Flödesmönstret i en större skala är dock detsamma i fall T1 och fall T2

Av figurerna framgår det tydligt att för det studerade fallet fungerar saltvattnet som en effektiv barriär för flödesvägar från förvarsdjup, saltvattnet förhindrar advektiva flödesvägar från sötvattendomänen att nå ner till modellens bas.

D4 Fall T3

Fall T3 är en 3-dim modell, i regional skala, modellen representerar en vertikal sektion med en viss utsträckning i alla tre dimensionerna. Modellen har en längd utmed x-axeln lika med 10 km och en längd utmed y-axeln lika med 2 km, modellens sträcker sig vertikalt ned till nivån –6 km; modellens form framgåt av figur D-5.

Randvillkoren liknar de som används för den storregionala modellen; randvillkoren presenteras i figur D-6. Grundvattenpotentialen är definierad längs med modellens topografi så att ett grundvattenflöde skapas i modellen, från vänster till höger. Modellegenskaper framgår av tabell D-2, dessa egenskaper är delvis desamma som för den storregionala modellen.

Beräkningscellernas horisontala storlek är lika med 100 m. Beräkningsnätets vertikala indelning i olika lager är densamma som för den storregionala modellen. Nära markytan är cellernas vertikala storlek mycket liten, på stort djup i modellen är cellerna stora. Totalt innehåller modellen 28 lager. Lager 18 motsvarar förvarsdjup (500 m).

Genomsläppligheten är definierad som djupberoende, på samma sätt som i den storregionala modellen och som för fall T1 och T2. Bergmassan har samma egenskaper som den Litologiska enheten No. 756 (Granit, Granodiorit, etc), se ekvation D-1.



Figur D-5. Fall T3 är en 3-dim modeller, i regional skala, modellen representerar en vertikal sektion med en viss utsträckning i alla tre dimensionerna. Modellens form framgåt av figuren ovan. Lager 18 motsvarar förvarsdjup (500 m).



Figur D-6. Fall T3. Randvillkor: Flödesrandvillkor (blå) och koncentrationsrandvillkor (röd).

Parameter	Värde	
Längd, bredd och höjd (km).	10·2·6,1	
Skillnad i potential längs med modellens topografi, linjärt minskande	Potentialskillnad = 100 m	
från vänster till höger.	Från 200 m ö h (vänster) till 100 m ö h (höger)	
Effektiv porositet	0,001	
Genomsläpplighet (hydraulisk konduktivitet för sötvatten)	Djupberoende, se ekvation D-1	
Viskositet (dynamisk)	1,334E–4 Pa s	
Densitet utan salt (sötvatten)	1 000 kg/m ³	
Specificerad konstant saltkoncentration längs med modellens bas	15 % , vilket är lika med 150 kg/m ^{3.}	
Longitudinell dispersionslängd	50–100 m beroende på cellstorlek	
Transversell dispersionslängd	25–50 m beroende på cellstorlek	
Molekylär diffusivitet	1,5E–9 m²/s	

Tabell D-2	. Fall T3	Modelleg	enskaper.
------------	-----------	----------	-----------

Berget i fall T3 är definierat som heterogent. Den lokala heterogeniteten i fall T3 baseras på en stokastiskt-kontinuum beskrivning, i enlighet med den metod som presenteras i Appendix A. Konduktivitetsvärdena för fall T3 framgår av figur D-7.

Modellens initialsituation baseras på initial villkor *si1* som har diskuterats i huvudtexten. Saltvattnets fördelning i modellen vid den initiala situationen framgår av figur D-8. En saltkoncentration av 15 % (vilket är samma sak som 150 kg/m³) definierades längs med modellens bas, på nivån –6 km.

En första simulering utfördes för stationära förhållanden, och utan att saltvatten och densitetsberoende flöden inkluderades i simuleringen. Flödesvägar initierades överallt i modellen på djupet 500 m, vilket motsvarar förvarsdjup; de resulterande flödesvägarna framgår av figur D-9. Av resultaten för detta beräkningsfall, utan densitetseffekter, framgår att vissa flödesvägar som initieras på förvarsdjup i modellens vänstra del når hela vägen ner till modellens bas.



Figur D-7. Fall T3: Bergets hydraulisk konduktivitet (sötvatten) mot djupet. De djupberoende och heterogena K-värdena för fall T3 framgår av de skära punkterna (exempel på 300 slumpmässigt valda värden från den upprättade modellen). Den blå linjen visar det djupberoendet som det beräknats av ekvation D-1.



Figur D-8. Fall T3. Initial fördelning av saltvattnet i modellen. Denna fördelning baseras på initialvillkor sil som diskuteras i huvudtexten.



Figur D-9. Fall T3 Stationär simulering utan saltvatten och densitetseffekter. Flödesvägar initierades överallt i modellen på djupet 500 m (gröna linjer). Det mörkgröna strecket i figur **ii** markerar det lager från vilket flödesvägarnas initierades. Pilarna i figur **ii** betecknar grundvattnets flödesriktning.

Fall 3 simulerades dessutom med saltvatten och densitetseffekter, som en transient simulering. Tidsskalan för simuleringen av fall T3 är inte densamma som för den storregionala modellen, detta beror på att fall T3 inte är identisk med den storregionala modellen.

Vi har definierat en relativ tidsskala. Den relativa tidsskalan baseras på studerade systemets tillstånd enligt det följande.

- Situation 0: Initial tillstånd.
- Situation 1: Transient tillstånd med tydlig obalans i saltvattendomänen.
- Situation 2: Transient tillstånd, med en nära fullständig advektiv flödesseparation mellan sötvatten och saltvatten domänerna.
- Situation 3: Första tidpunkt med en fullständig advektiv flödesseparation mellan sötvatten och saltvatten domänerna.
- Situation 4: God uppskattning av ett stationärt tillstånd, avseende större delen av modellen, inkluderande både saltvattendomänen och sötvattendomänen.

Flödesvägar initierades överallt i modellen på djupet 500 m (förvarsdjup), vid ett stort antal olika tidpunkter. Resultat från dessa simuleringar presenteras i figurerna D-10 till D-13. Flödesvägarna startas i en viss flödessituation, denna flödessituation hålls konstant under simuleringen av flödesvägarna. Partiklarna som skapar flödesvägarna rör sig alltså i ett flödesfält som ej förändras med tiden, man kan säga att det är stationära flödesvägar i ett transient flödesfält. En svaghet med denna metod är att flödessituationen vid de studerade tidpunkterna inte är ett stationärt tillstånd, den studerade flödessituationen är under förändring. Detta är både ett konceptuellt och ett numeriskt problem, som diskuteras i huvudtexten, och som diskuteras ytterligare nedan.

Analyser av flödesvägarna för olika tidpunkter visar på att de ovan beskrivna tillstånden inträffar vid följande relativa tidpunkter; initialtillståndet definieras som t=0 och det stationära tillståndet som t=1,0.

- Situation 0: t=0 se figur D-8
- Situation 1: t=0,01 se figur D-10
- Situation 2: t=0,05 se figur D-11
- Situation 3: t=0,09 se figur D-12
- Situation 4: t=1,0 se figurerna D-13 och D-14.

Notera den stora tidsskillnaden mellan Situation 3 och 4, ungefärligen en faktor 10. Att nå fram till en stationär situation tar mycket lång tid i jämförelse med den tid det tar att nå fram till en tydlig advektiv flödesseparation mellan sötvatten och saltvatten domänerna.

Flödesvägarna i figurerna D-10 till D-13 presenteras med två olika färger, ljusblå och mörkblå. De ljusblå flödesvägarna avslutades efter en advektiv transporttid som motsvarar tiden för den studerade flödessituationen. De mörkblå flödesvägarna avslutades då de når fram till ett utströmningsområde eller då de blir numeriskt obestämda.

Situation 1 (figur D-10) demonstrerar tydligt det konceptuella problemet med att använda stationära flödesvägar i en transient flödesfält. Många av de mörkblå flödesvägarna i figur D-10 fortsätter ned mot modellens nedre högra hörn där de blir numeriskt obestämda. Dessa djupa flödesvägars utbredning är inte konceptuellt korrekt, de är en funktion av den tillämpade metodiken med stationära flödesvägar i ett transient flödesfält. Flödesfältet i Situation 1 är långt från ett stationärt tillstånd, och de advektiva transporttiderna för de djupa flödesvägarna är mycket stora. Om flödesvägarna hade tillåtits att förändras allteftersom flödesfältet förändras, hade inga djupa flödesvägar (från förvarsdjup) uppkommit i modellen, eftersom flödesfältet hade förändrats och böjt av dessa flödesvägar innan dessa flödesvägar har nått särskilt djupt ner i saltvattnet.

Situation 2 (figur D-11) demonstrerar att då flödessituationen är nära en fullständig advektiv flödesseparation mellan sötvatten och saltvatten domänerna kan det förekomma enstaka stationära flödesvägar som går djupt ner i saltvattnet. Dessa djupa flödesvägar är dock inte konceptuellt korrekta, principiellt är situationen för dessa flödesvägar densamma som i Situation 1. Om flödesvägarna hade tillåtits att förändras allteftersom flödesfältet förändras, hade inga djupa flödesvägar (från förvarsdjup) uppkommit i modellen, eftersom flödesfältet hade förändrats och böjt av dessa flödesvägar innan dessa flödesvägar har nått särskilt djupt ner i saltvattnet.

Situation 3 (figur D-12) demonstrerar flödesvägar för den första tidpunkten med en fullständig advektiv flödesseparation mellan sötvatten och saltvatten domänerna. Av figuren framgår det att inga flödesvägar från förvarsdjup når djupt ner i det tunga saltvattnet.

Situation 4 (figurerna D-13 och D-14) demonstrerar flödesvägar för en god uppskattning av ett stationärt tillstånd, avseende större delen av modellen, inkluderande både saltvattendomänen och sötvattendomänen. Av figurerna framgår det att det inga flödesvägar från förvarsdjup når djupt ner i det tunga saltvattnet. Skillnaderna mellan Situation 3 och 4 är främst fördelningen av saltvattenkoncentrationer i modellens högra del.

Med transienta flödesvägar menas tidsberoende flödesvägar som förändras allteftersom flödesfältet förändras. Det ansågs ligga utanför denna studies omfattning att simulera transienta flödesvägar i ett transient flödesfält; dock kan en god uppskattning av hur sådana flödesvägar ser ut erhållas genom att jämföra de ljusblå linjerna i figurerna D-10 till D-13. De ljusblå linjerna ger en god illustration av hur transienta flödesvägar, som initieras vid tidpunkten t=0, utbreder sig genom modellen med tiden. Som framgår av de ljusblå linjerna kommer inga transienta flödesvägar från förvarsdjup att nå djupt ner i det tunga saltvattnet. Genombrottstiderna för de djupaste av de ljusblå flödesvägarna är ändock mycket stora.

Det ska avslutningsvis påpekas ett de modeller som presenteras i detta appendix är mycket förenklade och begränsade modeller i jämförelse med den storregionala modellen. Slutsatser som ges i detta appendix bör därför inte direkt överföras på den storregionala skalan. Dock kan man notera att saltvattnet i den storregionala modellen inte befinner sig i ett stationärt tillstånd och hur detta påverkar de beräknade flödesvägar som når djupt ned i saltvattnet är mycket svårt att uttala sig om. En rimlig generell slutsats för den storregionala modellen är dock att flödesvägar som når djupt ner i saltvattnet bör betraktas som mycket osäkra.



Figur D-10. Fall T3, Situation 1. Tidpunkt t = 0,01. Ljusblå och mörkblå linjer representerar stationära flödesvägar initierade på förvarsdjup i det transienta flödesfältet. De ljusblå flödesvägarna avslutades efter en advektiv transporttid som motsvarar t=0,01. De mörkblå flödesvägarna avslutades då de når fram till ett utströmningsområde eller då de blir numeriskt obestämda. Det mörkgröna strecket markerar det lager från vilket flödesvägarnas initierades De röda nyanserna representerar koncentrationen av salt.



Figur D-11. Fall T3, Situation 2. Tidpunkt t = 0,05. Ljusblå och mörkblå linjer representerar stationära flödesvägar initierade på förvarsdjup i det transienta flödesfältet. De ljusblå flödesvägarna avslutades efter en advektiv transporttid som motsvarar t=0,05. De mörkblå flödesvägarna avslutades då de når fram till ett utströmningsområde eller då de blir numeriskt obestämda. Det mörkgröna strecket markerar det lager från vilket flödesvägarnas initierades De röda nyanserna representerar koncentrationen av salt.



Figur D-12. Fall T3, Situation 3. Tidpunkt t = 0,09. Ljusblå och mörkblå linjer representerar stationära flödesvägar initierade på förvarsdjup i det transienta flödesfältet. De ljusblå flödesvägarna avslutades efter en advektiv transporttid som motsvarar t=0,09. De mörkblå flödesvägarna avslutades då de når fram till ett utströmningsområde eller då de blir numeriskt obestämda. Det mörkgröna strecket markerar det lager från vilket flödesvägarnas initierades De röda nyanserna representerar koncentrationen av salt.



Figur D-13. Fall T3, Situation 4. Tidpunkt t=1,0. Ljusblå och mörkblå linjer representerar stationära flödesvägar initierade på förvarsdjup i ett stationärt flödesfält. De ljusblå flödesvägarna avslutades efter en advektiv transporttid som motsvarar t=1,0. De mörkblå flödesvägarna avslutades då de når fram till ett utströmningsområde eller då de blir numeriskt obestämda. Det mörkgröna strecket markerar det lager från vilket flödesvägarnas initierades De röda nyanserna representerar koncentrationen av salt.



Figur D-14. Fall T3, Situation 4. Tidpunkt t=1,0. Perspektiv vy. Stationära flödesvägar initierade på förvarsdjup i ett stationärt flödesfält. Isoyter som representerar olika koncentrationer av salt.