



Handläggare

Ebba Svahnström

Tel +46 (0)10 505 41 91

Mobil +46 (0)72 206 93 72

Fax +46 (0)10 505 00 10

ebba.svahnstrom@afconsult.com

RAPPORT

Datum

2011-06-29

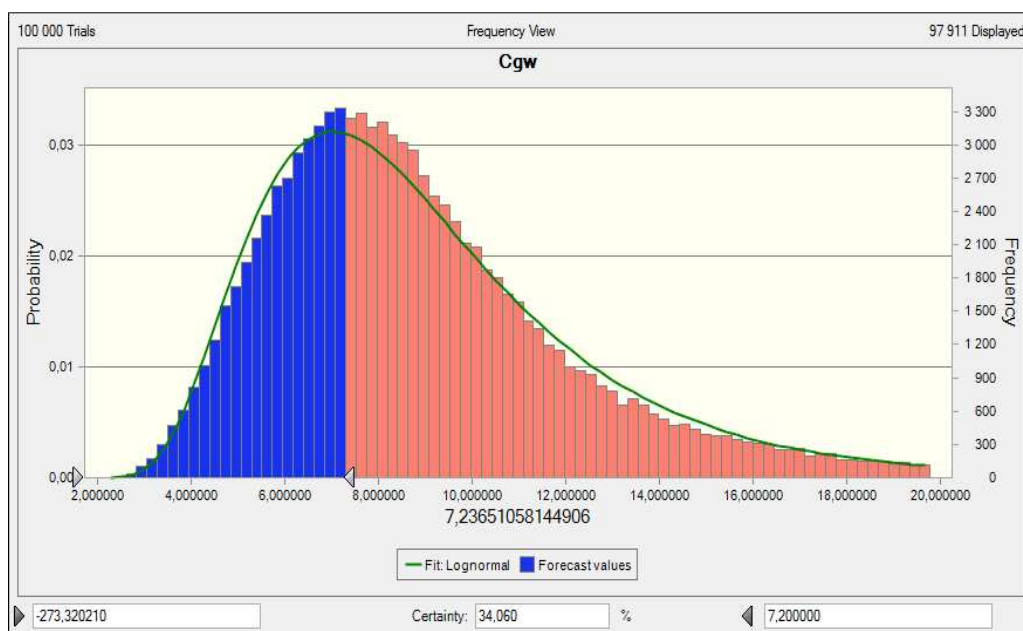
Uppdragsnr

401470

1 (31)

## ÅForsk

### Utvärdering av osäkerhet och variabilitet vid beräkning av riktvärden för förorenad mark



ÅF-Infrastructure AB  
Miljö, hälsa, säkerhet

Granskad

Ebba Svahnström

Johan Alm



## Innehåll

1	INLEDNING	4
1.1	Bakgrund och syfte	4
2	MATERIAL OCH METODER	6
2.1	Naturvårdsverkets riktvärdesmodell	6
2.1.1	Skydd av grundvatten	7
2.1.2	Intag av dricksvatten	11
2.2	Probabilistisk riskbedömning med Monte Carlo simulering	12
2.3	Känslighetsanalys	13
2.4	Variabilitet och osäkerhet	13
3	GENOMFÖRANDE	14
3.1	Modelluppbyggnad	14
3.2	Upplägg	15
3.3	Monte Carlo simulering - val av sannolikhetsfördelningar	15
3.4	I studien ingående ämnen	17
4	RESULTAT	18
4.1	Stabilitet	18
4.2	Skydd av grundvatten	18
4.3	Intag av dricksvatten	23
5	DISKUSSION OCH SLUTSATS	28
6	REFERENSER	31



## Sammanfattning

Naturvårdsverkets generella riktvärden används som ett verktyg vid riskbedömning av förorenade områden. Riktvärdena är framtagna ur en matematisk modell där olika exponerings- och spridningsvägar för förorening inkluderas och sammanvägs. Beräkningarna utförs deterministiskt, det vill säga varje variabel tilldelas ett värde. Då ingående modellvariabler ofta är osäkra till exempel på grund av osäkerhet i data eller på grund av variabilitet använder Naturvårdsverket så kallade konservativa antaganden som i vissa fall leder till en överskattning av risken. Genom att tilldela varje variabel en sannolikhetsfördelning och använda ett probabilistiskt tillvägagångssätt vid beräkningarna erhålls ett riktvärde med en sannolikhetsfördelning och därmed ett mått på osäkerheten i riktvärdet. Detta ger beslutsfattare en möjlighet att bedöma skäligen risknivå vid respektive förorenat objekt och minimera mängden massor som måste efterbehandlas.

I föreliggande studie har ett probabilistiskt tillvägagångssätt använts i Naturvårdsverkets riktvärdesmodell och delmodellerna för ”skydd av grundvatten” och ”intag av dricksvatten”. Nya riktvärden (för känslig markanvändning) med sannolikhetsfördelningar har beräknats. De ämnen som använts är antimon, trikloreten och MTBE. En känslighetsanalys med ”Spearman Rank Correlation” har utförts för att studera bidraget av osäkerhet från varje parameter till slutresultatet. Vidare har en tvådimensionell simulering utförts där osäkerhet och variabilitet skiljts åt. Programvaran som använts är Crystal Ball<sup>®</sup> som är ett tillägsprogram till MS Excel.

Resultaten från beräkningarna visar att Naturvårdsverkets deterministiskt beräknade riktvärden är konservativa vid jämförelse med 90 % percentilen. Osäkerheten och variabiliteten i för ingångsparametrar valda sannolikhetsfördelningar är stor och detta visas även i de tvådimensionella simuleringar som utförts. Känslighetsanalysen visar att flera faktorer har stor inverkan på riktvärdet, bland annat den hydrauliska konduktiviteten, den hydrauliska gradienten och fördelningskoefficienten mellan jord och vatten, torrdensiteten i jord samt jordens luft- och vattenhalt.

Eventuellt skulle det probabilistiska angreppssättet kunna implementeras direkt i Naturvårdsverkets riktvärdesmodell och ge användaren en valmöjlighet att även erhålla beräknade riktvärdens sannolikhetsfördelning. Det skulle vidare kunna användas vid t.ex. belastningsberäkningar, där föroreningsbelastning från ett förorenat område till ett närbeläget vattendrag beräknas med Naturvårdsverkets riktvärdesmodell.



# 1 Inledning

## 1.1 Bakgrund och syfte

Naturvårdsverket har gett ut en metodik för beräkning av riktvärden för förorenad mark. Riktvärdena används som ett av flera verktyg vid riskbedömning av förorenade områden. Riktvärdena motsvarar halter i jorden under vilka risken för negativa effekter på människors hälsa, på miljön och på våra naturresurser är acceptabel. Överskridande av riktvärdena medför dock inte automatiskt någon risk.

De generella riktvärdena har utvecklats i syfte att användas på platser där omgivningsförhållandena är ”typiskt” svenska. Det finns två typer av generella riktvärden, dels för känslig markanvändning som bör användas på platser där det föreligger stor risk för exponering av förorening och dels för mindre känslig markanvändning som används där det föreligger mindre risk för exponering. I de fall där omgivningsförhållandena skiljer sig från de typiska, eller i de fall där ekosystemet på platsen är särskilt känsligt, kan platsspecifika riktvärden tas fram.

I Naturvårdsverkets riktvärdesmodell utförs beräkningar deterministiskt, det vill säga varje parameter tilldelas ett värde. Då parametervärdena kan variera, till exempel beroende på omgivningsförhållandena, på aktuella exponeringsvägar och grupper som utsätts för exponering av förorening, finns en osäkerhet i dessa parametervärden. Osäkerheter finns i uppmätta data (till exempel på grund av mätfel). Dessutom finns en variabilitet i data vilket innebär att värdet varierar med t.ex. olika platser eller exponeringsgrupper (på olika platser varierar t.ex. den hydrauliska konduktiviteten och mellan individer skiljer intaget av dricksvatten). För att inkludera dessa osäkerheter i modellen har Naturvårdsverket använt så kallade konservativa antaganden. Dessa går ut på att parametervärden väljs på ett sätt så att exponeringen (risken) överskattas (risk definieras som sannolikheten att en skada uppstår). Genom att anta värsta möjliga omständigheter anses det säkert att risken i verkligheten är mindre. Detta kan dock leda till en ”falsk säkerhet” vilket innebär att risken ibland är större, trots att konservativa antaganden gjorts (Hållbar sanering, 2006). Till ovan nämnda osäkerheter tillkommer osäkerheten i modellens uppbyggnad.

I början av 1990-talet uppmärksammades bristerna i det deterministiska tillvägagångssättet vid beräkning av riktvärden och det hade redan tidigare upptäckts hur de traditionella metoderna kunde leda till orealistiska riskuppskattningar. Resultaten gav inte heller beslutsfattare någon vägledning om ytterligare undersökningar skulle kunna tillföra mer information för att förbättra resultaten. (Hållbar sanering, 2006)



Vid deterministiska beräkningar med konservativa antaganden är det svårt att avgöra om och hur mycket risken överskattas. Genom att istället använda statistik och probabilistiska beräkningar kan osäkerheten i beräknat riktvärde kvantifieras. Beräkningarna går ut på att en eller flera ingångsparametrar tilldelas ett värde och en sannolikhetsfördelning (ett område med värden som är mer eller mindre sannolika för denna parameter). Ett stort antal beräkningar utförs sedan där parametervärdena slumpas fram inom sannolikhetsfördelningen. Resultatet från det stora antalet beräkningar plottas i en sannolikhetsfördelning för det beräknade riktvärdet. Detta tillvägagångssätt kallas Monte Carlo simulering.

I Sverige har probabilistiska metoder använts inom kärnkraftssektorn i många år, medan de är relativt nya på området förorenad mark. Internationellt är förorenad mark ett vanligt tillämpningsområde och i USA har erfarenheterna varit goda (Hållbar sanering, 2006). Flera studier har utförts i Sverige av Tomas Öberg inom kunskapsprogrammet Hållbar sanering.

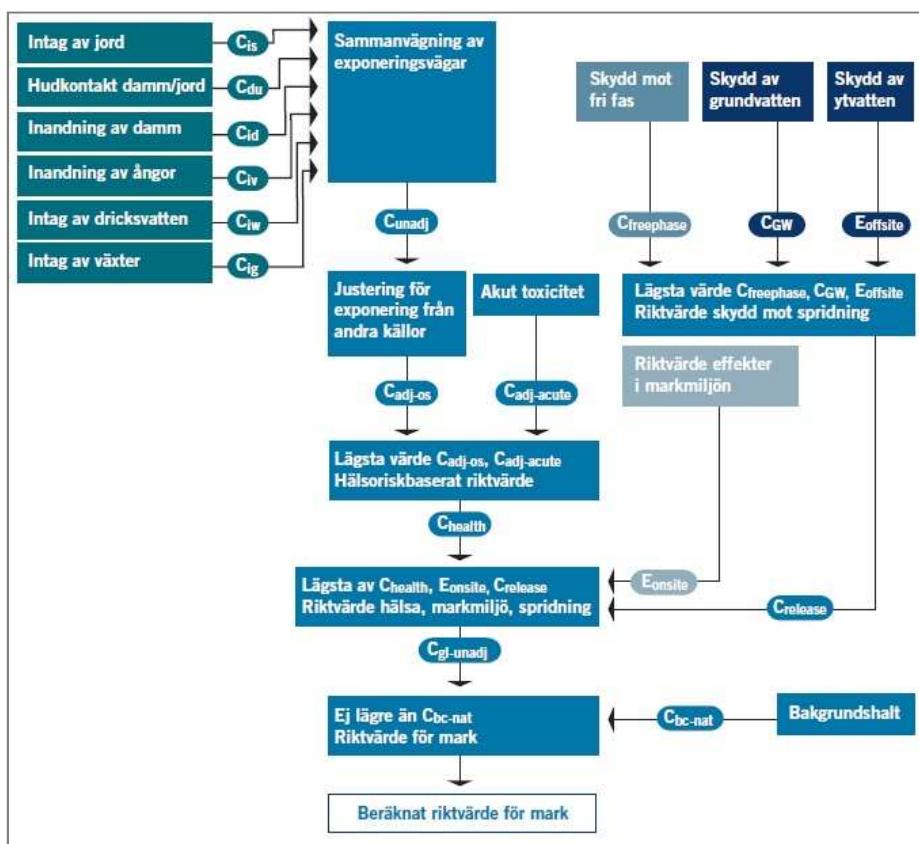
Syftet med denna studie är att (i) utvärdera effekten av osäkerhet och variabilitet hos modellparametrar vid beräkning av riktvärden för förorenad mark med Naturvårdsverkets modell samt att (ii) utvärdera potentiella praktiska konsekvenser av att negligera osäkerhet och variabilitet vid beräkning av platsspecifika riktvärden. Studien begränsas till delmodellerna ”skydd av grundvatten” och ”intag av dricksvatten”.

Resultaten från studien förväntas kunna tillämpas vid användning av Naturvårdsverkets riktvärdesmodell för förorenad mark. Förbättrad kunskap om osäkerhet och variabilitet vid beräkning av platsspecifika riktvärden leder till bättre riskbedömningar och därmed till ett mer effektivt utnyttjande av resurser. Studien bedöms belysa hur viktigt det är att ta hänsyn till osäkerhet och variabilitet både praktiskt vid beräkningar och för att öka medvetenheten bland beslutsfattare.

## 2 Material och metoder

### 2.1 Naturvårdsverkets riktvärdesmodell

Naturvårdsverkets riktvärdesmodell för förorenade områden är utvecklad för att vid bestämning av riktvärden ta hänsyn till olika exponeringsvägar för människor, skydd av grundvatten, ytvatten och ekosystem (Naturvårdsverket, 2009) (se Figur 1). Matematiska modeller beräknar delriktvärden var och en av exponeringsvägarna ( $C_{is}$ ,  $C_{du}$ ,  $C_{id}$ ,  $C_{iv}$ ,  $C_{iw}$ ,  $C_{ig}$ ). De framräknade riktvärdena från varje exponeringsväg sammanvägs och justeras mot eventuell exponering av aktuellt ämne från andra källor samt jämförs med halten för akut toxicitet. Det lägsta värdet väljs (blir  $C_{health}$ ) och jämförs med ekotoxikologiska riktvärden ( $E_{onsite}$ ) och med ett riktvärde för skydd av spridning ( $C_{release}$ ) som härstammar från beräkning av riktvärden för skydd mot fri fas ( $C_{freephase}$ ), skydd av grundvatten ( $C_{GW}$ ) och skydd av ytvatten ( $E_{offsite}$ ). Det lägsta värdet av  $C_{health}$ ,  $E_{onsite}$  och  $C_{release}$  väljs och jämförs med naturliga bakgrundshalter. Är det beräknade riktvärdet högre än bakgrundshalten på platsen väljs  $C_{gl-unadj}$ , avrundas och används som riktvärde för aktuellt ämne.



**Figur 1.** Uppbyggnad av Naturvårdsverkets riktvärdesmodell för förorenade områden. (Naturvårdsverket, 2009)



Föreliggande studie fokuserar på delmodellerna ”skydd av grundvatten” och ”intag av dricksvatten”. Nedan beskrivs de båda delmodellerna med ingående parametrar.

### 2.1.1 Skydd av grundvatten

Beräkning av riktvärdet för skydd av grundvatten ( $C_{GW}$ ) redovisas nedan och är den maximala föroreningshalten i jord som inte överstiger haltkriterierna för grundvatten ( $C_{crit-gw}$ ). I ekvation 1 divideras  $C_{crit-gw}$  med produkten av utspädningsfaktorn i marken ( $DF_{gw-protect}$ ) och faktorn för fördelning av förorening mellan porvatten och jord ( $CF_{water-mob}$ ) (se Tabell 1 för enheter och beskrivning av i ekvationerna ingående parametrar).

$$C_{GW} = \frac{C_{crit-gw}}{DF_{gw-protect} \times CF_{water-mob}} \quad (1)$$

Haltkriteriet för grundvatten ( $C_{crit-gw}$ ) baseras på dricksvattennormer från Livsmedelsverket eller WHO (World Health Organization). För vissa ämnen saknas dricksvattennormer och i dessa fall har en uppskattning gjorts, baserad på det tolerabla dagliga intaget (TDI) och att endast en andel av TDI kommer från konsumtion av dricksvatten. Haltkriterier som används i riktvärdesmodellen utgår från en halt som motsvarar 50 procent av dricksvattennormen. För vissa ämnen kan smak- och luktproblem uppstå vid lägre halter än de ger hälsoeffekter. I dessa fall har motsvarande nivåer använts som haltkriterium, då relevanta riskbaserade värden inte funnits (Naturvårdsverket, 2009).

**Tabell 1.** Nedan beskrivs de ingående variablerna, vilken typ de är och vilken enhet de har.

Beteckning	Beskrivning	Typ <sup>1)</sup>	Enhet
$C_{gw}$	Riktvärde för skydd av grundvatten	<b>B</b>	mg/kg
$CF_{water-mob}$	Föroreningens fördelning jord/vatten	<b>B</b>	kg/dm <sup>3</sup>
$DF_{gw-protect}$	Utspänningsfaktor porvatten-grundvatten	<b>B</b>	-
$C_{crit-gw}$	Haltkriterie för skydd av grundvatten	<b>Ä</b>	mg/l
$L$	Längd av det förorenade området	<b>S</b>	m
$W$	Bredd av det förorenade området	<b>S</b>	m
$X_{protect}$	Avstånd från det förorenade området	<b>S</b>	m
$Z_f$	Djupet av förorenad mark under grundvattenytan	<b>S</b>	m
$I_r$	Grundvattenbildning	<b>S</b>	m/s
$K$	Hydraulisk konduktivitet	<b>S</b>	m/s
$i$	Hydraulisk gradient	<b>S</b>	m/m
$d_{aq}$	Akviferens mäktighet		m
$d_{mix-protect}$	Tjocklek på blandningszon där utspädning sker. Får ej överstiga värdet för akviferens mäktighet.	<b>B</b>	m
$y_{mix-protect}$	Är tillsammans med bredden av området blandningszon där utspädning sker.	<b>B</b>	m
$K_d$	Fördelningskoefficient mellan jord och vatten	<b>Ä,B</b>	l/kg
$\theta_w$	Jordens vattenhalt	<b>S</b>	dm <sup>3</sup> vatten/dm <sup>3</sup> jord
$K_{DOC}$	Fördelningskoefficient organiskt kol	<b>Ä,B</b>	l/kg
$DOC$	Halt löst organiskt kol i markvattnet	<b>S</b>	mg/l
$\theta_a$	Jordens lufthalt	<b>S</b>	dm <sup>3</sup> luft/dm <sup>3</sup> jord
$H$	Henrys konstant	<b>Ä</b>	
$\rho_b$	Torrdensitet	<b>S</b>	kg/dm <sup>3</sup>
$f_{oc}$	Viktfraktionen organiskt kol i jorden	<b>S</b>	kg/kg
$K_{oc}$	Fördelningsfaktor mellan organiskt kol och vatten	<b>Ä,B</b>	dm <sup>3</sup> /kg
$C_{iw}$	Envägskoncentration, intag av dricksvatten	<b>B</b>	mg/kg
$TRV$	Toxikologiskt referensvärde	<b>Ä</b>	mg/kg kroppsvikt, dag
$R_{iw}$	Genomsnittligt dagligt vattenintag per kroppsvikt	<b>B</b>	l/kg kroppsvikt, dag

1) **B** anger att denna parameter beräknas i modellen. **Ä** anger att parametern är ämnesspecifik och **S** anger scenariospecifik parameter som beskriver omgivningsförhållandena.



Fördelningsfaktorn av förorening mellan porvatten och jord ( $CF_{\text{water-mob}}$ ) beräknas enkelt genom att dividera koncentrationen av ämnet i porvattnet med totalkoncentrationen av ämnet i jord (ekvation 2). Koncentrationen i porvattnet beräknas i sin tur genom ekvation 3 (se Tabell 1 för ingående parametrar). Genom substitution av ekvation 3 in i ekvation 2 elimineras både  $C_w$  och  $C_s$  och resultatet blir ekvation 4.

$$CF_{\text{water-mob}} = \frac{C_w}{C_s} \quad (2)$$

$$C_w = C_s / \left[ K_d + \frac{(\theta_w(1+K_{DOC}DOC) + \theta_a * H)}{\rho b} \right] \quad (3)$$

$$CF_{\text{water-mob}} = 1 / \left[ K_d + \frac{(\theta_w(1+K_{DOC}DOC) + \theta_a * H)}{\rho b} \right] \quad (4)$$

Ämnen som binds starkt till organiskt kol kan transporteras med rörligt organiskt material i grundvattnet. För att ta hänsyn till denna spridningsväg ges värden på halt löst/mobilt organiskt kol i vattnet (DOC) och fördelningskoefficienten för mobilt organiskt kol ( $K_{DOC}$ ).  $K_{DOC}$  ges som ämnesspecifik parameter eller om inget värde ges, beräknas den för organiska föroreningar enligt ekvation 5.

$$K_{DOC} = f_{doc} * K_{oc} \quad (5)$$

I de fall  $K_{DOC}$  finns/beräknas så multipliceras  $CF_{\text{water-mob}}$  med  $(1 + K_{DOC} * DOC)$ .

Beräkning av utspädningsfaktor från porvatten till skyddsvärt grundvatten redovisas nedan (ekvation 7). Det finns två modeller för beräkning av utspädningsfaktorn, dels en där föroreningen befinner sig ovanför grundvattenytan (standardvärde) och dels en där föroreningen befinner sig under grundvattenytan. I föreliggande studie har standardmodellen använts (Figur 2). Utspädningen  $DF_{\text{gw-protect}}$  beror av omgivningsparametrar som t.ex. längd och bredd på det förorenade området, den hydrauliska konduktiviteten, grundvattenbildningen, akviferens mäktighet och föroreningsplymens utseende (Tabell 1).

$$DF_{\text{gw-protect}} = \frac{L * I_r * W}{K * i * d_{\text{mix-protect}} * (2 * y_{\text{mix-protect}} + W) + (W + y_{\text{mix-protect}}) * (L + X_{\text{protect}}) * I_r} \quad (7)$$

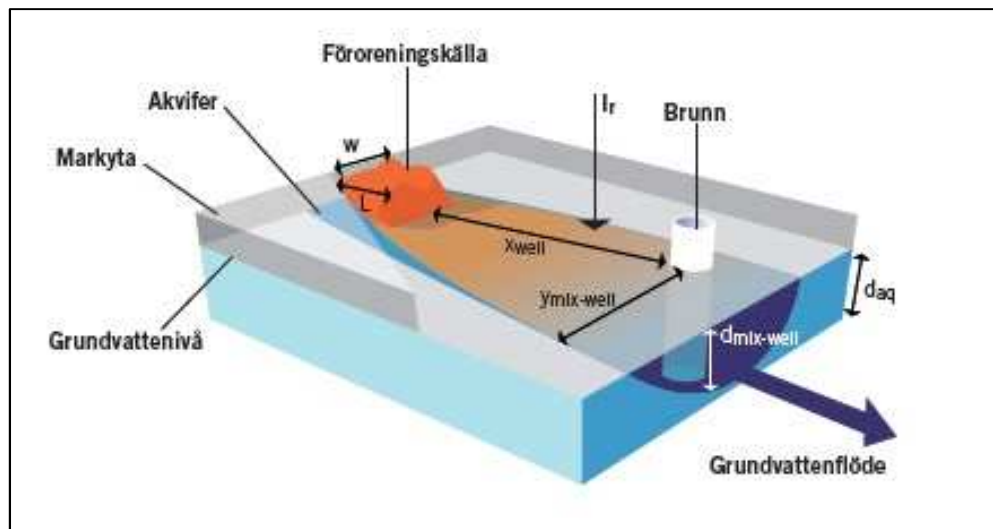
Blandningszonens mäktighet ( $d_{\text{mix-protect}}$ ) beskrivs i ekvation 8. Ekvationen beskriver föroreningsplymens mäktighet på avståndet  $X_{\text{protect}}$ . Hur utbredd i djupled plymen blir beror på dels hur stort det förorenade området är, hur långt

det är från området till skyddsvärt grundvatten, akviferens mäktighet och på grundvattenbildningen. Dessutom har den hydrauliska konduktiviteten och lutningen på grundvattenytan betydelse.

$$d_{mix-protect} = \sqrt{0,0112(L + X_{protect})^2} + d_{aq} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{(L+X_{protect})*I_r}{K*i*d_{aq}}\right) \right] \quad (8)$$

I ekvation 9 beskrivs föroreningsplymens horisontella utbredning på avståndet  $X_{protect}$ . Plymens utbredning ökar (både vertikalt och horisontellt) ju större det förorenade området är samt ju längre från det förorenade området som det skyddsvärda grundvattnet är beläget ( $X_{protect}$ ).

$$y_{mix-protect} = \sqrt{0,0112 * (L + X_{protect})^2} \quad (9)$$



**Figur 2.** Beskrivning av ingående variabler vid beräkning av utspädning av en förorening i grundvattnet på ett visst avstånd från föroreningskällan. (Naturvårdsverket, 2009).



### 2.1.2 Intag av dricksvatten

Exponering för förorenat vatten antas ske genom användning av grundvatten från en brunn till matlagning och till dricksvatten. Envägskoncentrationen i mark för intag av dricksvatten är benämnd  $C_{iw}$  och beräknas enligt ekvation 10. Det toxikologiska referensvärdet (TRV) har tagits fram baserat på humantoxikologiska data. För ämnen med tröskeeffekter (det vill säga ämnen där hälsoeffekter endast uppkommer efter exponering av en särskild dos) används TDI. För genotoxiska ämnen utan tröskeeffekter där även en låg dos ger en liten risk för cancer används RISKor (riskbaserat tolerabelt intag, oralt intag).  $R_{iw}$  betecknar det genomsnittliga dagliga intaget av vatten, per kroppsvikt.

$$C_{iw} = \frac{TRV}{DF_{gw-well} * CF_{water-mob} * R_{iw}} \quad (10)$$

På samma sätt som vid beräkning av riktvärdet för skydd av grundvatten beräknas variablerna i ekvation 11. Skillnaden är endast att det nu beräknas föroreningsspridning till en brunn och inte till skyddsvärd grundvatten. Samtliga variabler med beskrivning återfinns i Tabell 1 ovan (se även Figur 2 för en konceptuell beskrivning).

$$DF_{gw-well} = \frac{L * I_r * W}{K * i * d_{mix-well} * (2 * y_{mix-well} + W) + (W + y_{mix-well}) * (L + x_{well}) * I_r} \quad (11)$$

$$d_{mix-well} = \sqrt{0,0112(L + x_{well})^2} + d_{aq} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{(L + x_{well}) * I_r}{K * i * d_{aq}}\right) \right] \quad (12)$$

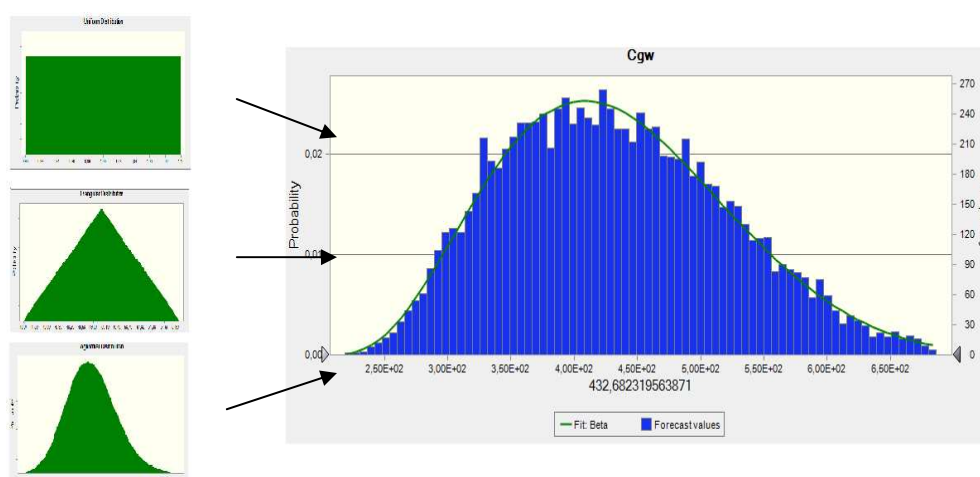
$$y_{mix-well} = \sqrt{0,0112 * (L + x_{well})^2} \quad (13)$$

$CF_{water-mob}$  beräknas på samma sätt som ovan (ekvation 2-5).

## 2.2 Probabilistisk riskbedömning med Monte Carlo simulering

Med ett probabilistiskt angreppssätt vid riskbedömningen kan fortplantning av osäkerheter i modellen beskrivas. Ingående modellparametrar tilldelas ett värde och en sannolikhetsfördelning. Valet av sannolikhetsfördelning är av stor betydelse. Bäst är det om den bakomliggande mekanismen är känd och det går att basera valet på den kunskapen. Finns ett stort dataunderlag kan detta användas för att skatta lämplig fördelning. Är dataunderlaget för litet eller obefintligt kan man jämföra med liknande frågeställningar eller utgå från en expertbedömning.

I simuleringen ändras sedan alla parametrar slumpmässigt ett stort antal gånger utifrån valda sannolikhetsfördelningar. Utfallet vid varje iteration kommer att variera och resultatet av de sammanlagda beräkningarna blir en sannolikhetsfördelning för uträknat riktvärde som beskriver den variabilitet och osäkerhet som modellen innefattar (Hållbar sanering, 2006). Utifrån resultaten från Monte Carlo simuleringen kan sedan en riskjämförelse utföras med val av vilken percentil som skall användas (vilken säkerhetsnivå som bör uppnås). En känslighetsanalys kan utföras för att identifiera bidraget till variation/osäkerhet från de olika parametrarna. Detta ger en bild av var ytterligare undersökningsinsatser eller riskreducerande åtgärder kan bli aktuella. Mjukvaran som använts vid simuleringarna är Crystall Ball som är ett tilläggsprogram till MS Excel utvecklat av Oracle.



**Figur 3.** Schemat beskriver hur ett värde i taget från varje definierad sannolikhetsfördelning (de tre diagrammen till vänster) sätts in i modellen och genererar ett resultatvärde som sammanlagt med övriga beräknade resultatvärden bildar en sannolikhetsfördelning.

### 2.3 Känslighetsanalys

Med en känslighetsanalys identifieras de ingångsvariabler som har störst inflytande på beräkningsresultatet. Detta kan utföras genom att studera hur beräkningsresultatet förändras när en ingångsvariabel i taget varieras. I denna studie har känslighetsanalysen utförts automatiskt i Crystal Ball med så kallad "Spearman Rank Correlation".

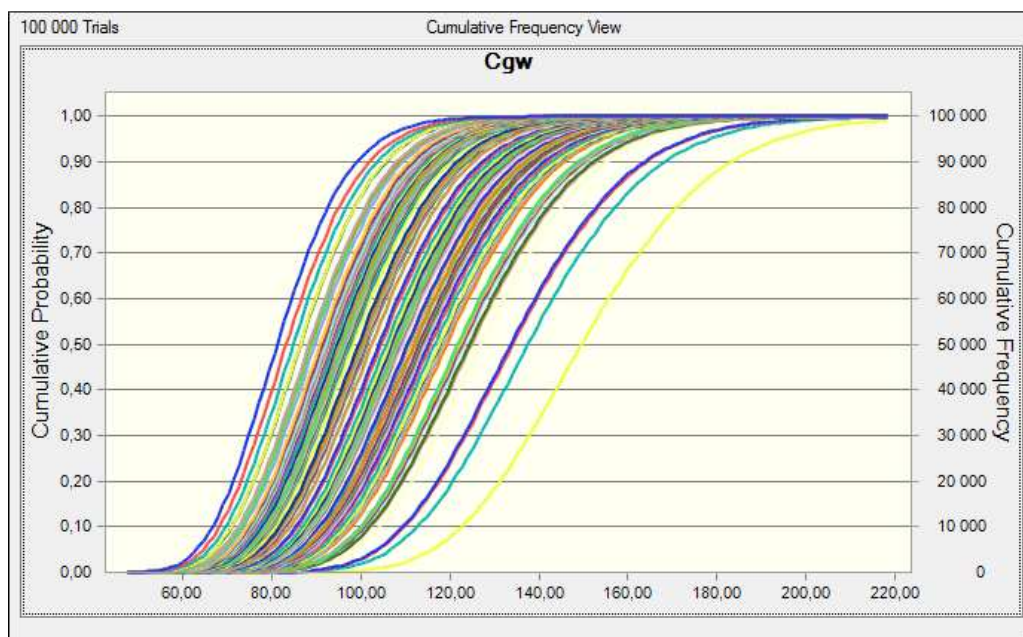
Korrelationskoefficienten ger ett mått på hur slutvärdet (i detta fall riktvärdet) förändras med variabelvärdet. Om variabeln och slutvärdet har en hög absolut korrelationskoefficient betyder det att variabeln har stor inverkan på resultatet, både på grund av variabelosäkerheten och på modellens känslighet. En positiv hög korrelationskoefficient betyder att en ökning av variabeln ger en ökning av resultatet. En negativ hög korrelationskoefficient antyder att en ökning av variabeln ger en minskning av resultatet. Begränsningar för analysen är bland annat variabler som är korrelerade (t.ex. vattenhalten och lufthalten i jorden), variabler som är icke-montona (som ej är strängt växande eller sjunkande) och variabler med diskreta fördelningar (en diskret fördelning har en kumulativ fördelningsfunktion som består av en sekvens av ändliga steg).

### 2.4 Variabilitet och osäkerhet

I en probabilistisk riskbedömning hanteras osäkerhet och variabilitet på ett vetenskapligt sätt. Valet av modell innebär en osäkerhet som benämns modellösäkerhet och kan hanteras genom validering och verifiering av modellen samt genom att definiera dess tillämpningsområde. Det skall dock aldrig glömmas att en modell aldrig är en perfekt beskrivning av verkligheten. Hänsyn måste sedan tas till använda indata i vilka det förekommer både osäkerhet i uppskattade parametervärden och variabilitet mellan olika individer och platser. Den naturliga variabiliteten kan karakteriseras bättre men aldrig elimineras. Osäkerheten kan dock minskas genom mer och bättre data (Hållbar sanering, 2006).

Osäkerheten och variabiliteten kan i viss utsträckning hanteras separat genom att utföra en tvådimensionell Monte Carlo-simulering. De variabler som anses variera främst till följd av variabiliteten simuleras i en inre loop medan de parametrar vars variation är en följd av osäkra mätdata simuleras i en yttre loop. Resultaten visas i en figur med kumulativa sannolikhetsfördelningar (Figur 4). (Hållbar sanering, 2006).

Spridningen mellan de olika kurvorna visar osäkerheten i skattningen. Själva fördelningen visar på variabiliteten i beräkningen. Genom att skilja på variabilitet och osäkerhet i modellen erhålls ett mer realistiskt resultat. Detta kan sedan användas för att validera resultaten från 1D-simuleringen.



**Figur 4.** Resultat från en 2D-simulering. I simuleringen skiljs variabilitet och osäkerhet åt, och resultatet blir ett antal kurvor vars spridning anger osäkerheten. Den enskilda kurvan anger variabiliteten. Figuren visar på en större osäkerhet vid högre riktvärden (där kurvorna ligger mindre tätt).

### 3 Genomförande

#### 3.1 Modelluppbyggnad

Naturvårdsverkets riktvärdesmodell (för känslig markanvändning) har implementerats i MS Excel där ingående variabler tilldelats sannolikhetsfördelningar. Samtliga ingående variabler redovisas med enheter och beskrivning samt typ i Tabell 2. Vissa variabler beräknas, enligt ekvationerna i styckena 2.1.1-0 och dessa ekvationer har lagts in som formler i MS Excel. En dimensionsanalys har utförts och enheter har justerats för att jämförelse skall kunna göras mot Naturvårdsverkets beräkningsprogram för riktvärden i Excelformat. Innan simulering påbörjats har modellen testats genom att jämföra resultat och beräknade indata med resultat från Naturvårdsverkets beräkningsprogram.



### 3.2 Upplägg

- Uppbyggd modell för beräkning av riktvärde för skydd av grundvatten och intag av dricksvatten testas för antimon (Sb), trikloreten samt MTBE och beräknat riktvärde jämförs med det deterministiskt bestämda riktvärdet i Naturvårdsverkets beräkningsprogram.
- En känslighetsanalys utförs.
- En 2D-simulering utförs där osäkerhet och variabilitet skiljs åt.

### 3.3 Monte Carlo simulering - val av sannolikhetsfördelningar

Valet av sannolikhetsfördelningar för ingångsvariabler är av stor vikt. Då denna studie är generell har dessa sannolikhetsfördelningar valts utifrån tidigare studier och erfarenheter (Tabell 2). Storlek på förorenat område, djup och akviferens mäktighet bedöms erfarenhetsmässigt ha uniform eller triangulär sannolikhetsfördelning. Det har varit svårt finna tidigare utförda studier där grundvattenbildningen ingått som en parameter. Därför har sannolikhetsfördelningen för grundvattenbildningen antagits vara uniform.

$\theta_a$  och  $\theta_w$  är korrelerade då jordens lufthalt och vattenhalt beror av varandra. En faktor 0,8 har antagits i beräkningarna (Hållbar sanering, 2006). I övrigt har ingående variabler inte antagits vara korrelerade.

**Tabell 2.** Val av parametervärden och sannolikhetsfördelning för dessa.

Beteckning	Indata	Värden	Fördelning	Referens
$C_{gw}$			-	Beräknas
$CF_{water-mob}$			-	Beräknas
$DF_{gw-protect}$			-	Beräknas
$C_{crit-gw}$			-	Konstant (tabellvärde)
$R_{iw}$			Lognormal	(U.S EPA, 1997)
L	50	48-50(troligast)-52	Triangulär	Antaget
W	50	48-50(troligast)-52	Triangulär	Antaget
$X_{protect}$	0		-	-
$Z_f$	1	0,9-1,1	Uniform	Antaget
$I_r$	3,17E-09	2,85E-9 - 3,49E-9	Uniform	Antaget
K	1,00E-05	0-1E-6	Lognormal	(Back, 2001)
i	0,03	0,02-0,04	Uniform	(Back, 2001)
$d_{aq}$	10	9-10(troligast)-11	Triangulär	Antaget
$d_{mix-protect}$			-	Beräknas
$Y_{mix-protect}$			-	Beräknas
$K_d$		Ämnesspecifik	Lognormal	Allison, 2005
$\theta_w$	0,32	0,05-0,32(troligast)-0,50	Triangulär	(Hållbar sanering, 2006)
$K_{DOC}$				Beräknas
DOC	0,000003		-	-
$\theta_a$	0,08	0-0,08(troligast)-0,6	Triangulär	(Hållbar sanering, 2006)
H		Ämnesspecifik	Lognormal	(Hållbar sanering, 2006)
$\rho_b$	1,5	0,25-1,5(troligast)-1,6	Triangulär	(Hållbar sanering, 2006)
$f_{oc}$	0,24	0,22-0,24(troligast)-0,26	Triangulär	(Hållbar sanering, 2006)
$K_{oc}$		Ämnesspecifik	Lognormal	(Hållbar sanering, 2006)

Ett stort antal körningar utförs för att få stabila resultat även i de högsta percentilerna. Resultaten redovisas som sannolikhetsfördelning eller kumulativ sannolikhetsfördelning med anpassad sannolikhetsfördelningskurva, tabell över percentiler och känslighetsanalys.

För 2D-simuleringen väljs nedanstående variabler ut som de vars värden antas variera på grund av osäkerhet i data. Grundvattenbildningen antas variera på grund av osäkerhet i data då den vanligtvis inte mäts utan beräknas utifrån andra uppmätta parametrar (t.ex. nederbörd, evapotranspiration m m). Övriga variabler har valts ut på samma sätt som i rapporten "Probabilistisk riskbedömning fas 1" (Hållbar sanering, 2006).

- Grundvattenbildning ( $I_r$ )
- Fördelningskoefficient mellan jord och vatten ( $K_d$ )
- Henrys konstant (H)
- Fördelningsfaktor mellan organiskt kol och vatten ( $K_{oc}$ )

Övriga parametrar antas variera till följd av naturlig variabilitet.



### 3.4 I studien ingående ämnen

Studerade ämnen/föreningar valdes på grund av att riktvärdet för skydd av grundvatten är begränsande för dessa vid riktvärdesberäkning med Naturvårdsverkets modell (Naturvårdsverket, 2008). Val av ämnesspecifika parametrar utfördes utifrån indata i Naturvårdsverkets riktvärdesmodell (för möjliggörande av jämförelse av resultat) (Tabell 3). Nedan ges en kortfattad beskrivning av ämnenas egenskaper och farlighet.

- Antimon  
Antimon är en halvmetall som liknar arsenik både kemiskt och toxikologiskt. Antimon används som tillsatsämne i bland annat plast, textilier, gummi och metall. Den viktigaste funktionen är som flamskyddsmedel. Andra funktioner är bl.a. pigment och legeringsmetall. Antimon kan vid ett punktutsläpp spridas långt nedströms då det uppträder relativt konservativt i akvatisk miljö. (Sternbeck, 2002)
- Trikloret  
Trikloret har sedan 1930-talet varit ett vanligt förekommande avfettningsmedel inom stål- och verkstadsindustri samt inom textiltvätt fram till 1950-talet. Klorerade lösningsmedel är hälsofarliga och trikloret är förbjudet i Sverige men får användas efter dispens från Kemikalieinspektionen. (Hållbar sanering, 2007)
- MTBE  
MTBE har använts som tillsatsmedel i oblyad bensin för att öka oktanhalt. Ämnet har hög vattenlöslighet och är svårnedbrytbart. MTBE kan även vara cancerframkallande (Kemakta, 2005).

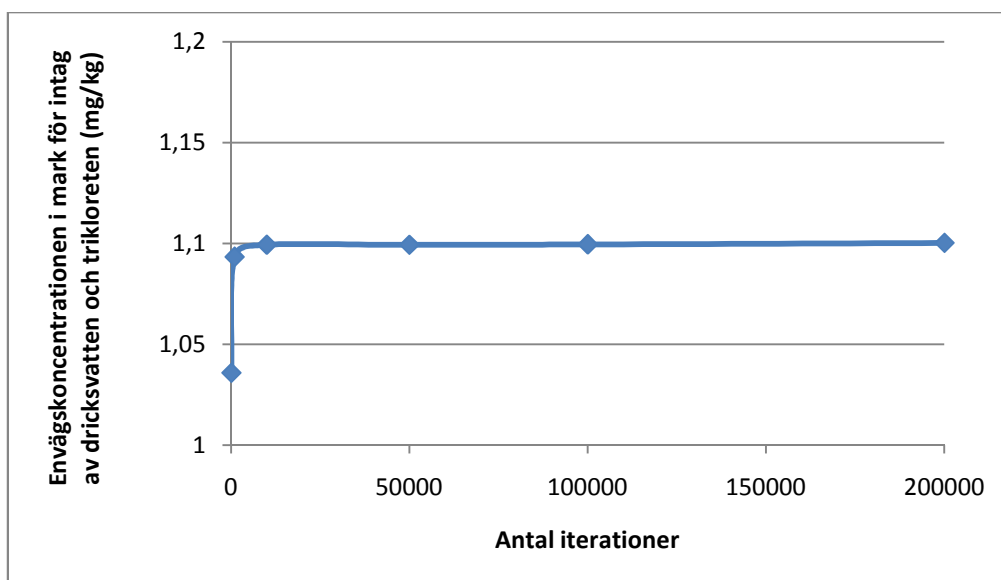
**Tabell 3.** Ämnesspecifika värden som använts vid beräkning av riktvärden. (Naturvårdsverket, 2009)

Ämne	Ccrit-gw (mg/l)	Kd (l/kg)	Koc (l/kg)	H	KDOC (l/kg)	TRV (mg/kg, dag)
Antimon	0,01	80	-	-	-	0,006
Trikloret	5,00E-03	2,296307	115	2,780E-01	27,6	0,0015
MTBE	0,04	0,12	6	0,024	1,44	0,1

## 4 Resultat

### 4.1 Stabilitet

För att undersöka om 100 000 iterationer är tillräckligt för att uppnå stabilitet i de högre percentilerna har körningar av modellen för intag av dricksvatten utförts med olika antal iterationer. Resultat från dessa simuleringar visas i Figur 5 nedan. Figuren visar att ett stabilt värde på 90-percentilen har uppnåtts vid 100 000 iterationer.



**Figur 5.** Diagrammet beskriver hur 90-percentilen av envägskoncentrationen i mark för intag av dricksvatten och trikloreten ändras med ökat antal iterationer.

Vid 2D-simuleringen kördes den inre loopen 100 000 gånger precis som vid 1D-simuleringen och den yttre loopen kördes 100 gånger. Det totala antalet iterationer uppgick till 10 000 000 och antas vara tillräckligt för att uppnå stabilitet.

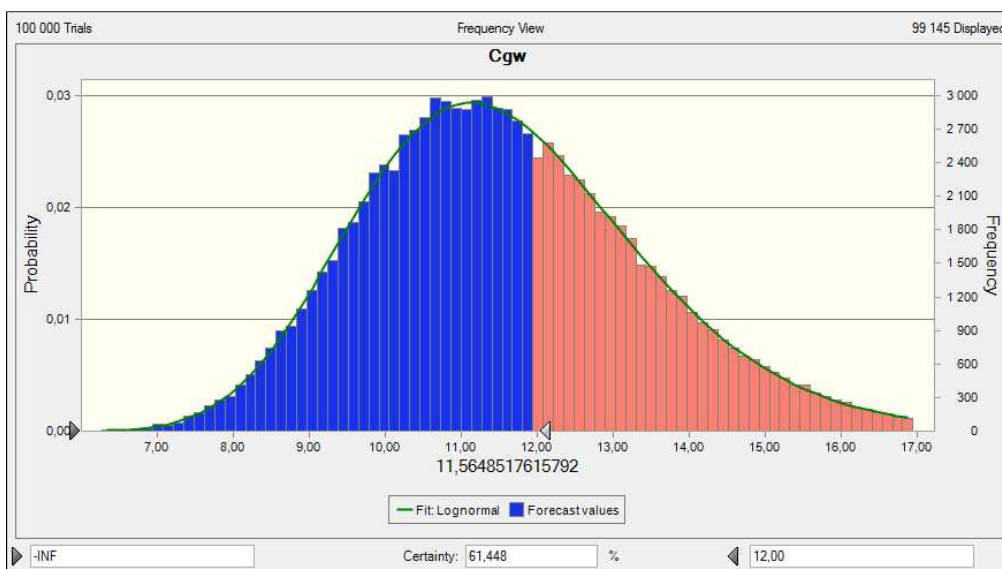
### 4.2 Skydd av grundvatten

Naturvårdsverkets riktvärde för skydd av grundvatten och antimon ligger på 12 mg/kg (Tabell 4). Med framtagna delmodell för skydd av grundvatten beräknas samma riktvärde (deterministiskt) till 11,56 mg/kg, skillnaden beror på att framräknat riktvärde inte är avrundat så som det är i riktvärdesmodellen.

Resultaten från simulering med Crystal Ball visar att med 50 % sannolikhet underskrider/överskrider beräknat riktvärde 11,45 mg/kg. Med 90 % sannolikhet underskrider beräknat riktvärde 14,13 mg/kg. Det betyder att i 90 % av fallen blir riktvärdet strängare än 14,13 mg/kg. Då ett lågt riktvärde ger ett

högre skydd är det intressant att studera hur stor sannolikheten är att beräknat riktvärde överstiger ett visst värde. Enligt nedanstående resultat överstigs 9,31 mg/kg med en sannolikhet på 90 %. Det är alltså endast i 10 % av simuleringarna som riktvärdet blir lägre.

I 61,45 % av simuleringarna beräknades ett riktvärde som är lägre än Naturvårdsverkets framtagna (Figur 6). En slutsats är att Naturvårdsverkets riktvärde i detta fall inte är särskilt konservativt.



**Figur 6.** Med 61,45 % sannolikhet understiger beräknat riktvärde Naturvårdsverkets framtagna riktvärde för antimon (12 mg/kg).

**Tabell 4.** Resultat från beräkning av riktvärdet för skydd av grundvatten.

Riktvärden för skydd av grundvatten	Antimon Mg/kg	Trikloretin Mg/kg	MTBE Mg/kg
<b>Naturvårdsverkets riktvärde för skydd av grundvatten:</b>	12	0,18	0,19
<b>Beräknade riktvärden:</b>			
Deterministiskt:	11,56	0,18	0,19297
Medelvärde (50% sannolikhet att värdet överstigs):	11,45	0,188	0,220
NV:s riktvärde understigs med:	61,5 %	39,8 %	32,6 %
Med 90% sannolikhet understiger beräknat riktvärde:	14,13	0,235	0,355
Med 90% sannolikhet överstiger beräknat riktvärde:	9,31	0,1520	0,1434

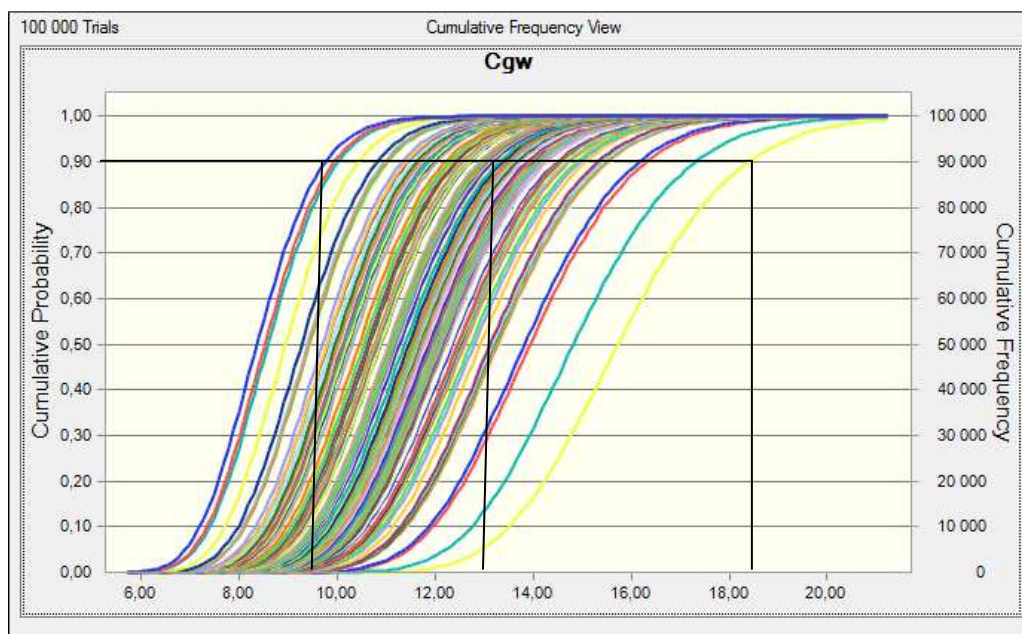
Resultaten från den tvådimensionella simuleringen visar att för 90-percentilen ligger beräknat riktvärde mellan 9,82–18,44 mg/kg (Tabell 5). Medianen ligger för 90 percentilen på 13,29 mg/kg och kan jämföras med motsvarande resultat från den endimensionella simuleringen där riktvärdet för skydd av grundvatten och antimon med 90 % sannolikhet understiger 14,13 mg/kg. Resultatet från 2D-simuleringen, indikerar därmed att riktvärdet från 1D-simuleringen skulle kunna sättas strängare.

Vid jämförelse mellan Naturvårdsverkets riktvärde på 12 mg/kg, 1D-modellens 90-percentil (14,13 mg/kg) och 2D-modellens median av 90-percentilen (13,29 mg/kg) konstateras att Naturvårdsverkets framtagna riktvärde är konservativt (lågt satt). Skulle en beslutsfattare anse att 90-percentilen ger ett tillräckligt skydd (det fall då riktvärdet blir lägre i 90 % av beräkningarna) skulle Naturvårdsverkets riktvärde kunna höjas med 10 %.

**Tabell 5.** Simuleringsresultat från 2D-simulering. Tabellen visar 10-percentilen och 90-percentilen och min- och maxvärden för dessa samt avvikelser från mellan min- och maxvärdet och medianen.

Antimon	Median	Min	Max	Avvikelse min %	Avvikelse max %
10%	9,79	7,26	13,56	25,83	38,52
90%	13,29	9,82	18,44	26,12	38,77
Trikloret					
10%	0,16	0,1342	0,2100	15,37	32,44
90%	0,23	0,1933	0,2947	14,26	30,72
MTBE					
10%	0,15	0,1116	0,1684	23,34	15,69
90%	0,36	0,3055	0,3988	15,28	10,61

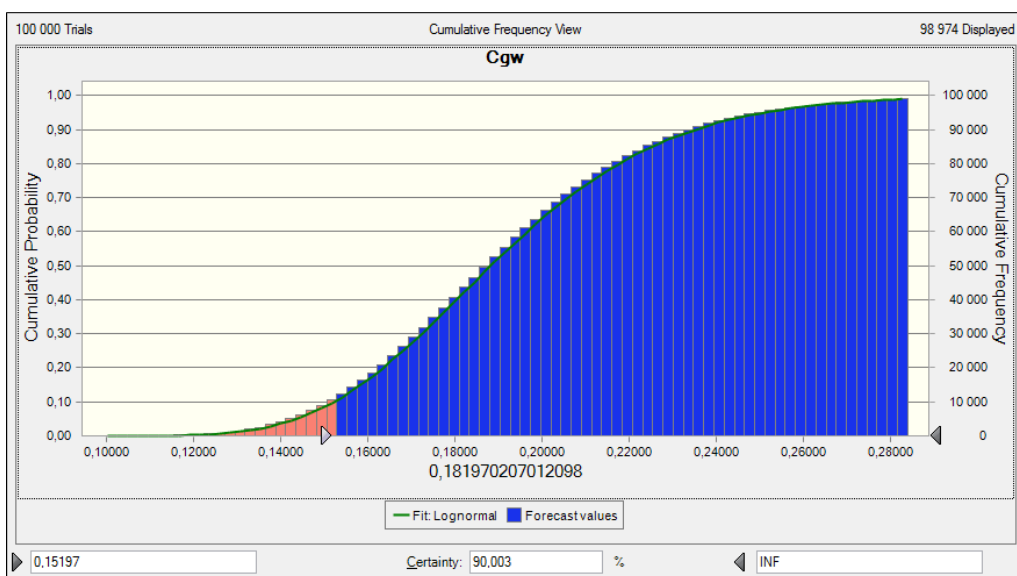
I Figur 7 observeras att sannolikhetsfördelningarna generellt ligger tätare mot min-värdet för 90-percentilen. Det innebär att osäkerheten är mindre i detta område.



**Figur 7.** Resultat från 2D-simulering för antimon. Simuleringsresultaten att 90-percentilen ligger mellan 9,82-18,44 mg/kg. Medianen ligger på 13,29 mg/kg.

Resultaten för trikloreten visar att beräknat medelvärde ligger väldigt nära Naturvårdsverkets riktvärde för trikloreten (Tabell 4). 0,18 mg/kg underskrivs av ca 40 % av beräknade riktvärden. Naturvårdsverkets riktvärde kan därmed anses något konservativt. Med 90 % sannolikhet överskrider beräknat riktvärde 0,15 mg/kg (det är alltså endast 10 % av beräknade riktvärden som blir strängare än 0,15 mg/kg) och i 90 % av beräkningarna ges ett riktvärde lägre än 0,235 mg/kg. Resultaten från 2D-simuleringen visar att för 90-percentilen ligger beräknat riktvärde mellan 0,193 – 0,295 mg/kg. Medianen för 90-percentilen ligger på 0,23 mg/kg vilket stämmer väl överens med resultaten från 1D-simuleringen 0,235 mg/kg.

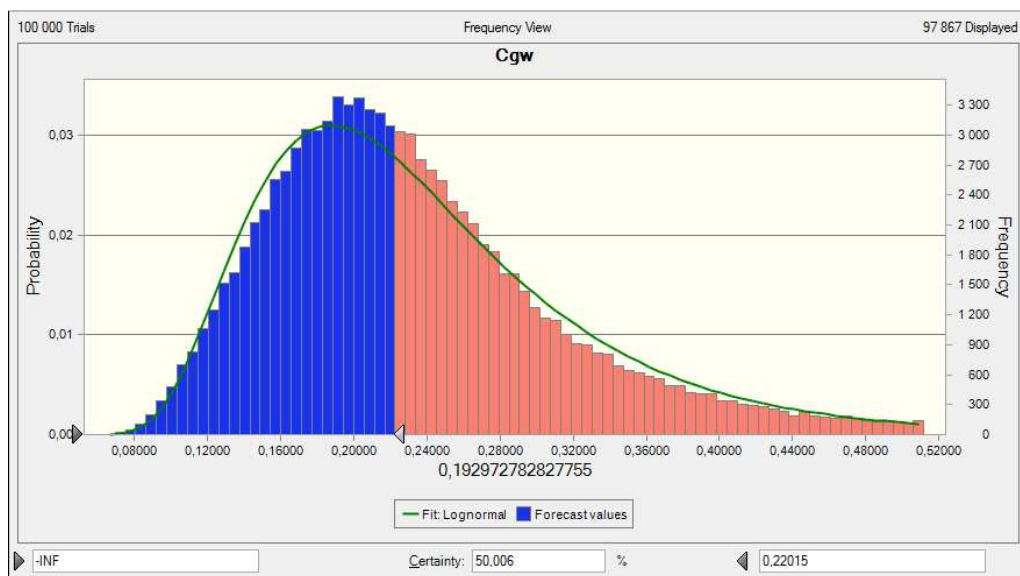
Om samma jämförelse som utfördes för antimon ovan (med 90-percentilen som tillräcklig säkerhet) görs för trikloreten så skulle Naturvårdsverkets riktvärde kunna ökas med 28 %.



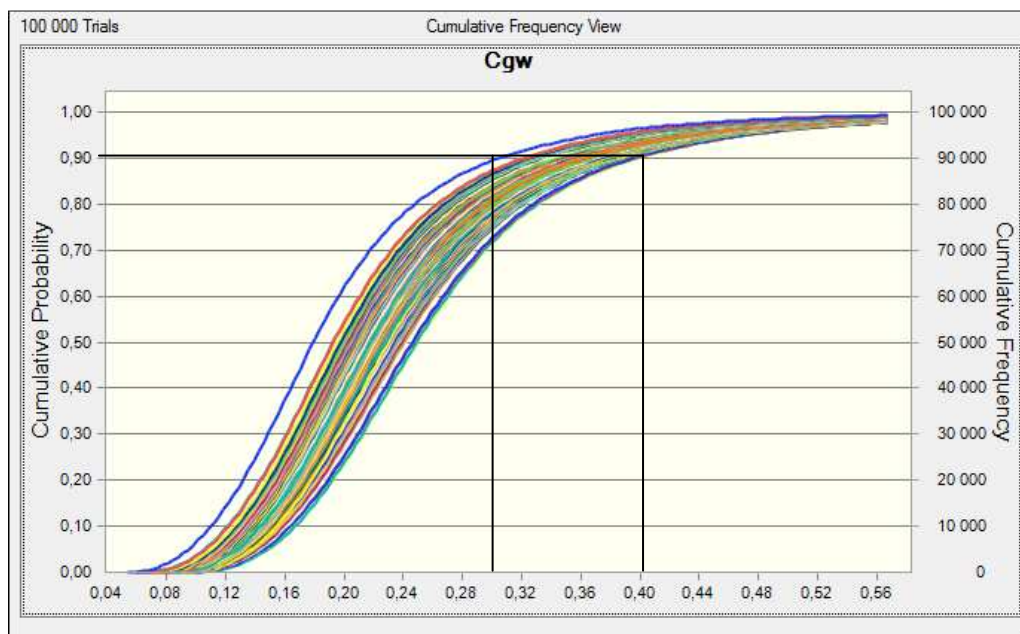
**Figur 8.** Kumulativ sannolikhetsfördelning över riktvärdet för skydd av grundvatten och trikloreten. Figuren visar att 90 % av riktvärdena överstiger 0,15 mg/kg.

Resultaten från simulering av riktvärdet för skydd av grundvatten och MTBE redovisas i Tabell 4, Figur 9 och Figur 10. Endast 32,6 % av beräknade riktvärden understiger Naturvårdsverkets framtagna riktvärde på 0,19 mg/kg. Detta tolkas som att Naturvårdsverkets framtagna riktvärde ligger åt det konservativa hållet. Vid den tvådimensionella simuleringen ligger de beräknade riktvärdena för 90-percentilen mellan 0,306–0,40 mg/kg. Medianhalten för 90-percentilen ligger på 0,36 mg/kg vilket stämmer väl överens med resultatet från den endimensionella simuleringen (0,355 mg/kg). I Figur 10 observeras att majoriteten av sannolikhetskurvorna ligger tätt samman vilket tolkas som att sannolikheten är lika stor för alla riktvärden mellan 0,306–0,40.

Vid jämförelse mellan Naturvårdsverkets riktvärde och 90-percentilen antyds att Naturvårdsverkets riktvärde skulle kunna ökas med 86 %.



**Figur 9.** Figuren visar sannolikhetsfördelningen för riktvärdet för skydd av grundvatten och MTBE. Fördelningen är uppskattat lognormal-formad och i 50% av beräkningarna understiger beräknat riktvärde 0,22 mg/kg.



**Figur 10.** Resultat från 2D-simulering för MTBE. Simuleringsresultaten visar att 90-percentilen ligger mellan 0,306-0,40 mg/kg.



I Tabell 5 ovan anges avvikelser mellan medianvärdet och min- respektive maxvärdet för de olika ämnena och 10- och 90-percentilen vid 2D-simuleringen. Här observeras att avvikelser mellan minvärdet och medianen för antimon och trikloreten är lägre än avvikelser mellan max och medianen för dessa ämnen. Detta tolkas som att riktvärdet bör sättas åt det strängare (lägre) hållet. För MTBE är förhållandet det omvända och riktvärdet bör kunna sättas närmare max. Intressant att jämföra är även avvikelser för de olika ämnena. MTBE har något lägre avvikelse än antimon och trikloreten vilket tolkas som att osäkerheten är något mindre i denna simulering.

Känslighetsanalys utfördes genom Spearman Rank Correlation och resultatet visas i Tabell 6 nedan. Analysen visar att de variabler som bidrar mest till osäkerheten är den hydrauliska konduktiviteten, den hydrauliska gradienten, fördelningskoefficienten mellan jord och vatten (för antimon och trikloreten) och torrdensiteten samt jordens luft- och vattenhalt (för MTBE och trikloreten). Det bör noteras att jordens luft- och vattenhalt är korrelerade varför ett större bidrag för den ena variabeln automatiskt kan ge ett större värde även för den andra.

**Tabell 6.** Känslighetsanalys genom Spearman Rank Correlation på simuleringar av riktvärdet för skydd av grundvatten. Markerade celler visar de största bidragen till osäkerheten i modellen.

Variabel		Antimon	Trikloreten	MTBE
Hydraulisk konduktivitet (K)	G12	0,5	0,48	0,23
Hydraulisk gradient (i)	G13	0,5	0,48	0,23
Fördelningskoefficient mellan jord och vatten (Kd)	G20	0,59	0,49	0,08
Grundvattenbildning (Ir)	G11	-0,29	-0,28	-0,13
Längd av det förorenade området (L)	G7	0,01	0,01	0,01
Bredd av det förorenade området (W)	G8	-0,01	-0,02	-0,01
Torrdensitet ( $\rho_b$ )	G26	-0,01	-0,25	-0,58
Jordens lufthalt ( $\theta_a$ )*	G24	0,01	0,24	0,54
Jordens vattenhalt ( $\theta_w$ )*	G21	0,01	0,26	0,66
Henrys konstant (H)	G25		0,01	
Akviferens mäktighet (daq)	G14			
Viktsfraktionen organiskt kol i jorden (foc)	G27			
Fördelningsfaktor mellan organiskt kol och vatten (Koc)	G28			

### 4.3 Intag av dricksvatten

Resultaten från beräkningarna av envägskoncentrationen i mark för intag av dricksvatten  $C_{iw}$  (mg/kg) visas i Tabell 7. För antimon beräknas en deterministisk envägskoncentration på 104 mg/kg. Naturvårdsverkets motsvarande koncentration ligger på 100 mg/kg och har i detta fall avrundats nedåt. 42,8 % av de beräknade envägskoncentrationerna understiger 100 mg/kg. Med 90 % sannolikhet överstiger beräknat riktvärde 81,15 mg/kg och understiger 132,2 mg/kg. Den tvådimensionella simuleringen visar att

envägskoncentrationen för 90-percentilen ligger mellan 99,58 och 183,65 mg/kg (Tabell 8). Avvikelsen mellan medianen och maxvärdet är dock 42 % jämfört med 23 % avvikelsen mellan minvärdet och medianen vilket tyder på att riktvärdet bör sättas lägre än max. Medianen för 90-percentilen är 128,97 mg/kg vilket är lägre än motsvarande resultat från 1D-simuleringen (132,2 mg/kg) och tyder på en underskattad risk i 1D-simuleringen.

Om riktvärdet för 90-percentilen anses ge ett fullgott skydd beräknas ett riktvärde som är 29 % högre än Naturvårdsverkets riktvärde för intag av dricksvatten.

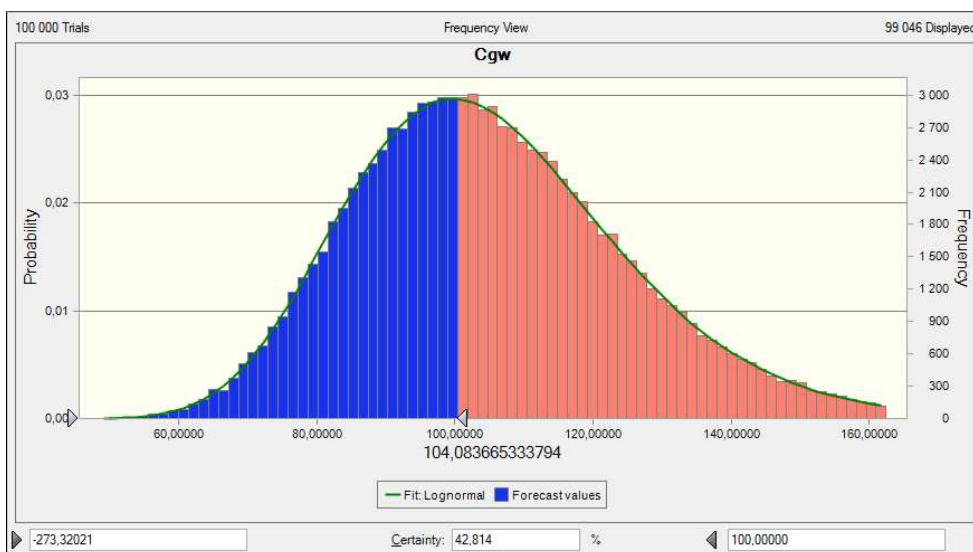
**Tabell 7.** Resultat från beräkning av envägskoncentrationen i mark för intag av dricksvatten.

Riktvärden för intag av dricksvatten	Antimon mg/kg	Trikloret mg/kg	MTBE mg/kg
<b>Naturvårdsverkets riktvärde för intag av dricksvatten:</b>	100	0,82	7,2
<b>Beräknade riktvärden:</b>			
Deterministiskt:	104	0,819	7,237
Medelvärde (50% sannolikhet att värdet överstigs):	103,47	0,8517	8,302
NV:s riktvärde understigs med:	42,8%	42,4 %	34,1 %
Med 90 % sannolikhet understiger beräknat riktvärde:	132,2	1,101	13,67
Med 90 % sannolikhet överstiger beräknat riktvärde:	81,15	0,6634	5,28

**Tabell 8.** Simuleringsresultat från 2D-simulering. Tabellen visar 10-percentilen och 90-percentilen och min- och maxvärden för dessa samt avvikelser från mellan min- och maxvärdet och medianen.

Antimon	Median	Min	Max	Avvikelse min %	Avvikelse max %
10 %	86,69	67,09	123,02	22,6	41,9
90 %	128,97	99,58	183,65	22,8	42,4
Trikloret					
10 %	0,70	0,551580	0,8859	20,7	27,3
90 %	1,07	0,8675	1,357	19,1	26,6
MTBE					
10 %	5,26	4,698	6,134	10,8	16,5
90 %	13,49	12,44	15,26	7,8	13,1

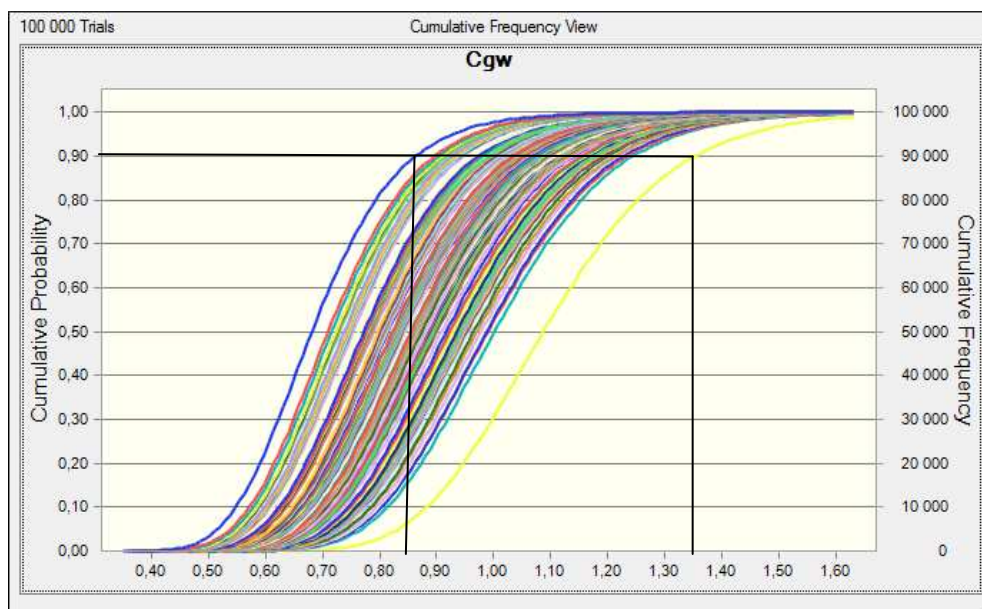




**Figur 11.** Sannolikhetsfördelning för envägskoncentrationen i mark för intag av dricksvatten och antimon. Figuren visar att Naturvårdsverkets riktvärde understigs i ca 43% av simuleringarna.

Envägskoncentrationen för trikloreten beräknas deterministiskt till 0,819 mg/kg vilket stämmer överens med Naturvårdsverkets beräknade koncentration på 0,82 mg/kg. Vid den probabilistiska beräkningen visas att Naturvårdsverkets riktvärde understigs i 42 % av simuleringarna. 2D-simuleringen visar att 90-percentilen beräknat riktvärde ligger mellan 0,8675 och 1,357 mg/kg (se Tabell 8). Medianen för 90-percentilen är 1,07 vilket stämmer överens med resultatet från 1D-simuleringen (1,10 mg/kg). I Figur 12 observeras att sannolikhetskurvorna ligger relativt tätt förutom en kurva som avviker mot höger (max). Riktvärdet bör därmed inte sättas för nära max.

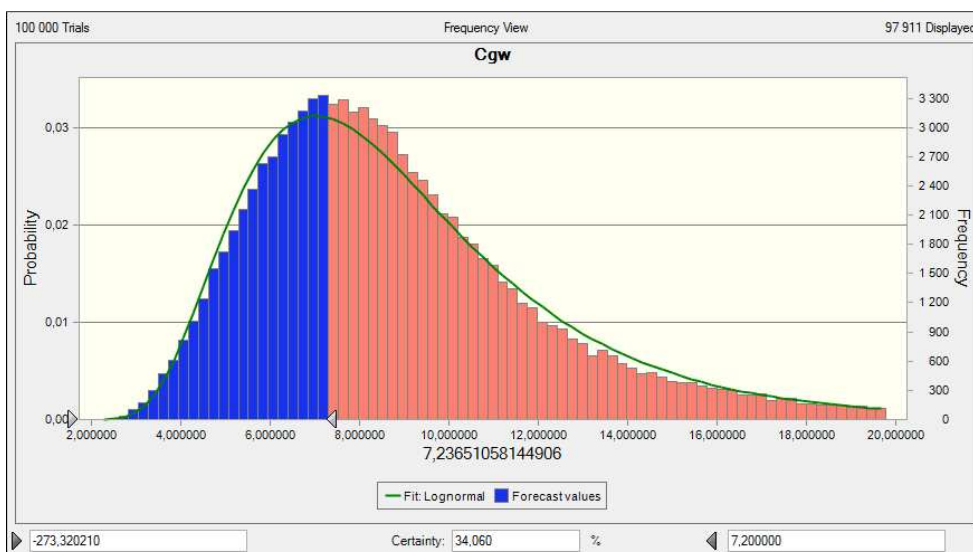
I det fall riktvärdet för 90-percentilen anses ge ett tillräckligt skydd beräknas ett riktvärde som är 27 % högre än Naturvårdsverkets framtagna riktvärde.



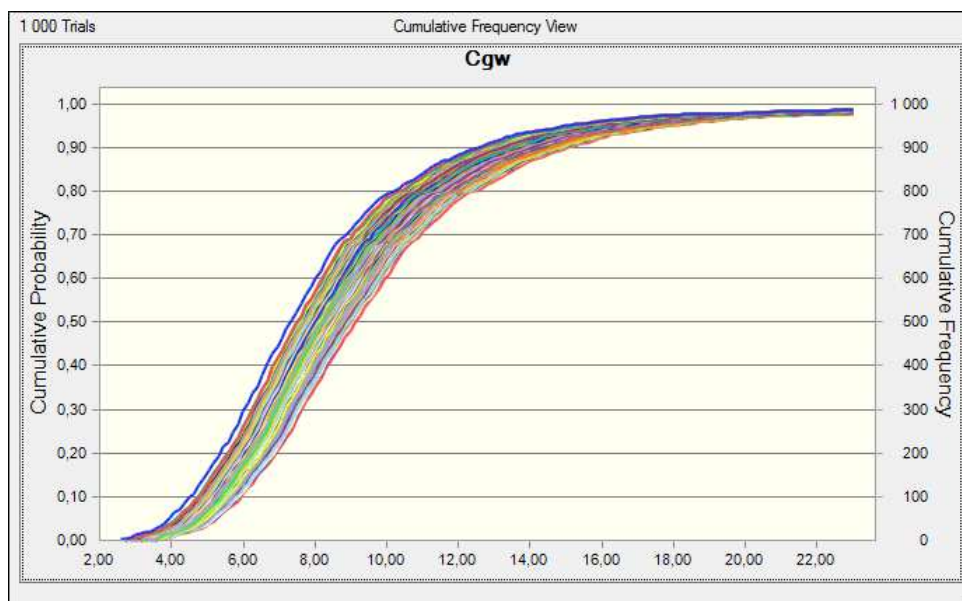
**Figur 12.** Tvådimensionell simulering av envägs-koncentrationen i mark vid intag av dricksvatten och trikloreten (mg/kg).

Resultaten från simulering av envägs-koncentrationen för MTBE visas i Tabell 7 och Figur 13. I Figur 14 visas osäkerhet och variabilitet i en tvådimensionell simulering. Naturvårdsverkets deterministiskt bestämda värde för envägs-koncentrationen i mark vid intag av dricksvatten är 7,2 mg/kg. Detta värde överensstämmer med deterministiskt beräknad koncentration med framtagen modell. Resultaten från simuleringen visar på ett typiskt värde på 8,3 mg/kg. Naturvårdsverkets riktvärde understigs med 34 % och kan anses vara konservativt då ett högre riktvärde beräknas i 66 % av simuleringarna. Resultaten från den tvådimensionella simuleringen visar att 90-percentilen för envägs-koncentrationen ligger mellan 12,44-15,26 mg/kg och medianen ligger på 13,49 mg/kg. Motsvarande resultat i 1D-simuleringen ligger på 13,67 mg/kg vilket är något högre än för 2D-simuleringen och antyder att risken underskattas i 1D-simuleringen och att riktvärdet sätts för högt.

Om riktvärdet för 90-percentilen anses ge ett tillräckligt skydd beräknas ett riktvärde som är 27 % högre än Naturvårdsverkets beräknade riktvärde.



**Figur 13.** Sannolikhetsfördelning för envägsconcentrationen i mark för intag av dricksvatten och MTBE. Figuren visar att Naturvårdsverkets riktvärde understigs i ca 43% av simuleringarna.



**Figur 14.** Resultat från 2D-simulering av envägsconcentrationen i mark vid intag av dricksvatten och MTBE.

Resultaten från känslighetsanalysen visar på liknande resultat som vid beräkning av riktvärden för skydd av grundvatten. De variabler som bidrar mest är det genomsnittliga dagliga intaget av dricksvatten, den hydrauliska konduktiviteten, den hydrauliska gradienten och fördelningskoefficienten mellan jord och vatten (för antimon och trikloreten) och torrdensiteten samt jordens luft- och vattenhalt (för MTBE). Observera att  $\theta_a$  och  $\theta_w$  är beroende av varandra.



**Tabell 9.** Känslighetsanalys genom Spearman Rank Correlation på simuleringar av envägs-koncentrationen i mark vid intag av dricksvatten. Markerade celler visar de största bidragen till osäkerheten i modellen.

Variabel		Antimon	Trikloreteten	MTBE
Genomsnittliga dagliga intaget (Riw)	G7	-0,51	-0,49	-0,27
Hydraulisk konduktivitet (K)	G13	0,43	0,41	0,22
Hydraulisk gradient (i)	G14	0,42	0,41	0,22
Fördelningskoefficient mellan jord och vatten (Kd)	G21	0,50	0,42	0,08
Grundvattenbildning (Ir)	G12	-0,25	-0,25	-0,13
Längd av det förorenade området (L)	G8	0,01	0,01	0,01
Bredd av det förorenade området (W)	G9	-0,02	-0,01	
Torrdensitet ( $\rho_b$ )	G27		-0,21	-0,55
Jordens lufthalt ( $\theta_a$ )*	G25	0,01	0,21	0,52
Jordens vattenhalt ( $\theta_w$ )*	G22	0,01	0,22	0,64
Henrys konstant (H)	G26		0,01	0,01
Akviferens mäktighet (daq)	G15			
Viktsfraktionen organiskt kol i jorden (foc)	G28			
Fördelningsfaktor mellan organiskt kol och vatten (Koc)	G29			

\*  $\theta_a$  och  $\theta_w$  är korrelerad med en faktor 0,8.

## 5 Diskussion och slutsats

Resultaten från beräkningarna har jämförts med 90-percentilen och visar att Naturvårdsverkets riktvärde för skydd av grundvatten och envägs-koncentrationen för intag av dricksvatten samtliga fall är satta åt det konservativa hållet.

Vid beräkning av riktvärdet för skydd av grundvatten och antimon beräknas ett riktvärde som är lägre än Naturvårdsverkets i 66 % av simuleringarna. Detta antyder att Naturvårdsverkets riktvärde kunde ha satts något strängare, även om är marginalerna små. Anledningen är den avrundning uppåt av riktvärdet som utförs i Naturvårdsverkets riktvärdesmodell. Resultaten visar på att konservativa antaganden inte automatiskt leder till mindre risk och att de istället kan ge en falsk säkerhet. Vid jämförelse med 90-percentilen har Naturvårdsverkets riktvärde valts något konservativt.

Stora osäkerheter finns i valet av de sannolikhetsfördelningar som tilldelats modellparametrarna i föreliggande undersökning. En litteraturstudie med rapporter härrörande från olika platser och olika förhållanden har legat till grund för val av fördelning. För vissa parametrar har fördelning antagits, och parametern DOC tilldelades inte någon fördelning, då inga bakgrundsdata kunde hittas. Hur väl använda antaganden stämmer överens med verkligheten är svårt att bedöma men då resultaten inte ligger långt från Naturvårdsverkets egna riktvärden bedöms antagandena inte vara helt orimliga.



Den tvådimensionella simuleringen visade i de flesta fall på en stor osäkerhet och variabilitet hos beräknat riktvärde. Vid jämförelse mellan medianvärdet för 90-percentilen i 2D-simuleringen och 90-percentilen för 1D-simuleringen kan det utläsas om 1D-simuleringen överskattat eller underskattat risken. Vid båda 2D-simuleringarna med antimon (för beräkning av riktvärdet för skydd av grundvatten och för intag av dricksvatten) verkar riktvärdet sättas för högt vid 1D-simuleringen. För trikloreten och MTBE stämde resultaten överens mellan 1D och 2D förutom i fallet MTBE och intag av dricksvatten där 1D-simuleringen underskattar risken (sätter ett för högt riktvärde) jämfört med 2D-simuleringen. Avvikelsen mellan medianvärdet och min/max-värdet jämfördes och visar att i alla simuleringar utom den vid beräkning av riktvärdet för skydd av grundvatten och MTBE är avvikelsen mindre mellan min och median än mellan max och medianen. Detta tolkas som att riktvärdet med större sannolikhet hamnar åt det lägre hållet då tätare mellan kurvorna tyder på mindre osäkerhet.

Vid betraktande av resultaten från känslighetsanalysen observeras att de variabler som påverkar resultatet mest skiljer sig åt mellan MTBE, antimon och trikloreten. Där observeras till exempel att jordens luft- och vattenhalt samt Henrys konstant är av stor betydelse för MTBE. Detta beror sannolikt på att MTBE är ett mycket flyktigt ämne som är lösligt i vatten. För antimon spelar fördelningsfaktorn mellan jord- och vatten stor betydelse. Trikloreten beter sig som ett mellanting mellan antimon och MTBE då trikloreten är mer svårslösligt i vatten än MTBE och binder hårdare till jordpartiklar och organiskt material.

Resultaten från denna typ av studier kan med fördel användas vid fördjupade riskbedömningar med framtagande av platsspecifika riktvärden och inför eventuella efterbehandlingsåtgärder. Genom information om osäkerhet i beräknade riktvärden kan en bedömning om exponeringsläget på platsen utföras och därefter kan det avgöras vilken grad (percentil) av säkerhet som bör uppnås. I de fall där riktvärdet med hjälp av det probabilistiska tillvägagångssättet kan sättas mindre strängt finns hos problemägaren troligtvis chans till minskade efterbehandlingsutgifter samtidigt som risken för exponering av förorening inte blir högre. Resultaten visar också att det i vissa fall, trots konservativa antaganden kan finnas en risk.

Känslighetsanalysen ger information om vilka variabler som bidrar till osäkerheten i beräknat riktvärde och fördjupade undersökningar kan då utföras inriktade på att minska osäkerheten i dessa variabler och på så sätt uppnå ett säkrare resultat till en mindre kostnad. Resultaten från känslighetsanalysen kan



även ge information om hur ett område kan exploateras och eventuella åtgärder för att minska de exponeringsvägar som är mest betydande.

En konsekvens av att negligera osäkerhet och variabilitet kan bli ökade kostnader för efterbehandling i och med att ett större område klassas som förorenat. Med det följer även en ökad miljöpåverkan t.ex. till följd av ökat antal transporter av förorenade massor till efterbehandlingsanläggning och behandling av dessa.

Omfattningen av detta arbete har blivit något mindre än vad som angivits i ansökan till ÅForsk. Det beror på att projektet bytte projektledare och en del extra tid gick åt till inläsning. Fortsättningsvis skulle det därför vara intressant att inkludera även de aspekter som inte hanns med, till exempel att titta på eventuella skillnader mellan modellerna för känslig markanvändning och mindre känslig markanvändning samt att tillämpa det probabilistiska tillvägagångssättet vid beräkning av platsspecifika riktvärden för ett konkret projekt, för att med riktiga siffror kunna se nyttan för beställaren med att använda denna metod.

Vidare skulle angreppssättet kunna användas vid belastningsberäkningar, där föroreningsbelastning från ett förorenat område till ett närbeläget vattendrag beräknas med Naturvårdsverkets riktvärdesmodell men med ett probabilistiskt tillvägagångssätt.

Eventuellt skulle metoden kunna implementeras direkt i Naturvårdsverkets riktvärdesmodell och ge användaren en valmöjlighet att även erhålla beräknade riktvärdens sannolikhetsfördelning.



## 6 Referenser

Allison, J., Allison T., 2005: Partition coefficients for metals in surface water, soil, and waste. Environmental Protection Agency, Office of Research and Development.

Back, P-E., Rosén, B., 2001: Riskanalys av områden där järnvägstrafik berör vattentäkter och andra vattenresurser - Metodutveckling. Statens geotekniska institut. Varia 513.

Hållbar sanering, 2006: Probabilistisk riskbedömning fas 1. Rapport 5532.

Hållbar sanering, 2006: Probabilistisk riskbedömning fas 2. Rapport 5621.

Hållbar sanering, 2007: Klorerade lösningsmedel – Identifiering och val av efterbehandlingsmetod. Rapport 5663.

Kemakta, 2005: Riktvärden för ämnen i grundvatten vid bensinstationer.

Naturvårdsverket, 2008: Tabell över begränsande faktorer för de generella riktvärdena för förorenad mark.

Naturvårdsverket, 2009: Riktvärden för förorenad mark. Modellbeskrivning och vägledning. Rapport 5976.

Sternbeck, J., Palm, A., Kaj, L., 2002: Antimon i Sverige - användning, spridning och miljöpåverkan, IVL.

U.S. Environmental Protection Agency, 1997: Exposure factors handbook.