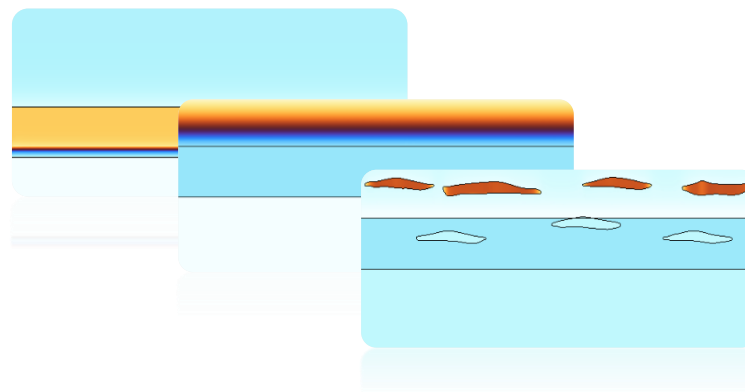
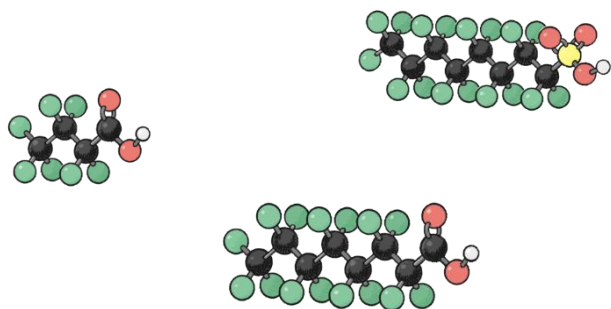
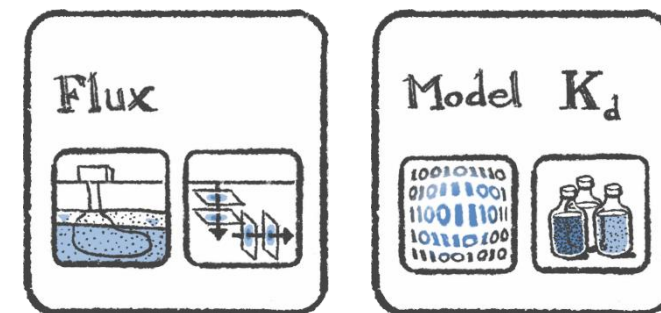




Vertikale PFAS fluxe og deres varighed i forskellige typologier/hydrogeologier – hvad viser modellen?



Henning Wienkenjohann¹, Poul L. Bjerg¹, Annika S. Fjordbøge¹, Klaus Mosthaf¹

¹DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet

Formålet

Hvordan påvirker geologisk heterogenitet og de særlige egenskaber af typologierne de vertikale PFAS fluxe?

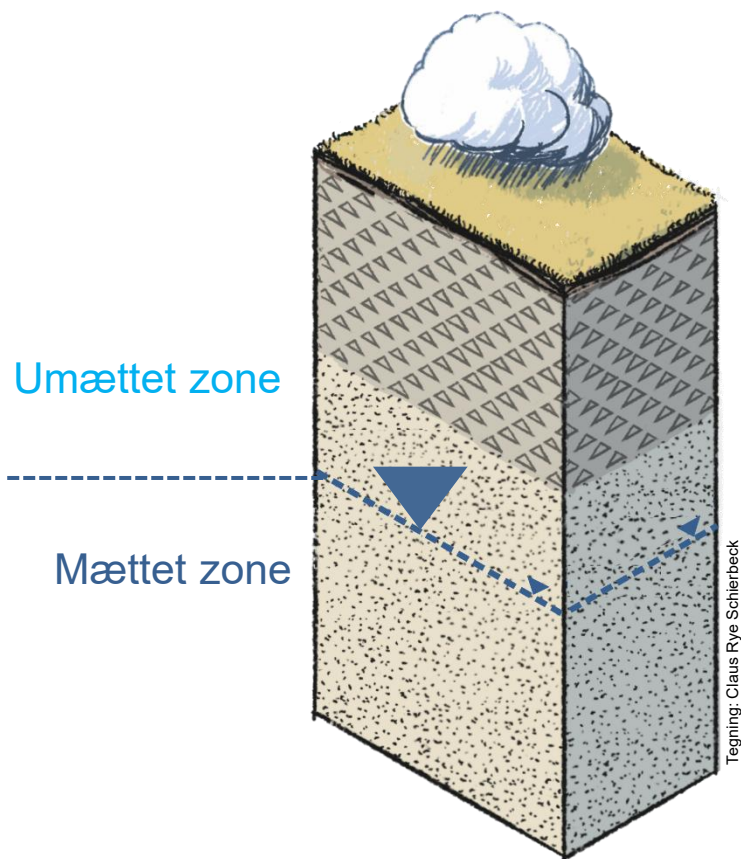
Belysning af transport, tilbageholdelse og varigheden af flux for forskellige PFAS samt udvaskning af PFAS i scenarier.

Simulation af forskellige **heterogene hydrogeologiske scenarier (typologier)** typiske for Sjælland.

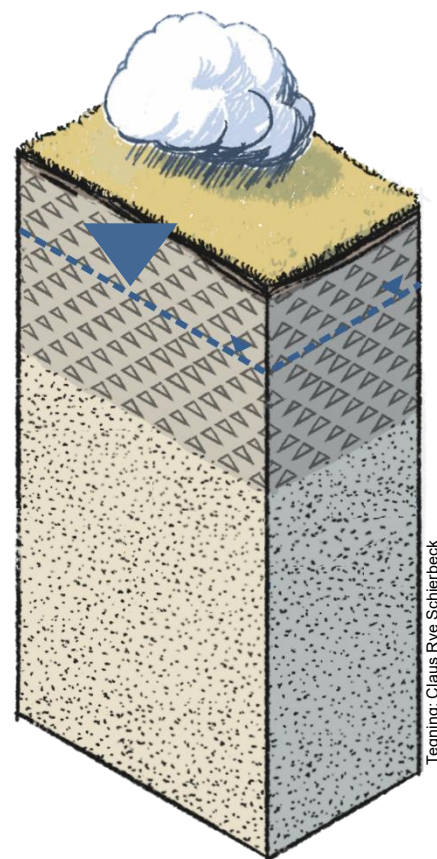
- Strømnings- og stoftransportmodel med COMSOL Multiphysics

Typologier/hydrogeologier

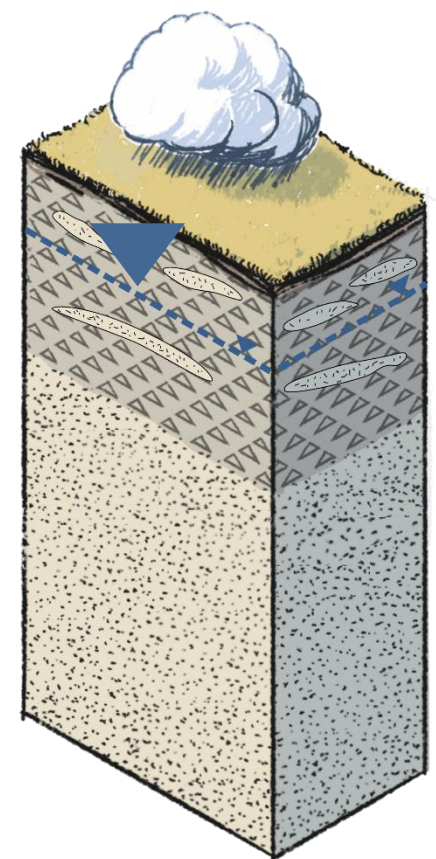
----- Grundvandsspejl  Moræneler  Sand



Typologi 1

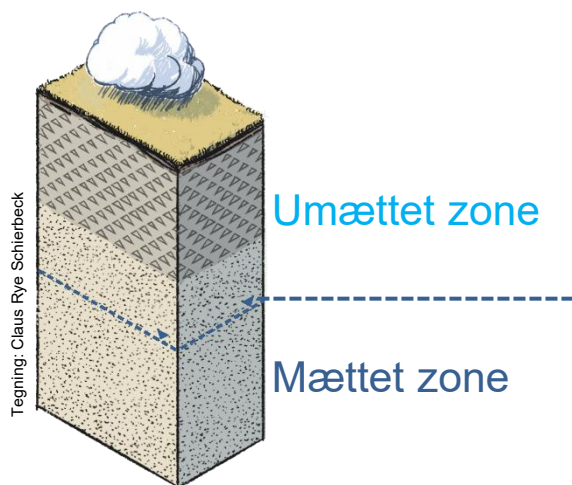


Typologi 2

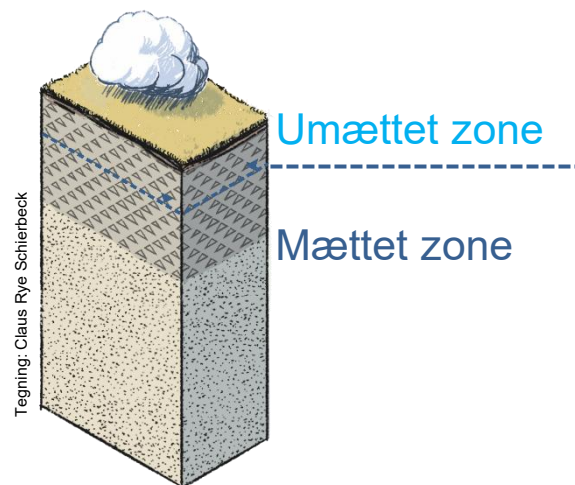
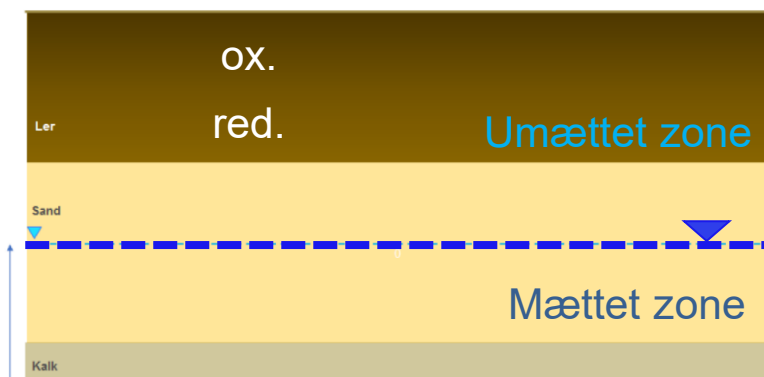


Typologi 3

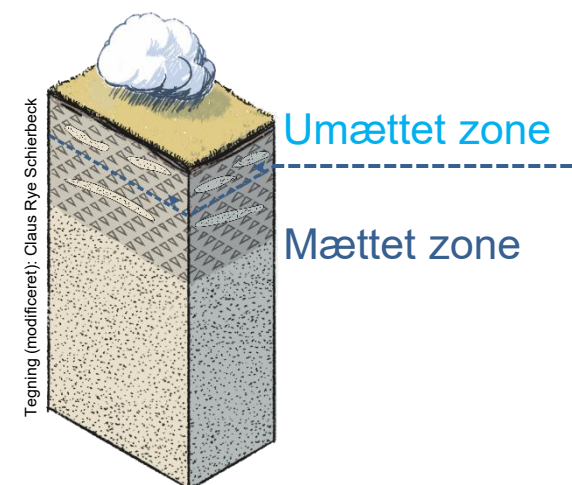
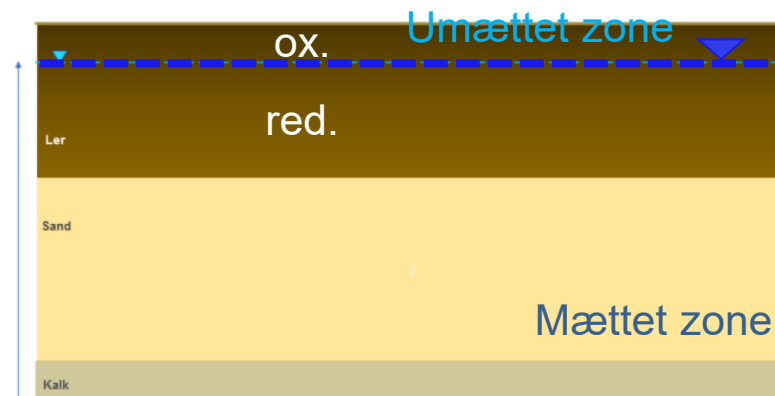
Typologier/hydrogeologier: fra 3D til 2D



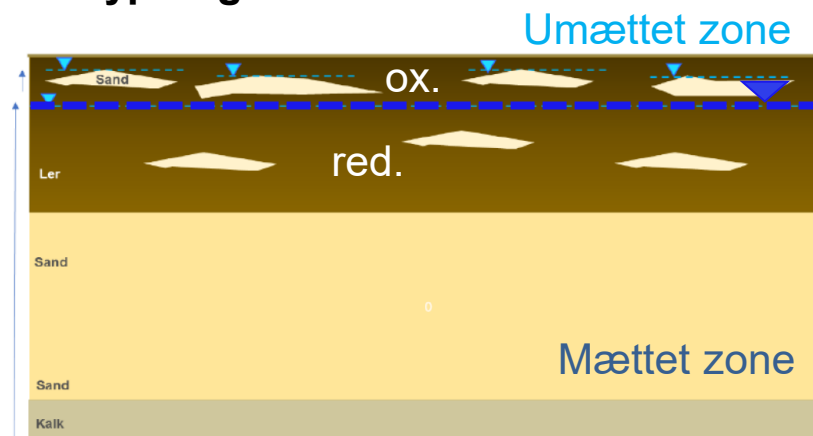
Typologi 1



Typologi 2



Typologi 3



 Moræneler

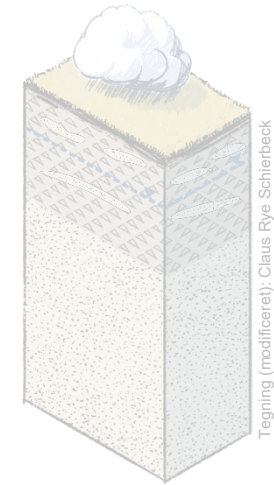
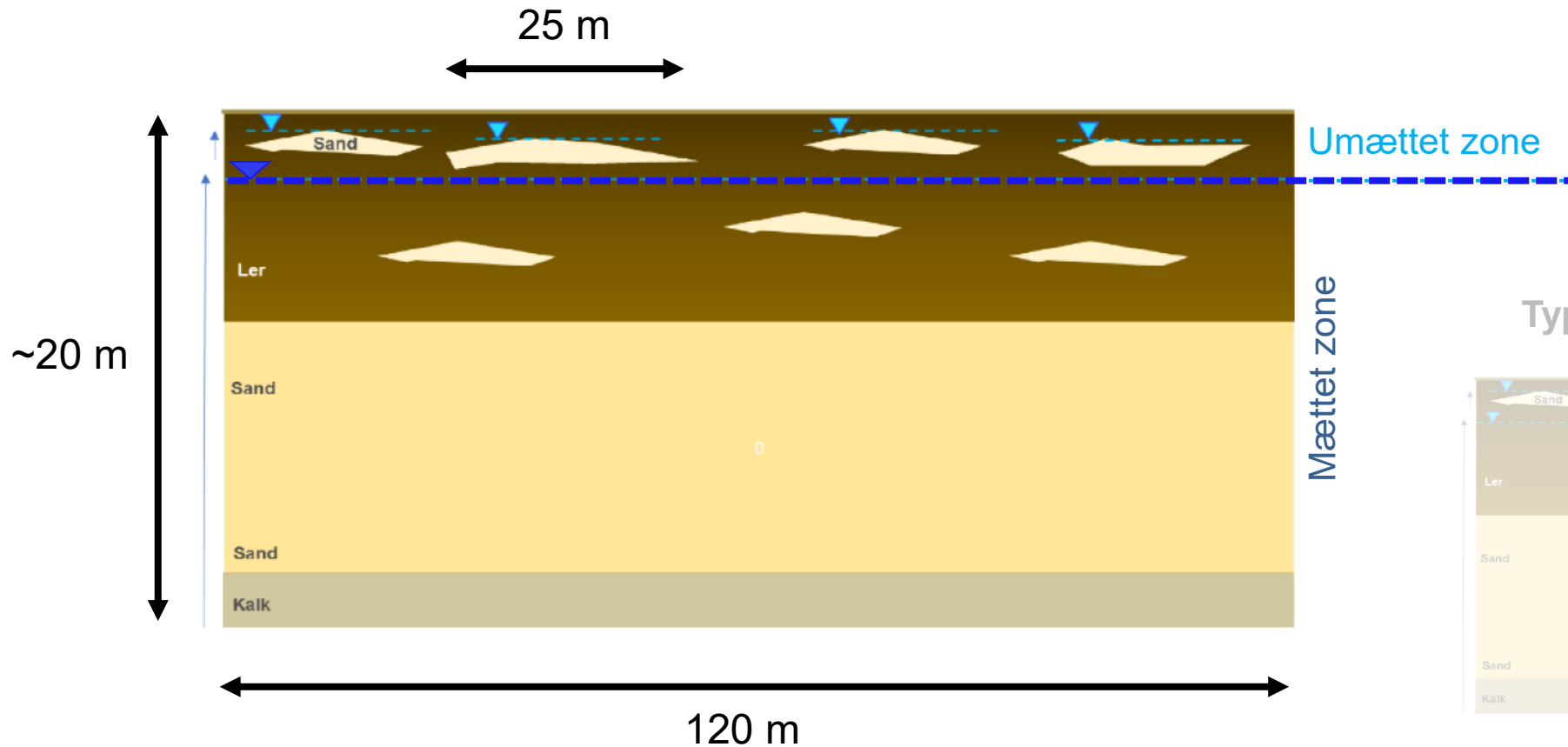
 Smeltevandssand

 Kalk

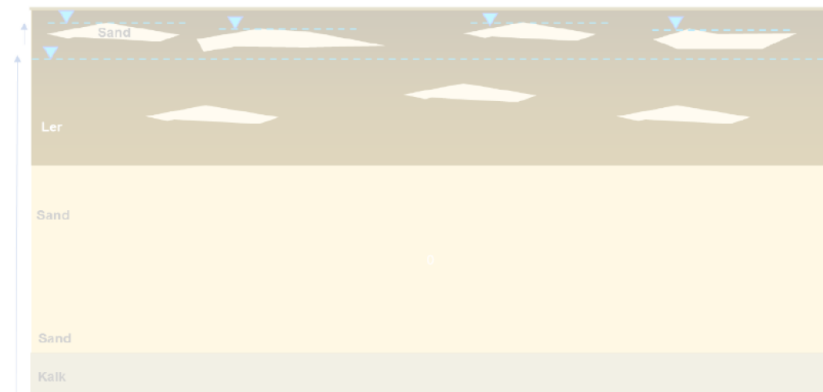
[Region Hovedstaden, 2025](#)

Typologier/hydrogeologier: fra 3D til 2D

Alle typologier: 120 m x ~20 m

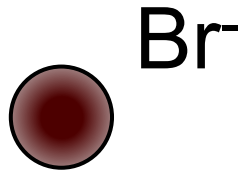


Typologi 3



NIRAS, 2024

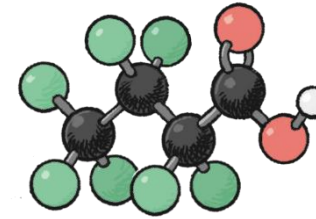
Udvalgte stoffer



Konservativ tracer

- Diffusion/dispersion
- Ingen sorption

PFBA

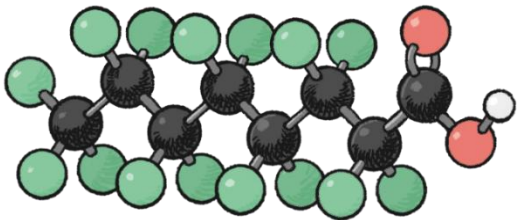


Kædelængde (C4)

- Mobilitet: meget høj
- Sorption: meget lav

Næsten konservativ tracer

PFOA

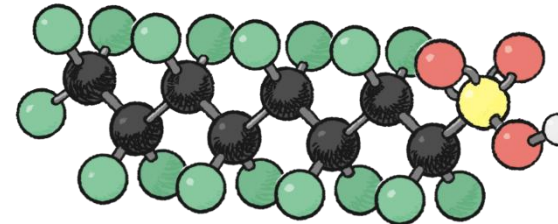


Kædelængde (C8)

- Mobilitet: moderat
- Sorption: moderat

Moderat tilbageholdelse

PFOS



Kædelængde (C8)

- Mobilitet: lav
- Sorption: høj

Kraftig retardation

Parametre

De stofspekifikke og typologispekifikke modelparametrene kommer fra forskellige kilder

Sorption til jord

PFAS-fasefordelingsberegner – "PFASen"

DMR har for Region Hovedstaden og med fagligt input og sparring fra DTU Sustain udarbejdet et værktøj "PFASen" til beregning af fasefordelingen af PFAS.

ARBEJDSGRUPPEN BAG PFASen

Per Løll, DMR A/S, pl@dmr.dk
 Maria Hag, Region Hovedstaden, maria.hag@regionh.dk
 Poul L. Rørg, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, pl@dtu.dk
 Annika Fjordbøge, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, af@dtu.dk
 Laura Mørning, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, laura@dtu.dk
 Klaus Møsthauf, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, km@dtu.dk
 Henning Wierskjær, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, hwa@dtu.dk

Desuden har en kreds af rådgivere og phd studerende bidraget med ideer til design og kvalitetssikring af beregningerne i værktøjet.

Forkortelse	PFBA	PFBS	PFPeA	PFHxA	PFPeS	PFHpA	PFHxS	6:2 FTS	PFOA
# fluorerede C-atomer	3	4	4	5	5	6	6	6	7
V_m (cm ³ /mol)	127	162	155	182	190	210	217	250	237
M_w (g/mol)	214	300	264	314	350	364	400	428	414
K_{ow} - gns. (cm)	2.06E-05	9.51E-05	7.00E-05	2.28E-04	3.24E-04	7.76E-04	1.05E-03	4.47E-03	2.53E-03
K_{ow} - høj (cm)	1.04E-04	5.65E-04	4.03E-04	1.49E-03	2.19E-03	5.75E-03	8.07E-03	3.98E-02	2.12E-02
K_{ow} - lav (cm)	4.06E-06	1.60E-05	1.22E-05	3.50E-05	4.79E-05	1.05E-04	1.38E-04	5.01E-04	3.01E-04

Bedste bud K_d (L/kg TS)	nr.	PFBA	PFBS	PFPeA	PFHxA	PFPeS	PFHpA	PFHxS	6:2 FTS	PFOA
# fluorerede C-atomer		3	4	4	5	5	6	6	6	7
U2 → Muld (foc > 0,01)	1	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	7.85E-02	1.27E-01	4.37E-01	1.14E+00	7.06E-01
Pyld (foc < 0,01)	2	3.98E-02	3.98E-02	3.98E-02	3.98E-02	3.80E-02	5.63E-02	1.55E-01	3.40E-01	2.30E-01
Pyld (foc > 0,01)	3	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	7.85E-02	1.27E-01	4.37E-01	1.14E+00	7.06E-01
Moræneler, ox. (U2)	4	2.51E-02	2.51E-02	2.51E-02	2.51E-02	2.51E-02	2.51E-02	6.17E-02	1.09E-01	8.19E-02
Moræneler, red. (U2)	5	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	6.24E-02	9.33E-02	2.63E-01	5.89E-01	3.94E-01
Smeltevandssand (foc < 0,002)	6	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	9.66E-02	6.80E-02	6.80E-02
Sand i moræneler (U2)	7	3.98E-02	3.98E-02	3.98E-02	3.98E-02	3.80E-02	5.63E-02	1.55E-01	3.40E-01	2.30E-01
M2 → Moræneler, ox. (M2)	8	2.51E-02	2.51E-02	2.51E-02	2.51E-02	2.51E-02	2.51E-02	6.17E-02	1.09E-01	8.19E-02
Moræneler, red. (M2)	9	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	6.24E-02	9.33E-02	2.63E-01	5.89E-01	3.94E-01
Sand i moræneler (M2)	10	3.98E-02	3.98E-02	3.98E-02	3.98E-02	3.80E-02	5.63E-02	1.55E-01	3.40E-01	2.30E-01
Magasinsand (foc < 0,002)	11	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	9.66E-02	6.80E-02	6.80E-02
Kalk, pores	12	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02	9.66E-02	6.80E-02	6.80E-02

K_d data: Annika S. Fjordbøge

PFAS-fasefordelingsberegner – [PFASen](#)

Hydrauliske

PFAS-fasefordelingsberegner – "PFASen"

DMR har for Region Hovedstaden og med fagligt input og sparring fra DTU Sustain udarbejdet et værktøj "PFASen" til beregning af fasefordelingen af PFAS.

ARBEJDSGRUPPEN BAG PFASen

Per Løll, DMR A/S, pl@dmr.dk
 Maria Hag, Region Hovedstaden, maria.hag@regionh.dk
 Poul L. Rørg, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, pl@dtu.dk
 Annika Fjordbøge, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, af@dtu.dk
 Laura Mørning, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, laura@dtu.dk
 Klaus Møsthauf, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, km@dtu.dk
 Henning Wierskjær, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, hwa@dtu.dk

Desuden har en kreds af rådgivere og phd studerende bidraget med ideer til design og kvalitetssikring af beregningerne i værktøjet.

PFAS-fasefordelingsberegner – [PFASen](#)

+ data fra delprojekt D2

Sorption til luft-vand grænseflade

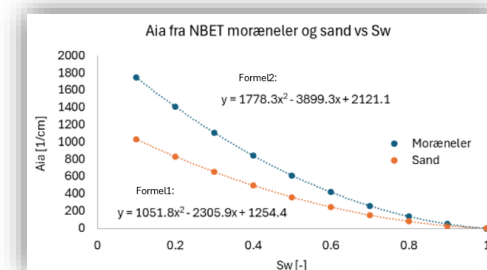
PFAS-fasefordelingsberegner – "PFASen"

DMR har for Region Hovedstaden og med fagligt input og sparring fra DTU Sustain udarbejdet et værktøj "PFASen" til beregning af fasefordelingen af PFAS.

ARBEJDSGRUPPEN BAG PFASen

Per Løll, DMR A/S, pl@dmr.dk
 Maria Hag, Region Hovedstaden, maria.hag@regionh.dk
 Poul L. Rørg, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, pl@dtu.dk
 Annika Fjordbøge, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, af@dtu.dk
 Laura Mørning, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, laura@dtu.dk
 Klaus Møsthauf, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, km@dtu.dk
 Henning Wierskjær, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, hwa@dtu.dk

Desuden har en kreds af rådgivere og phd studerende bidraget med ideer til design og kvalitetssikring af beregningerne i værktøjet.



PFAS-fasefordelingsberegner – [PFASen](#)

Strømningsmodel

- Vandstrømning fra **Richards ligning**: $\frac{\partial \theta}{\partial t} + -\nabla \cdot (K(\theta) \nabla h) = W$
Richards, L.A. (1931)

- Vandindhold – kapillartryk fra **van Genuchten ligning**

$$\theta = \begin{cases} \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{[1 + \alpha |\psi|^n]^m}, & \psi \geq 0 \\ \theta_s & \psi < 0 \end{cases} \quad \psi = P_c / \rho g$$

van Genuchten, M.Th. (1980)

- Umættet hydraulisk ledningsevne via **Mualem**

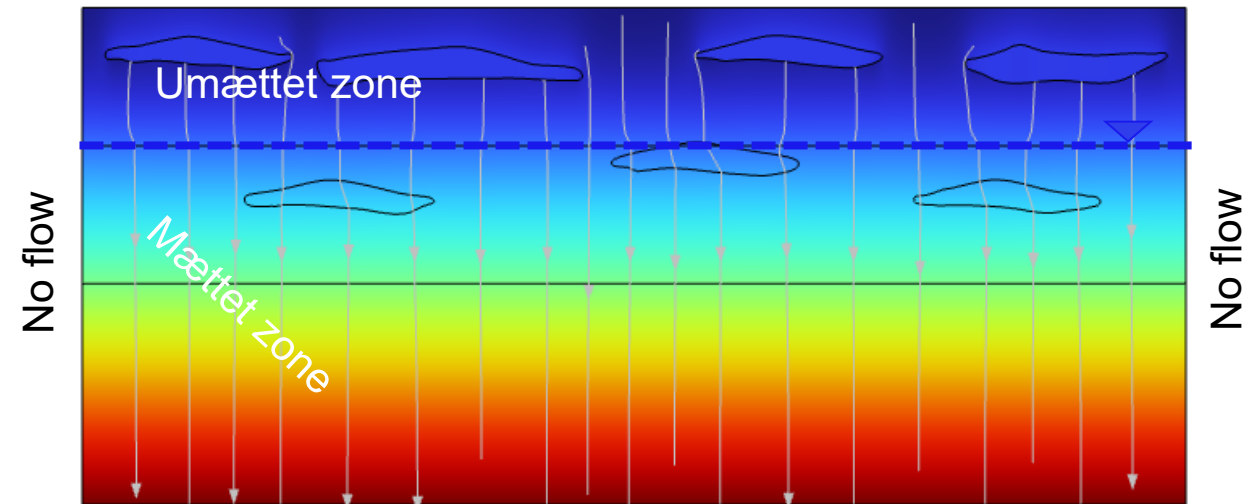
$$K(\theta) = k_r \cdot K_{sat}$$

$$K(\theta) = S_e^{1/2} \left(1 - \left(1 - S_e^{1/m} \right)^m \right)^2 \cdot K_{sat}$$

- Med den effektive mætning $S_e = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} = \frac{\theta_w - \theta_{wr}}{1 - \theta_{wr}}$



Neumann randbetingelse: 140 mm/år



Dirichlet randbetingelse: grundvandsspejl

Transportmodel

Transportligninger med lagring, advektion, dispersion/diffusion, kilder og dræn samt nedbrydning (fx Guo et al., 2020):

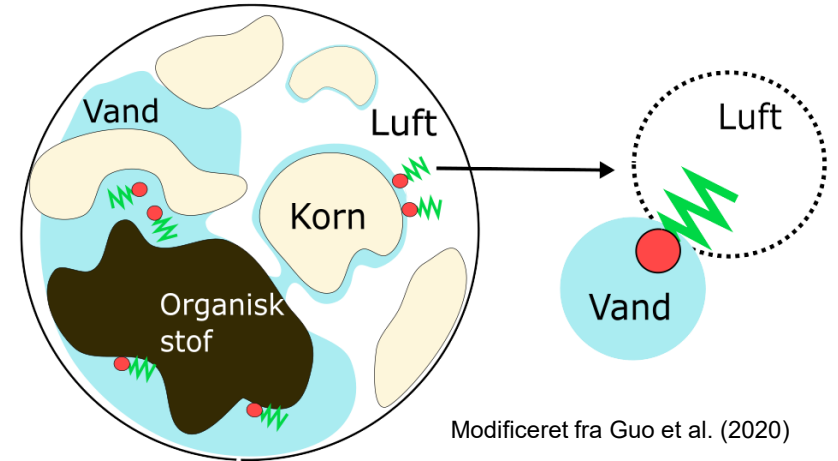
$$\frac{\partial(\theta R c)}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial c_s}{\partial t} + \frac{\partial c_{ia}}{\partial t} + \nabla \cdot (\theta c \vec{v}) - \nabla \cdot (\theta \vec{D} \nabla c) = Q + \theta k c$$

$$c_{ia} = A_{ia} \cdot K_{ia} \cdot c_w$$

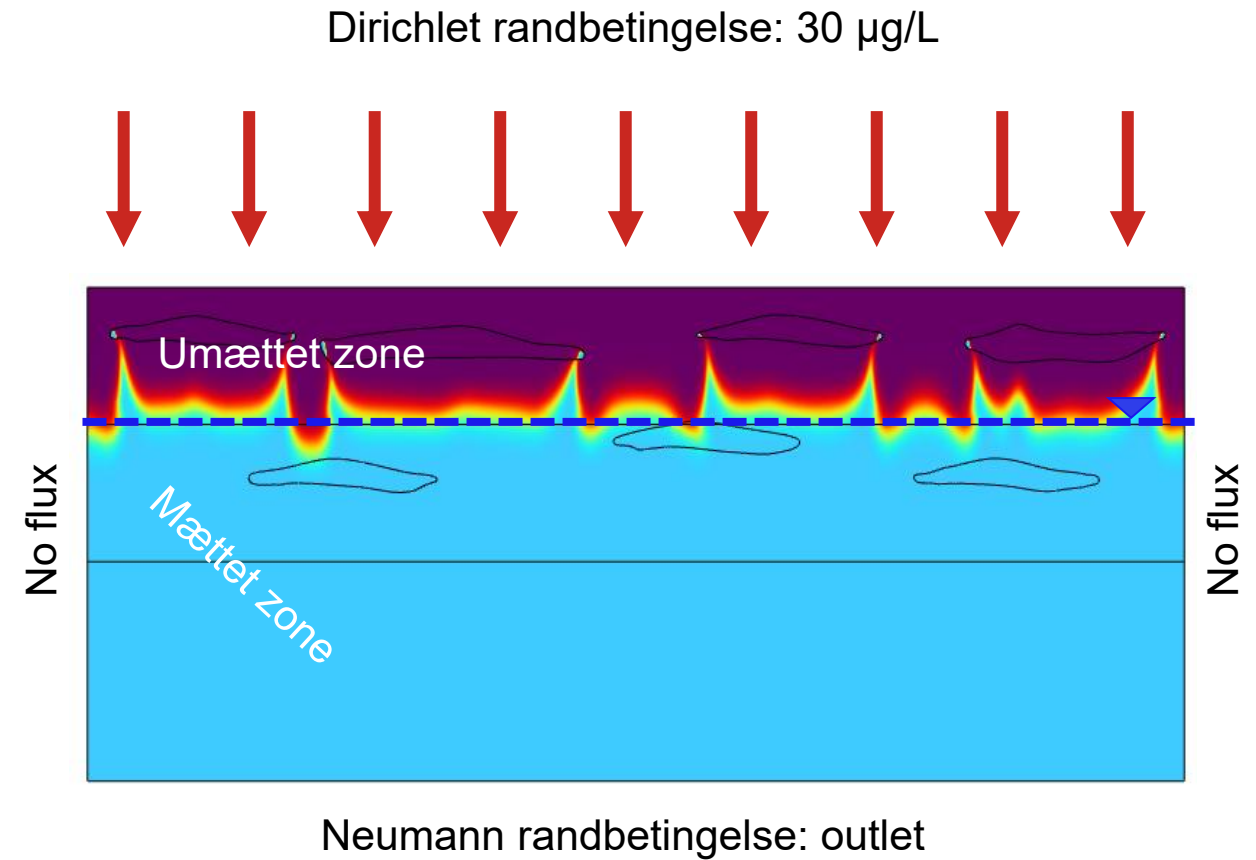
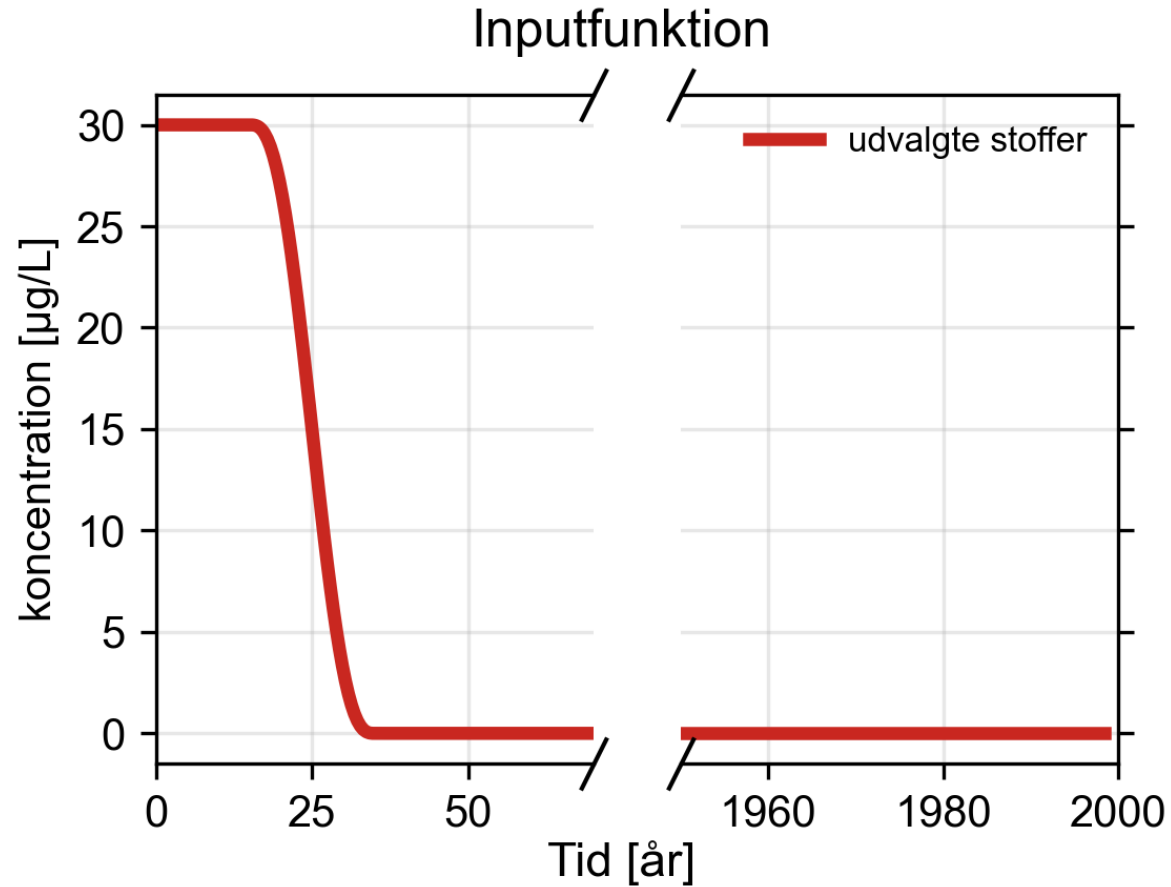
$$R = 1 + \frac{K_d \cdot \rho_b}{\theta_w} + \frac{K_{ia} \cdot A_{ia}}{\theta_w}$$

Sorption til jord
Adsorption til luft-vand-grænseflade

- $K_d \rightarrow$ Fordelingskoefficient til jord (L/kg)
- $\theta_w \rightarrow$ Vandindhold (-)
- $\rho_b \rightarrow$ Rumvægt - bulk density (g/cm³)
- $K_{ia} \rightarrow$ Sorptionskoefficient til luft-vand grænsefladen (cm)
- $A_{ia} \rightarrow$ Luft-vand grænsefladearealet (1/cm)



Transportmodel

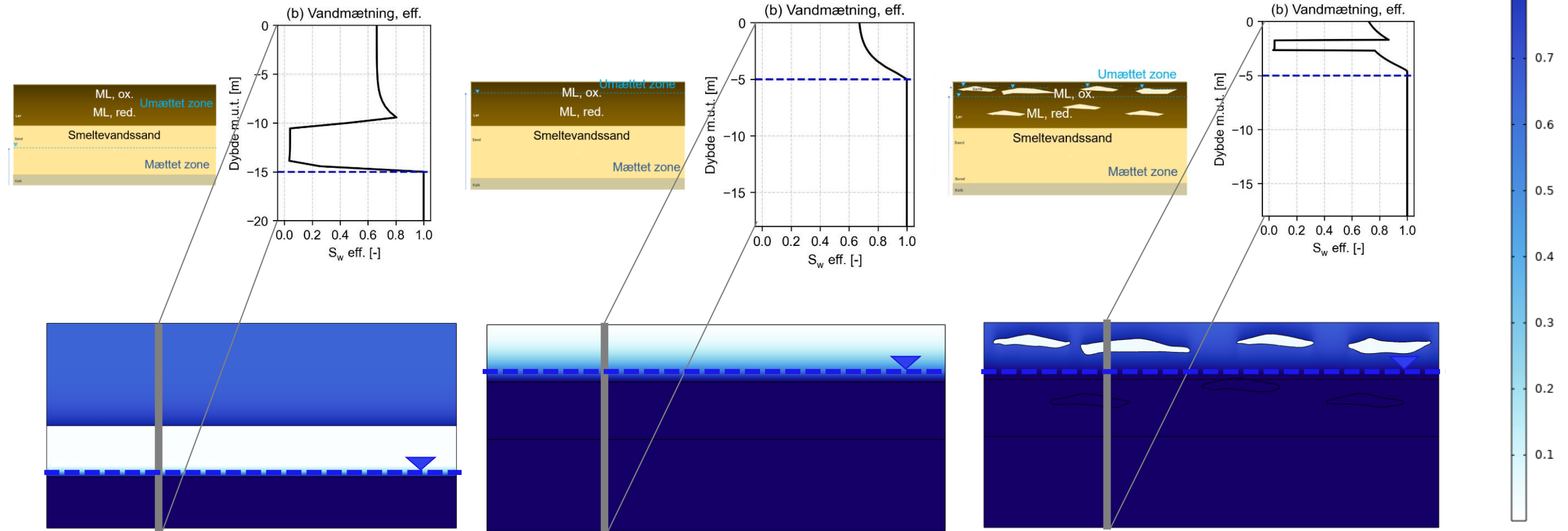


Vandmætning (eff.) i de forskellige typologier

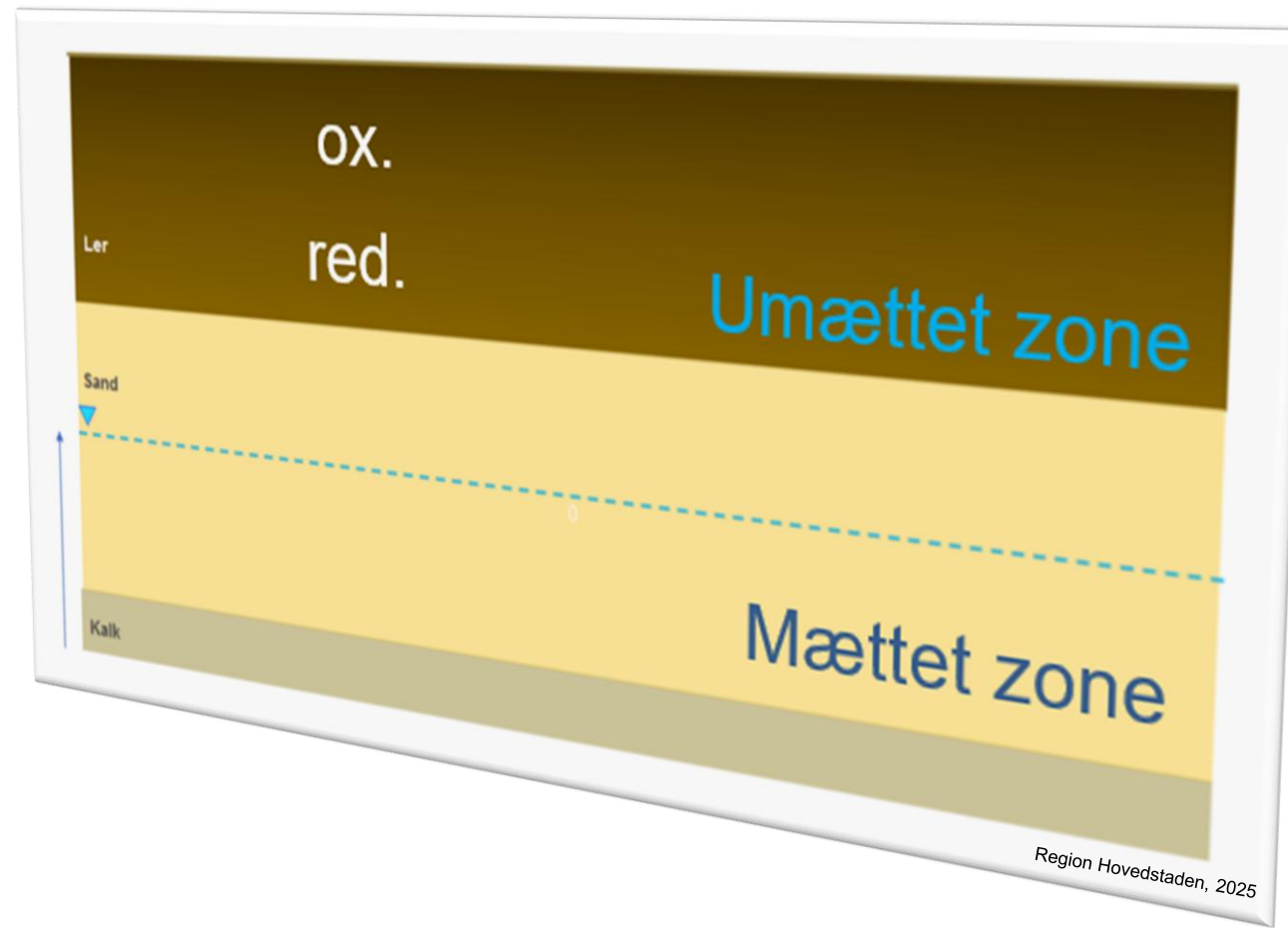
Typologi 1

Typologi 2

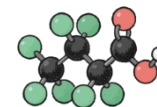
Typologi 3



Typologi 1: moræneler, smeltevandssand, dybt gvspejl



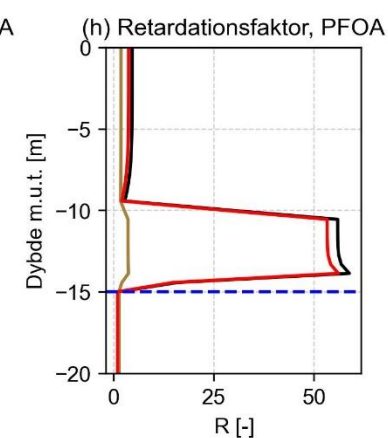
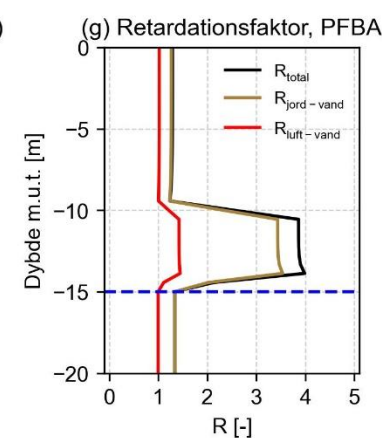
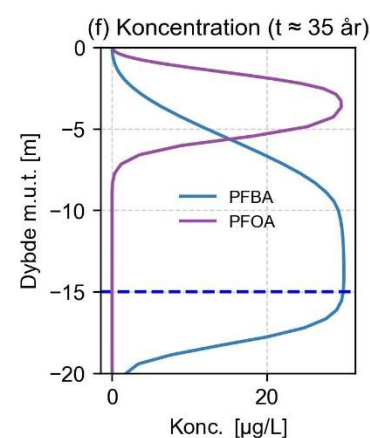
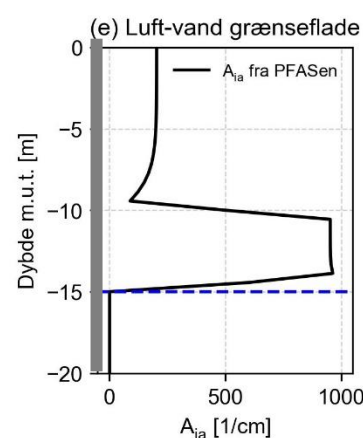
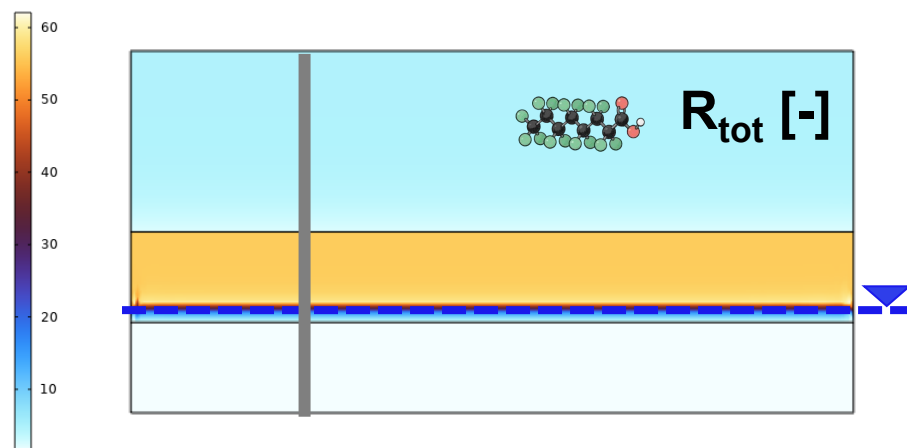
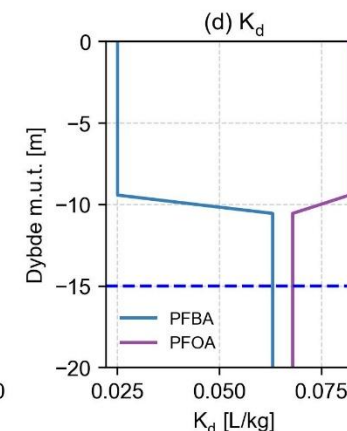
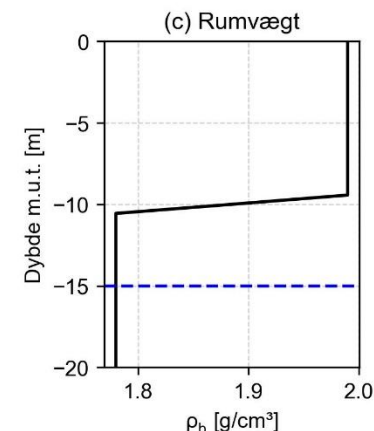
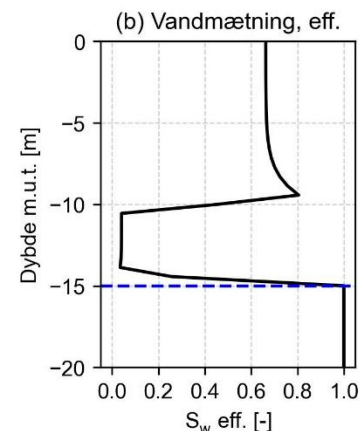
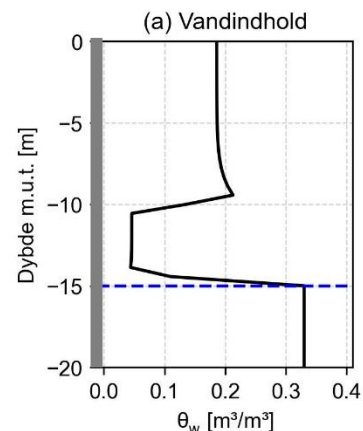
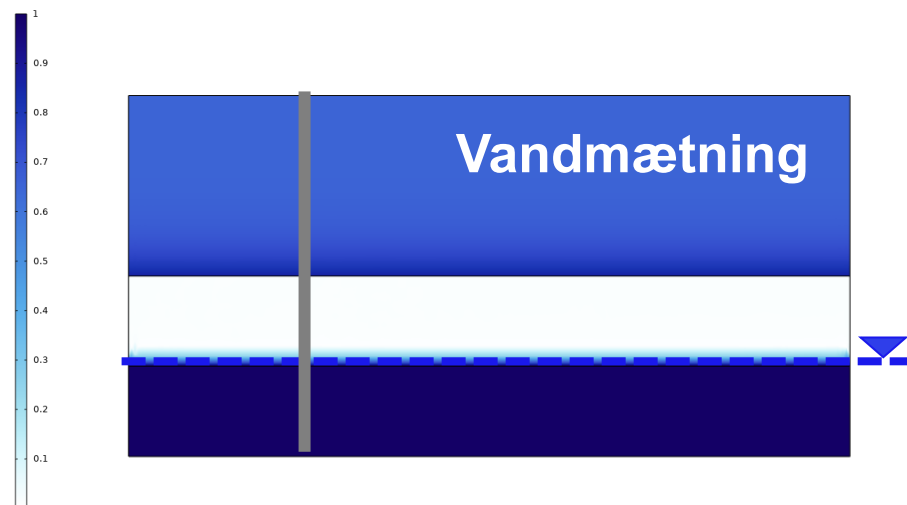
Typologi 1: jordprofiler



PFBA



PFOA

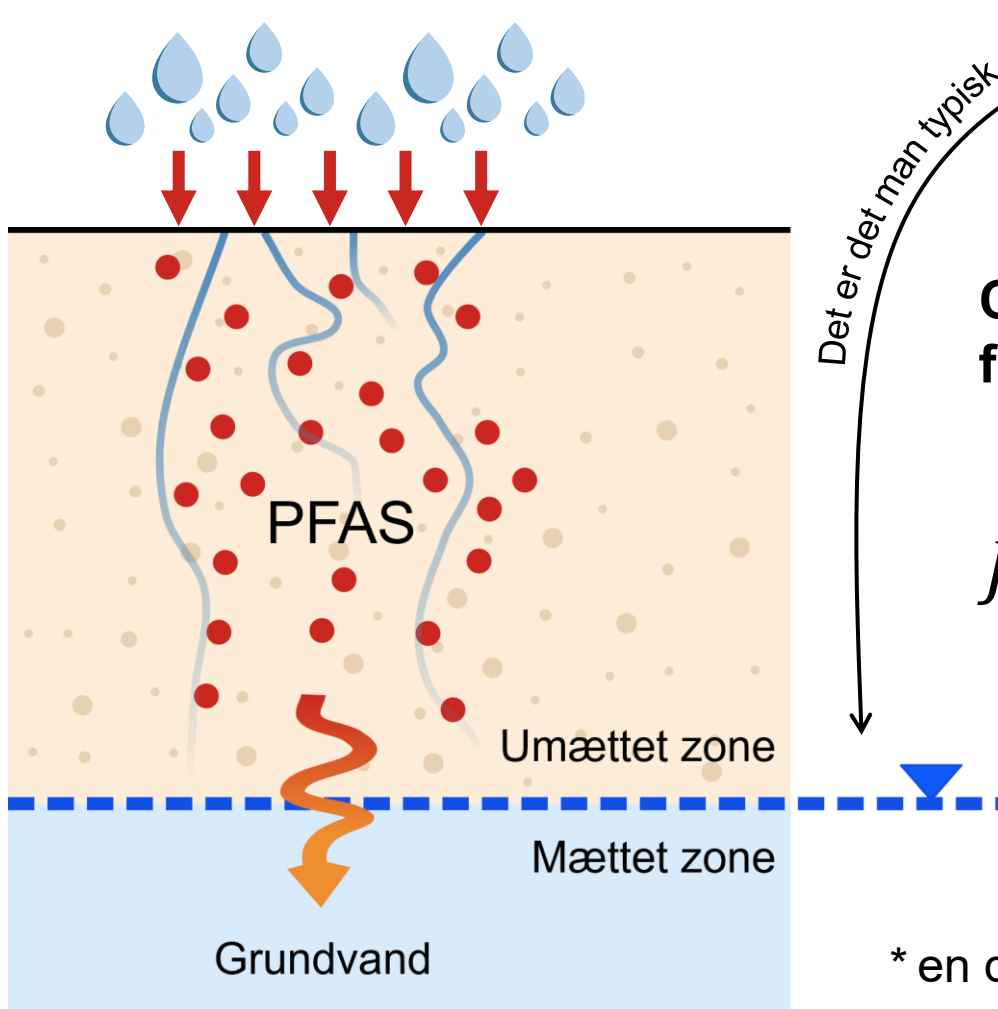


- Vandindhold og vandmætning varierer over dybden

- Påvirker retardation og derfor PFAS fluxen

Hvor bestemmes PFAS flux?

Fluxen *kan** beregnes gennem kontrolplanet ved grundvandsspejl .

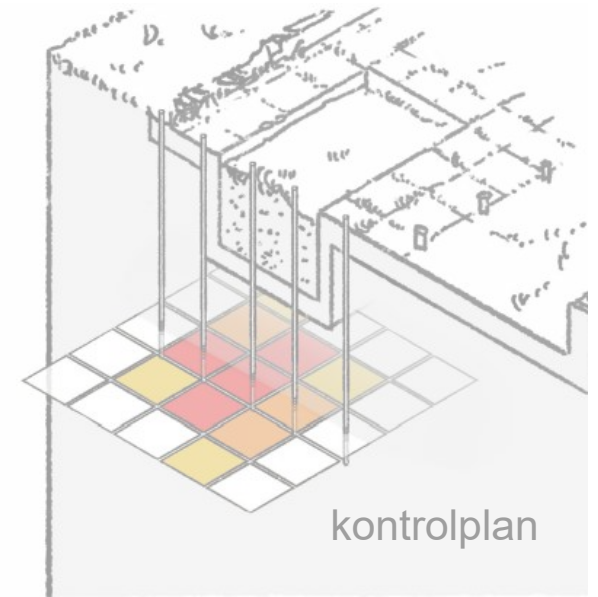


Det er det man typisk gør

COMSOL: integral over total flux igennem kontrolplanet

$$J = \int_A (\mathbf{q}c - \theta_v \mathbf{D} \nabla c) \cdot \mathbf{n}$$

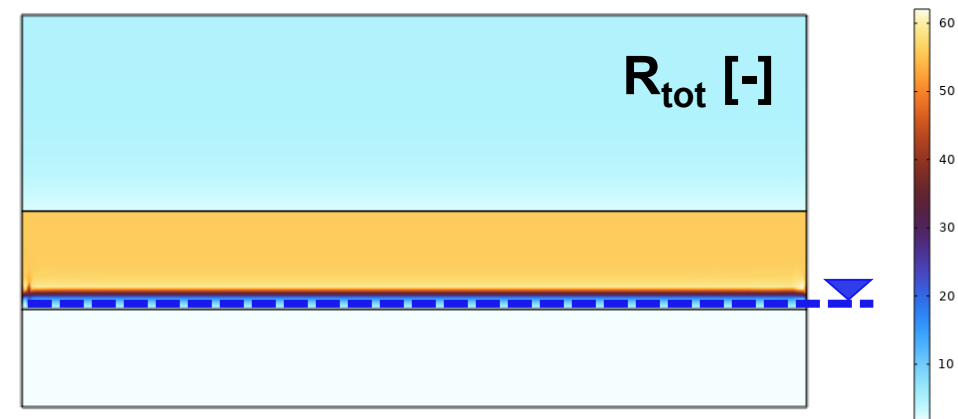
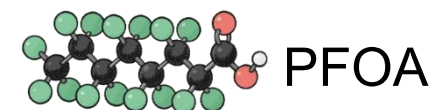
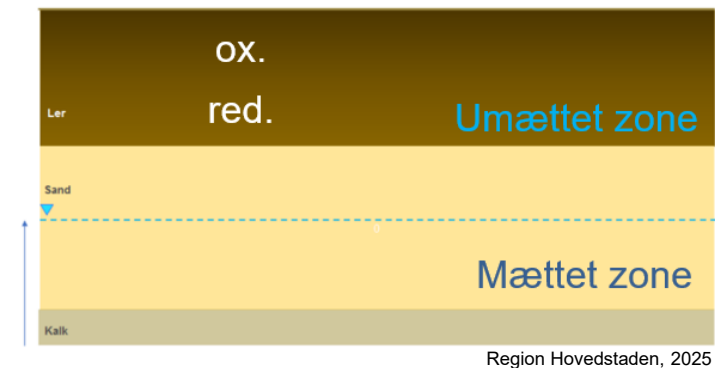
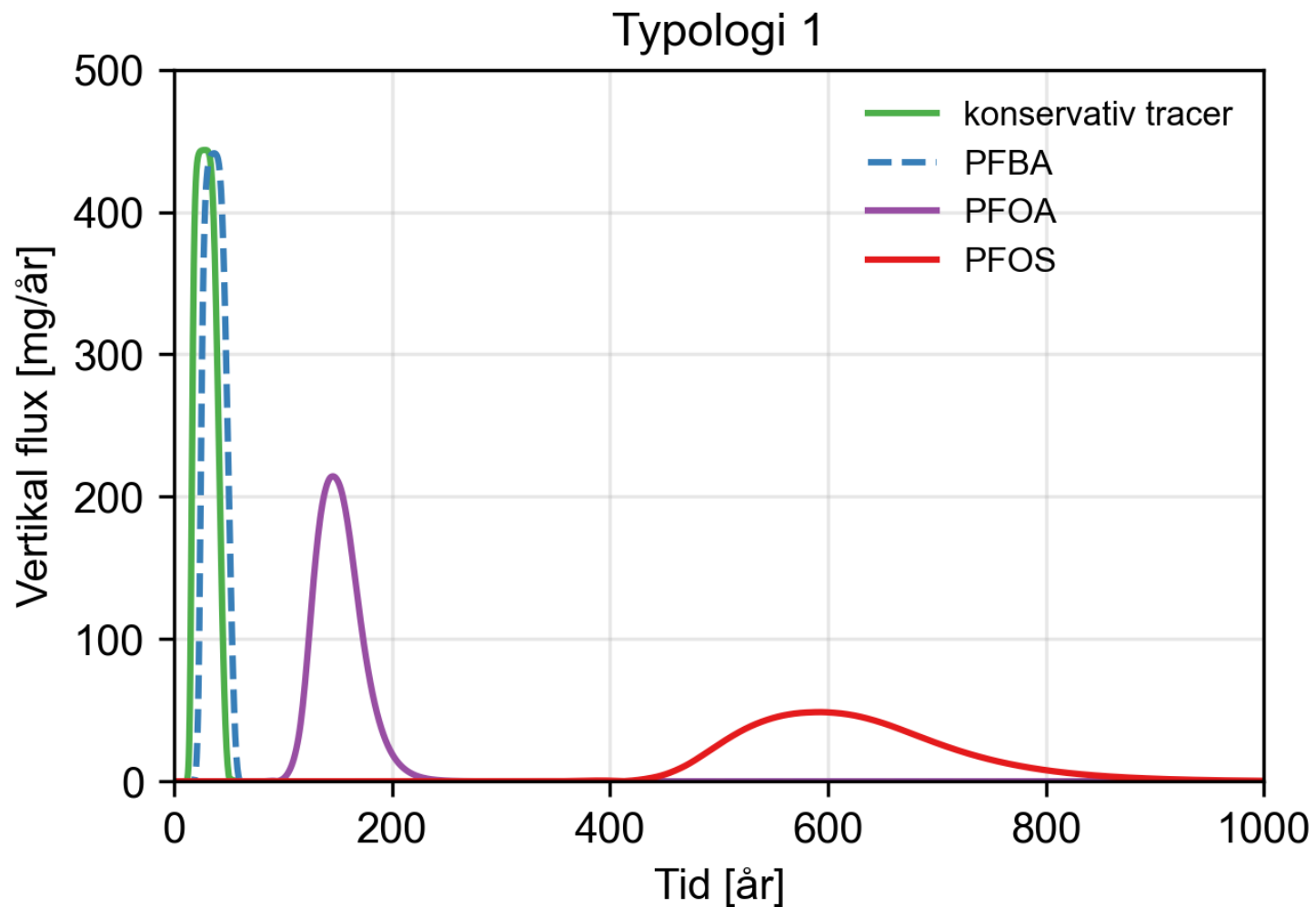
CMD metode (J=CAI)



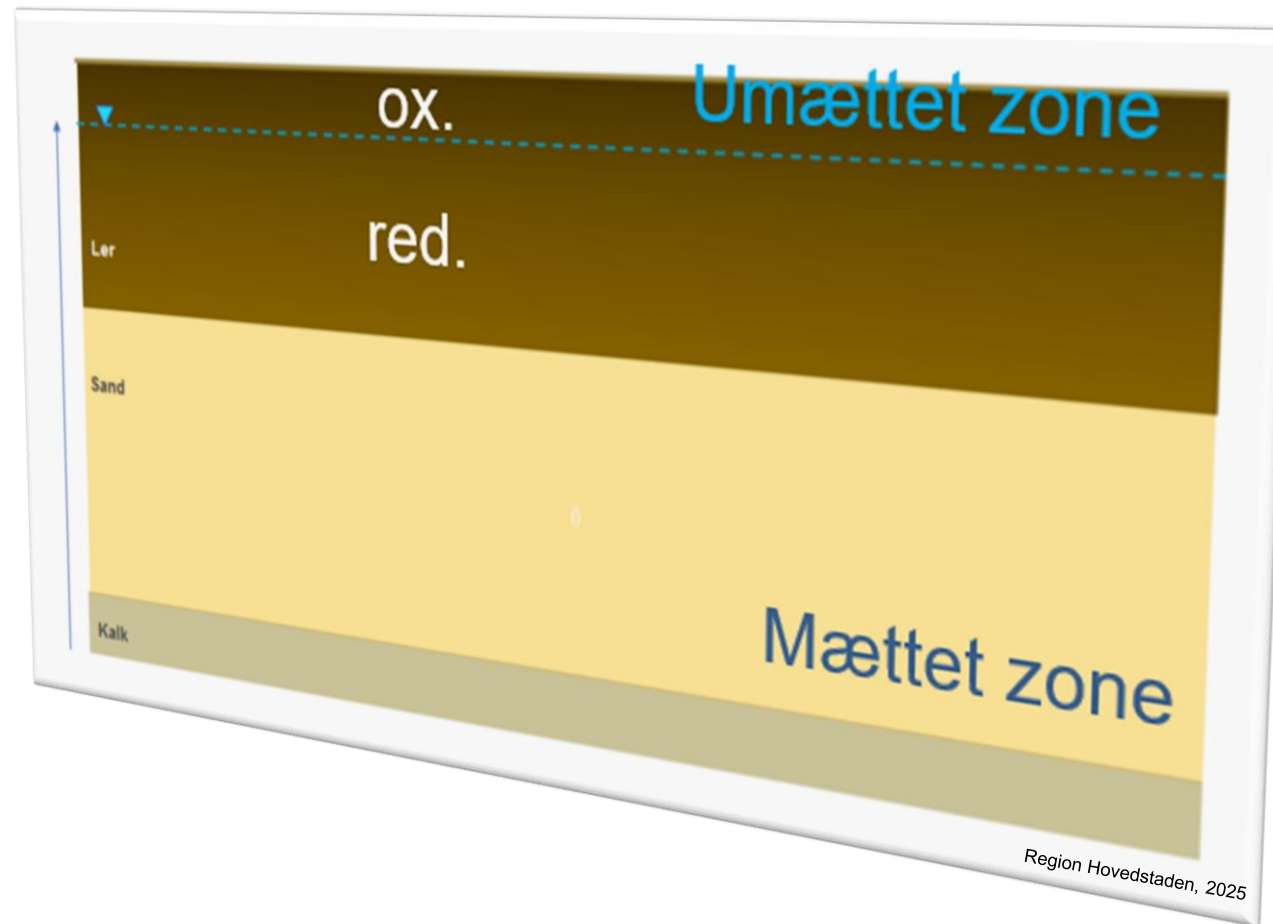
Region Hovedstaden, 2026

* en del af projekts formål er at vurdere, HVOR fluxen skal beregnes

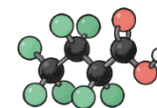
Typologi 1: Vertikal flux til grundvand



Typologi 2 : moræneler, smeltevandssand, højt gvspejl



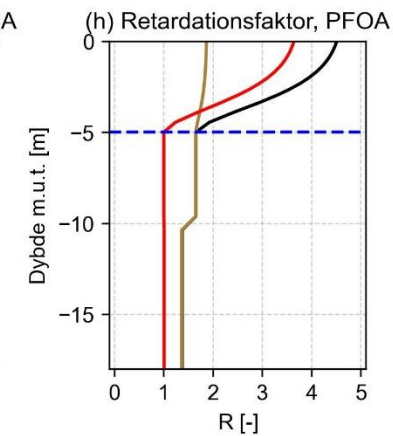
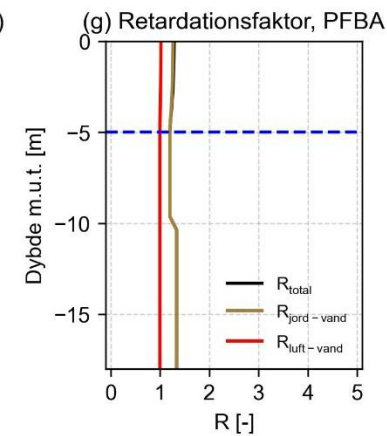
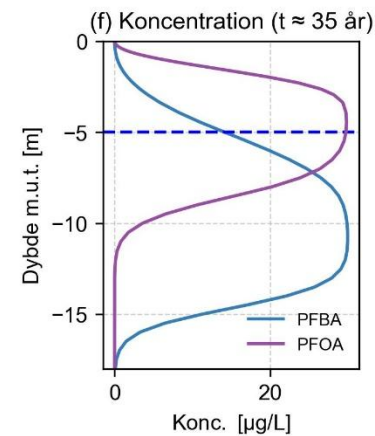
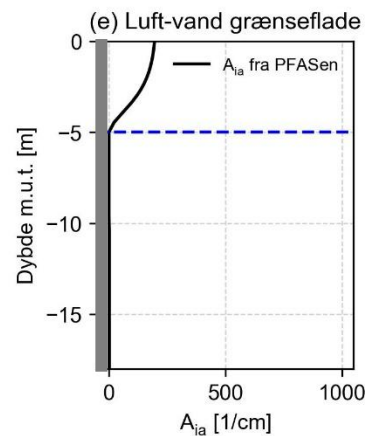
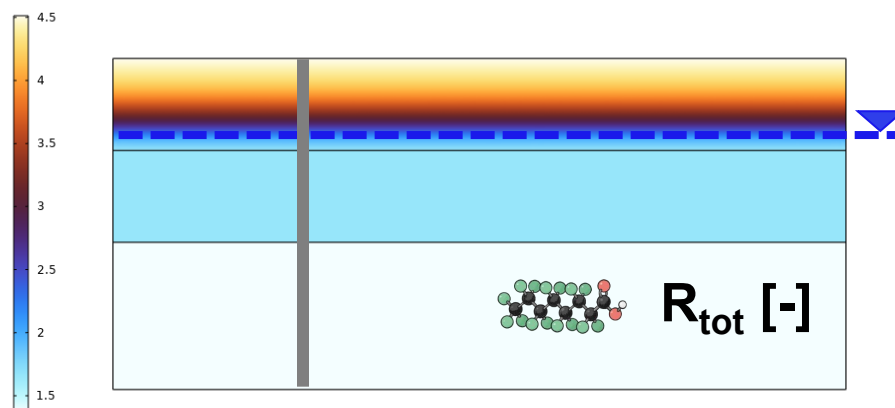
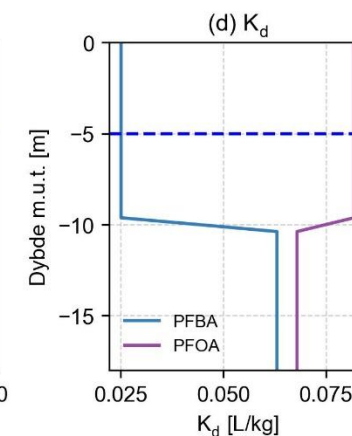
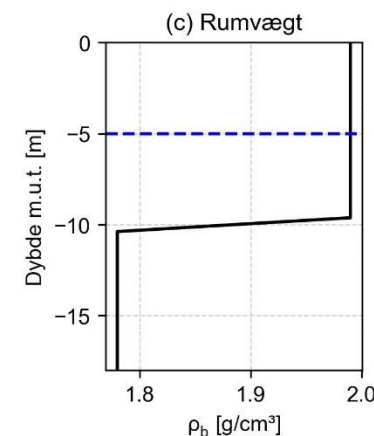
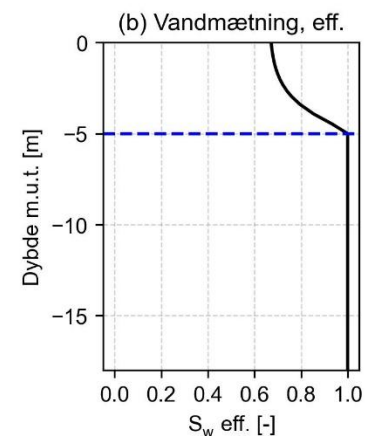
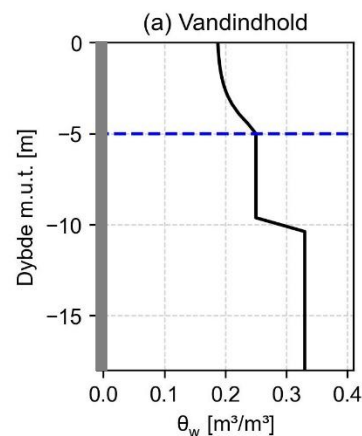
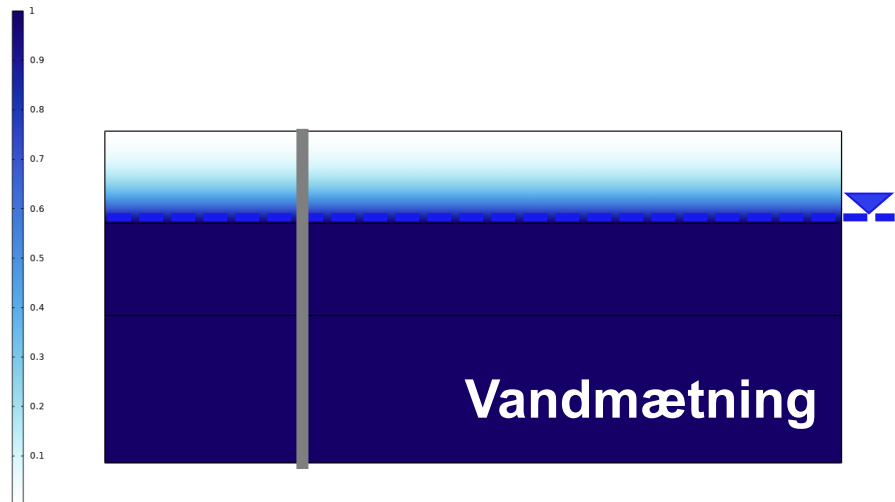
Typologi 2: jordprofiler



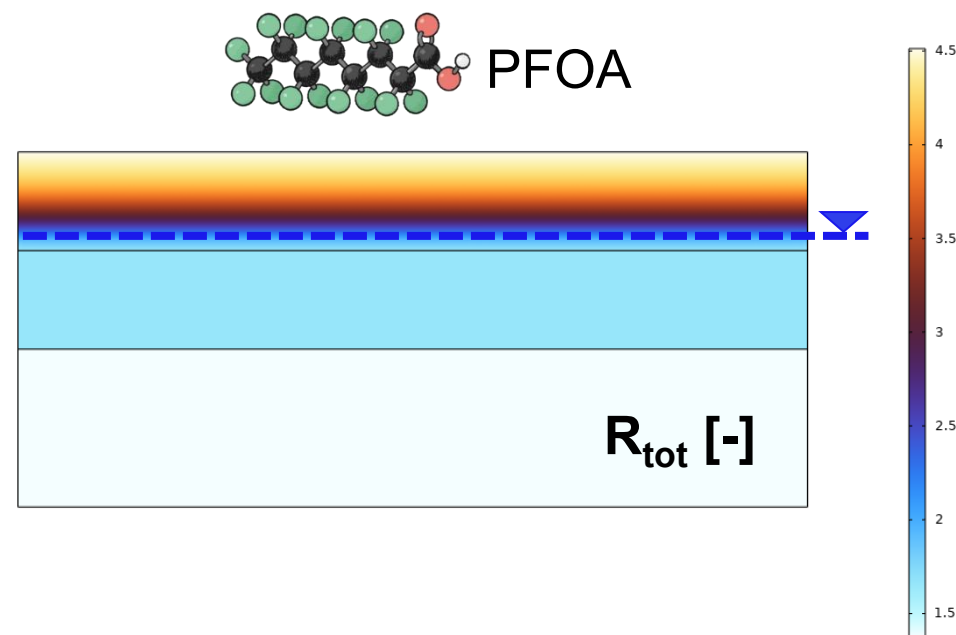
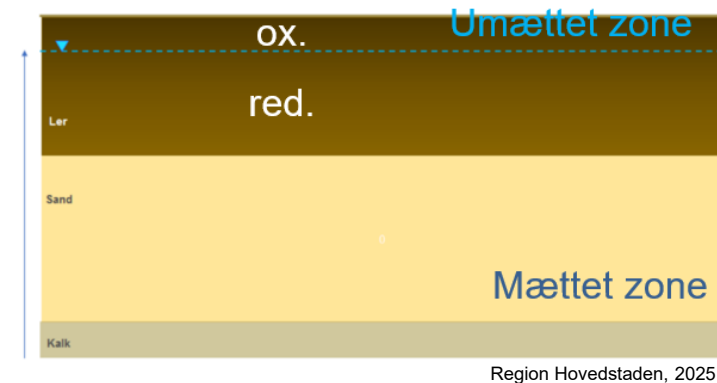
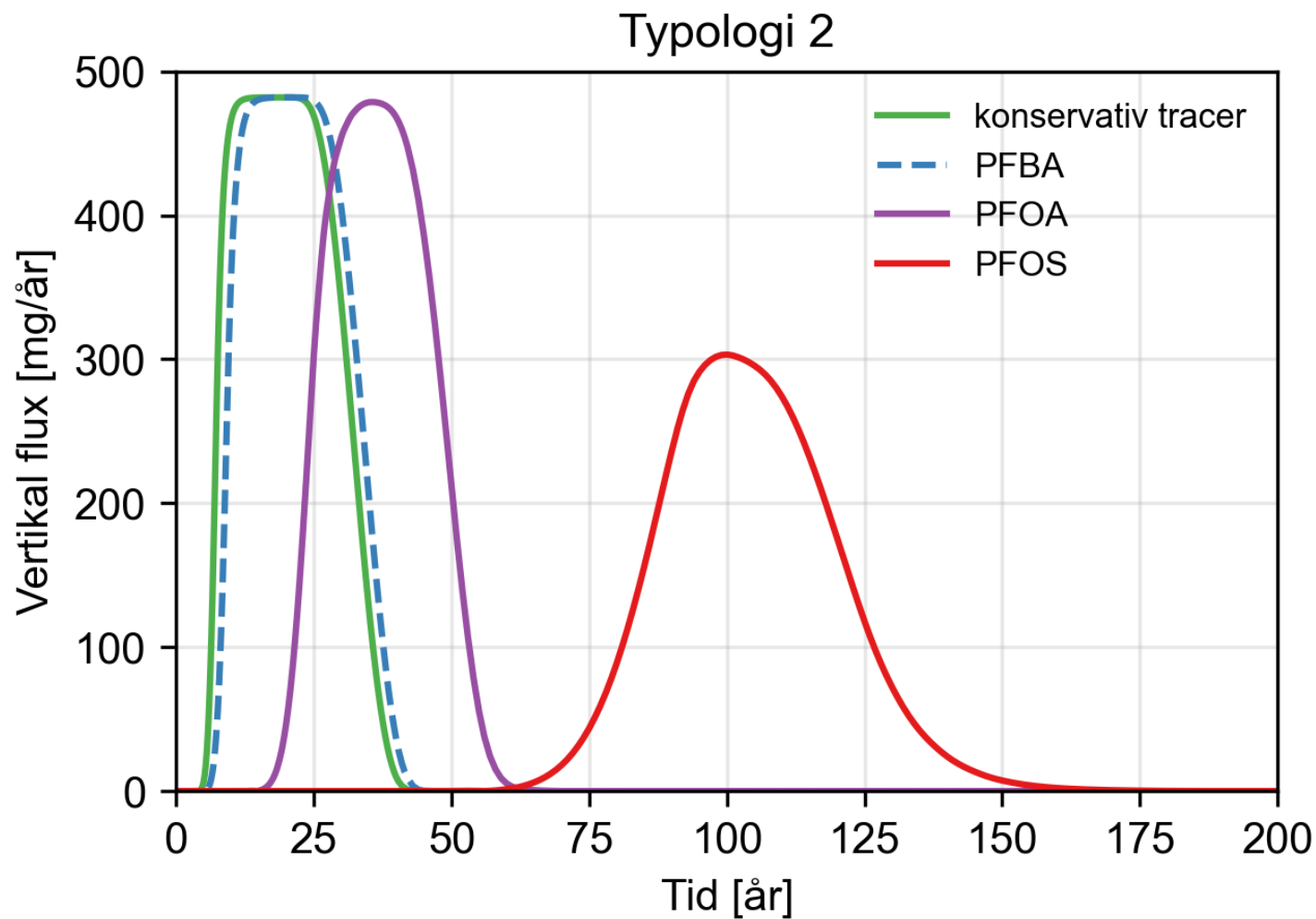
PFBA



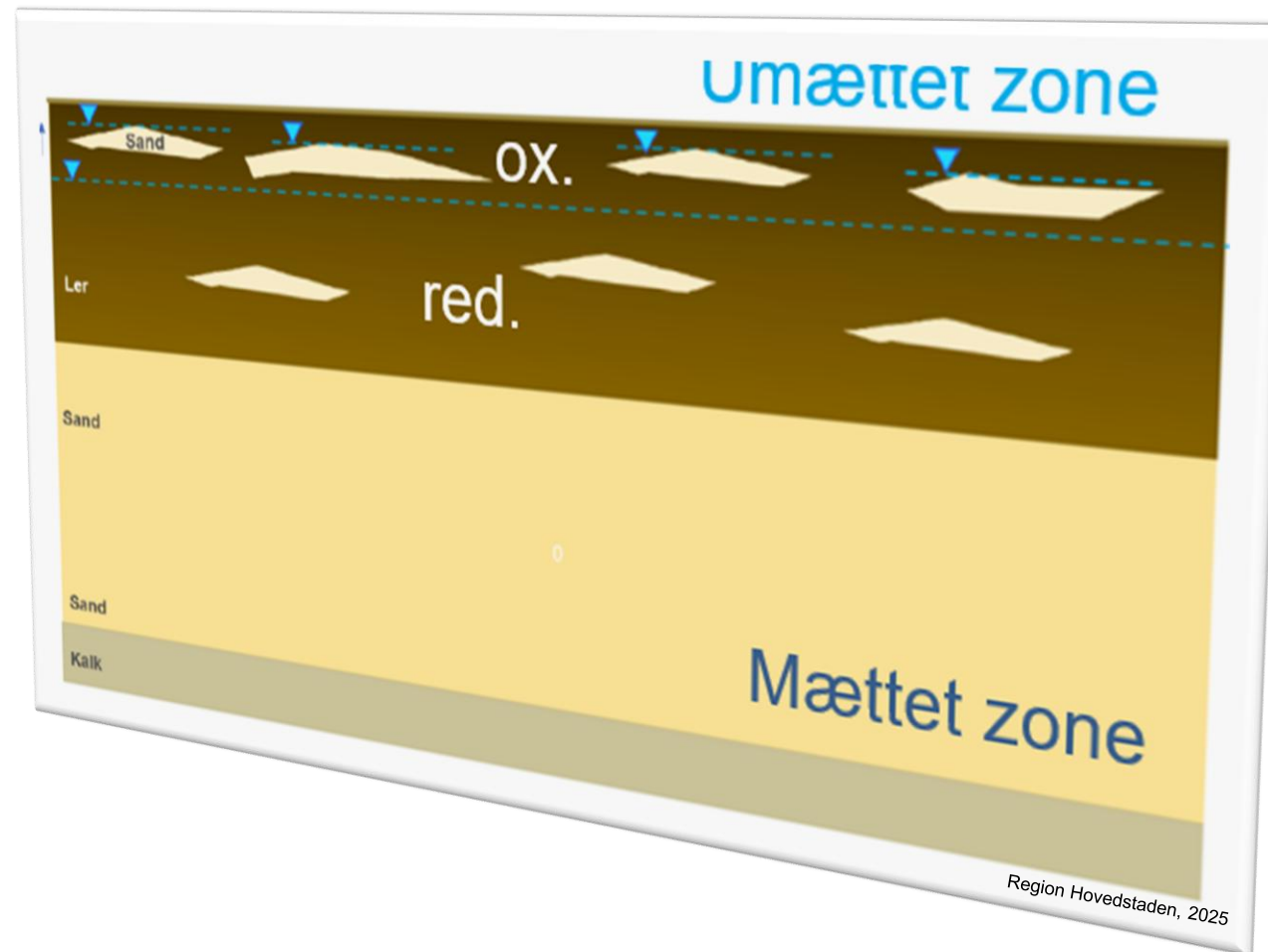
PFOA



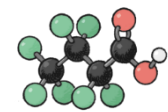
Typologi 2: Vertikal flux til grundvand



Typologi 3 : moræneler + sandlag/sandlinser, højt gvspejl



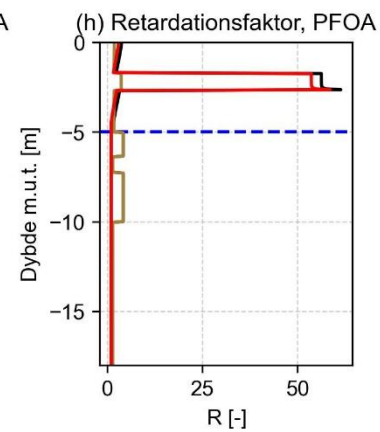
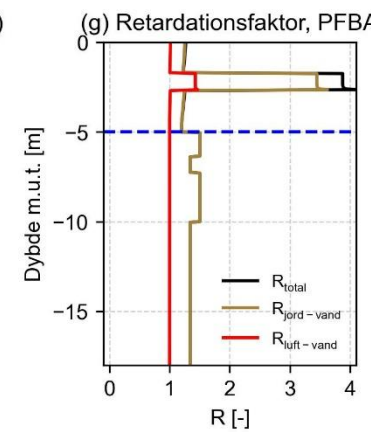
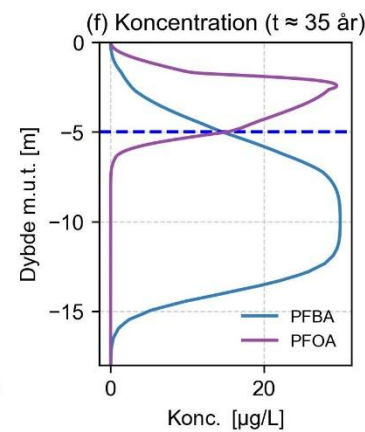
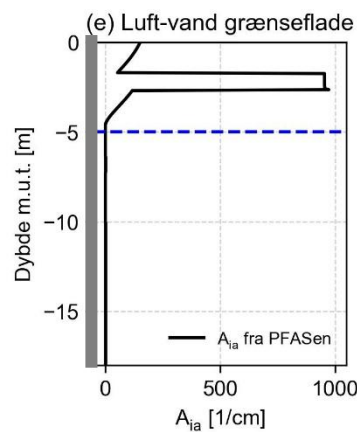
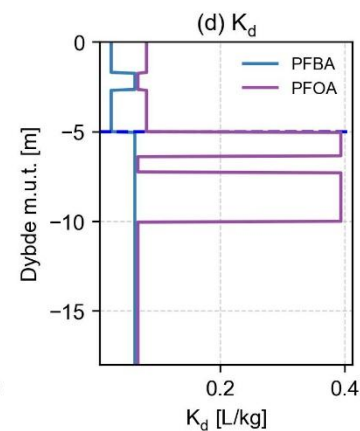
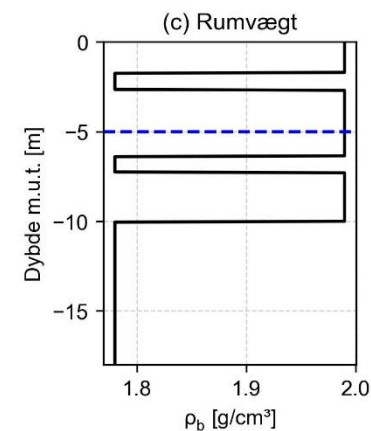
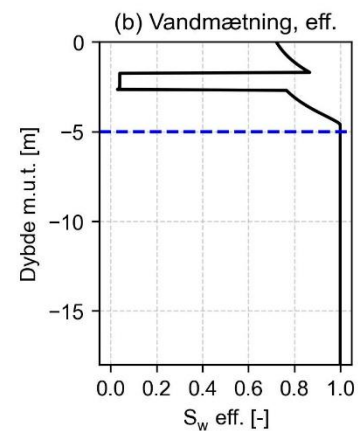
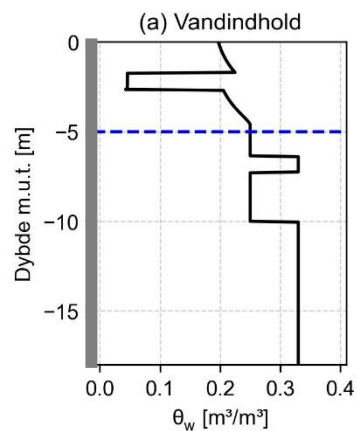
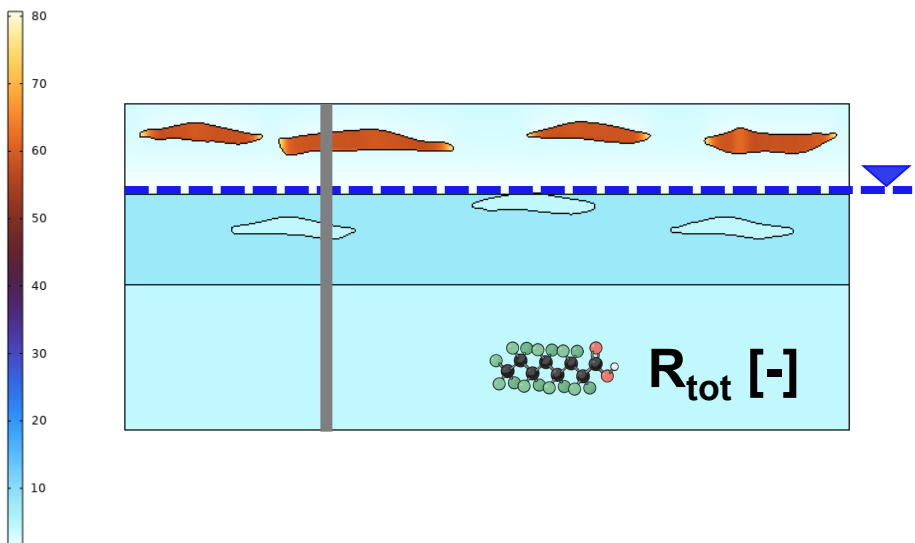
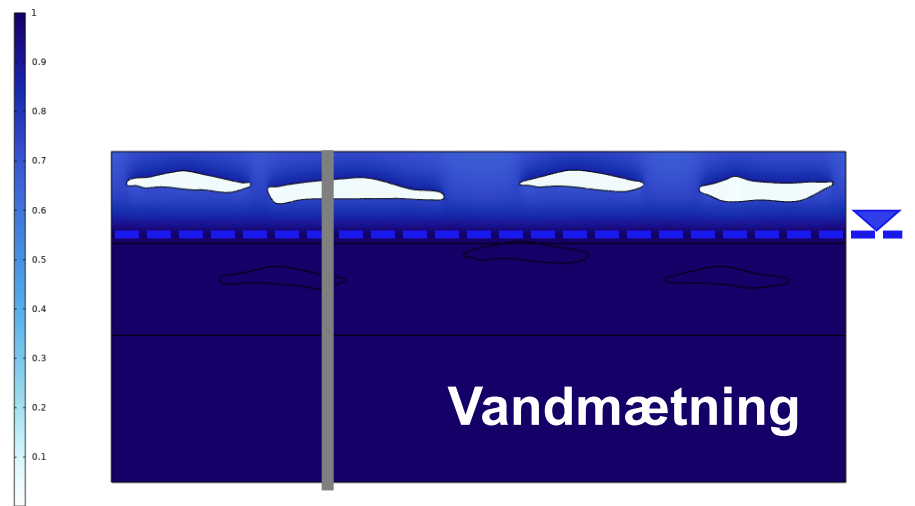
Typologi 3: jordprofiler



PFBA

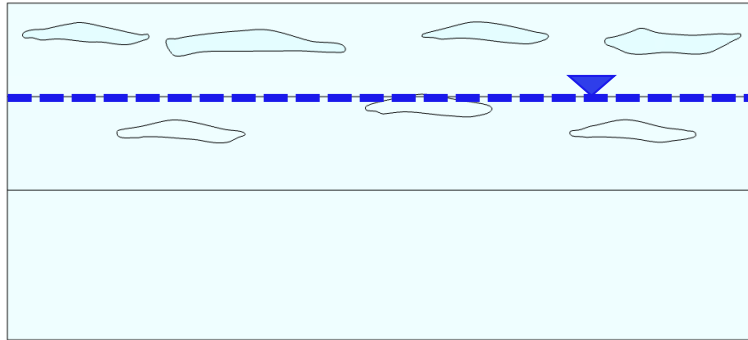


PFOA

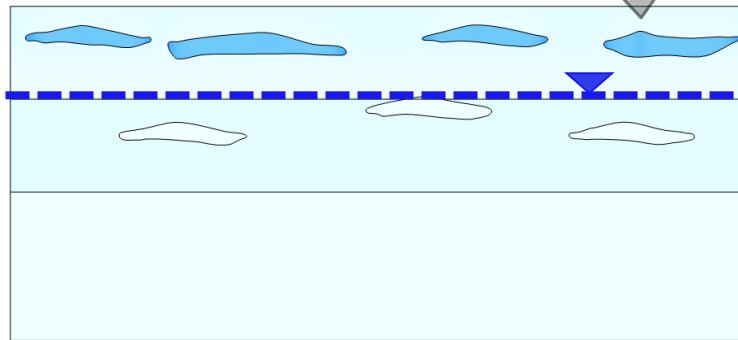


Retardation: typologi 3

PFBA

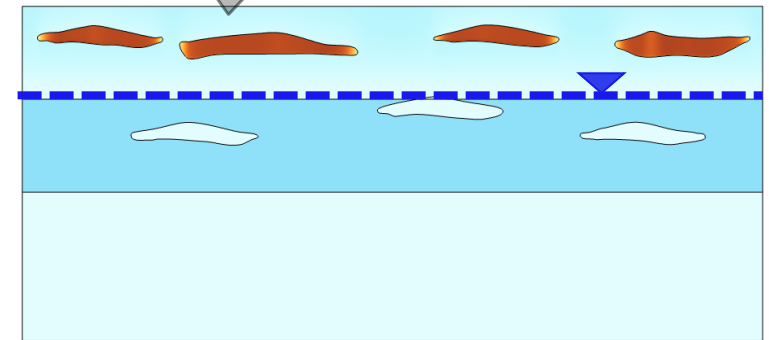


PFOA



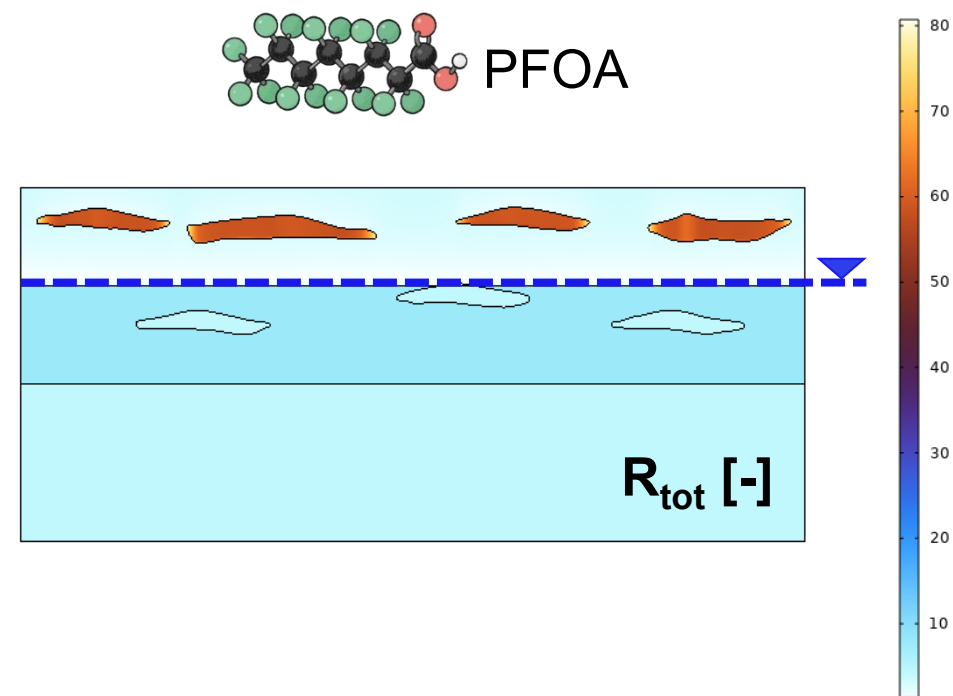
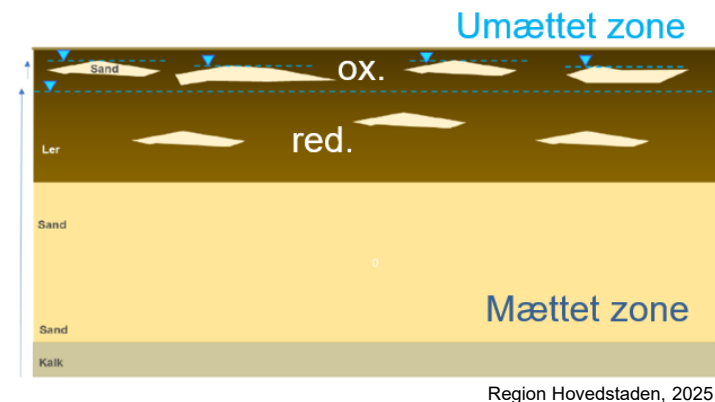
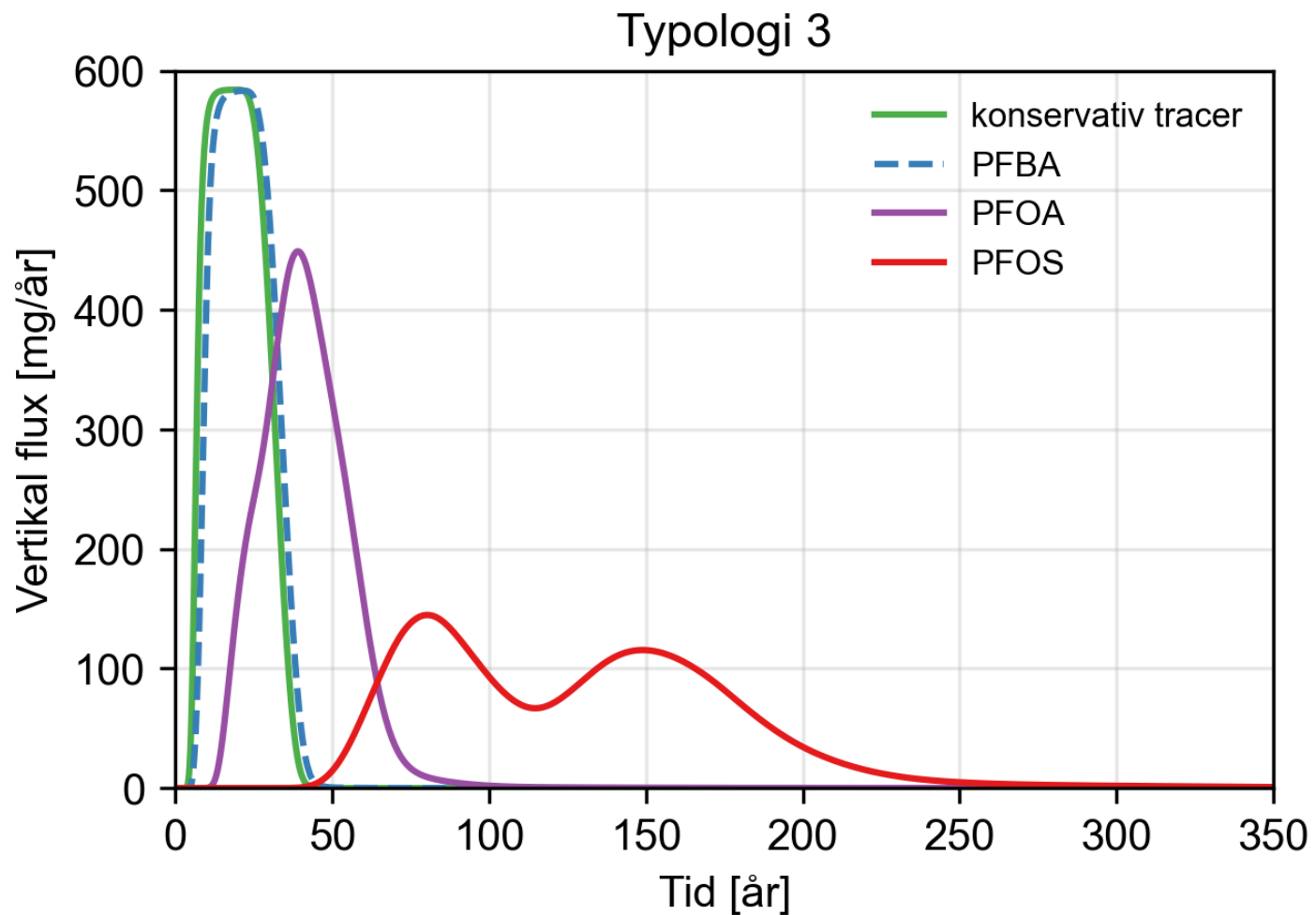
Umættede sandlinser

PFOS

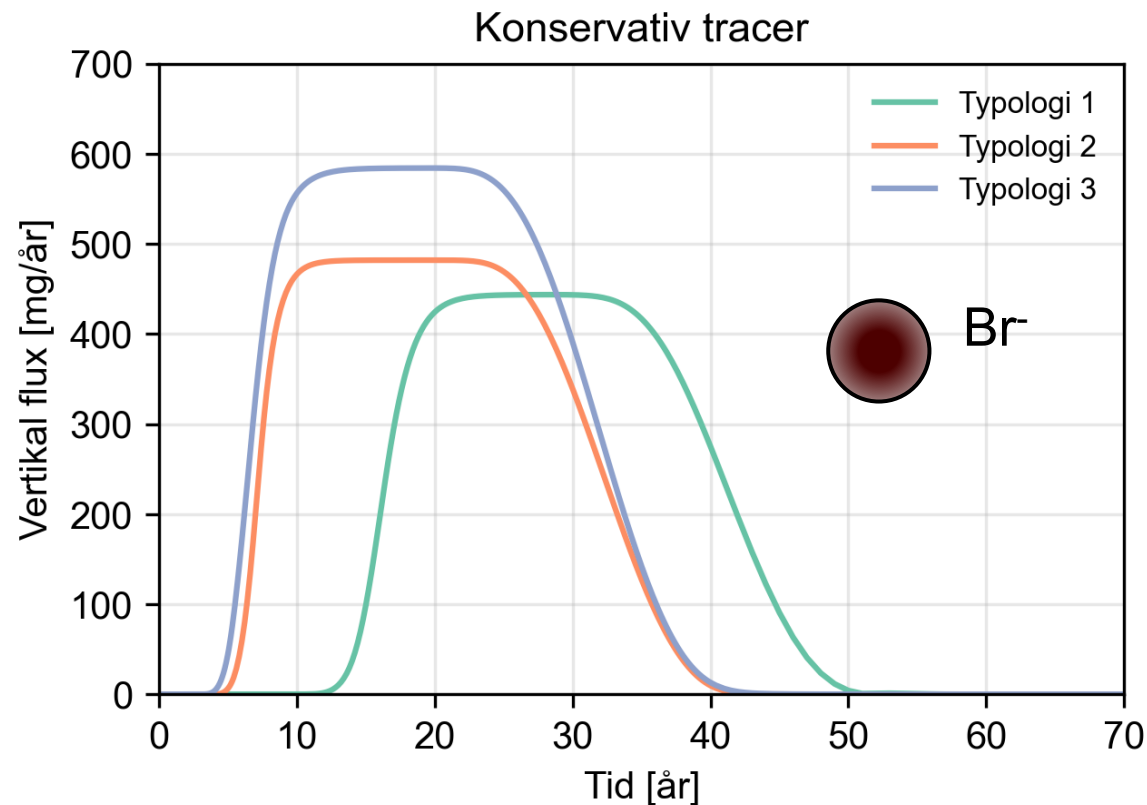


- Meget lidt retardation
- Moderat retardation
- Kraftig retardation

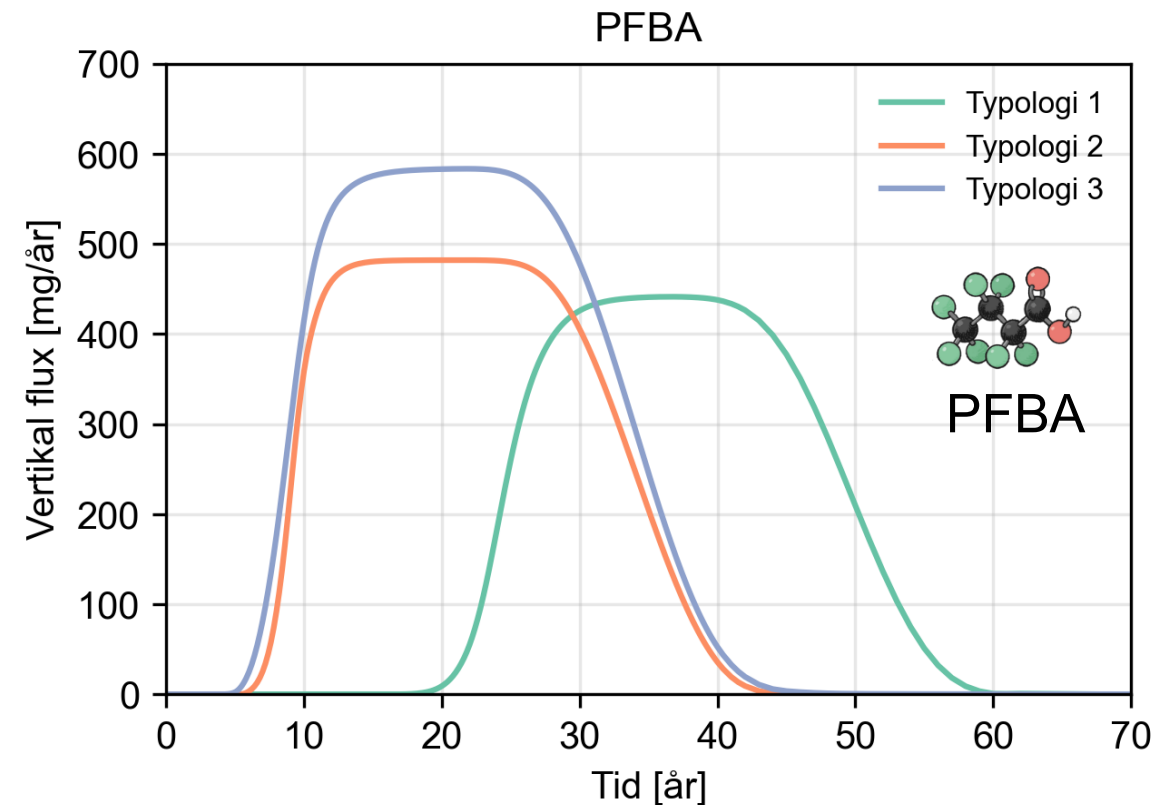
Typologi 3: Vertikal flux til grundvand



Br⁻ og PFBA: Vertikal flux til grundvand mellem typologierne

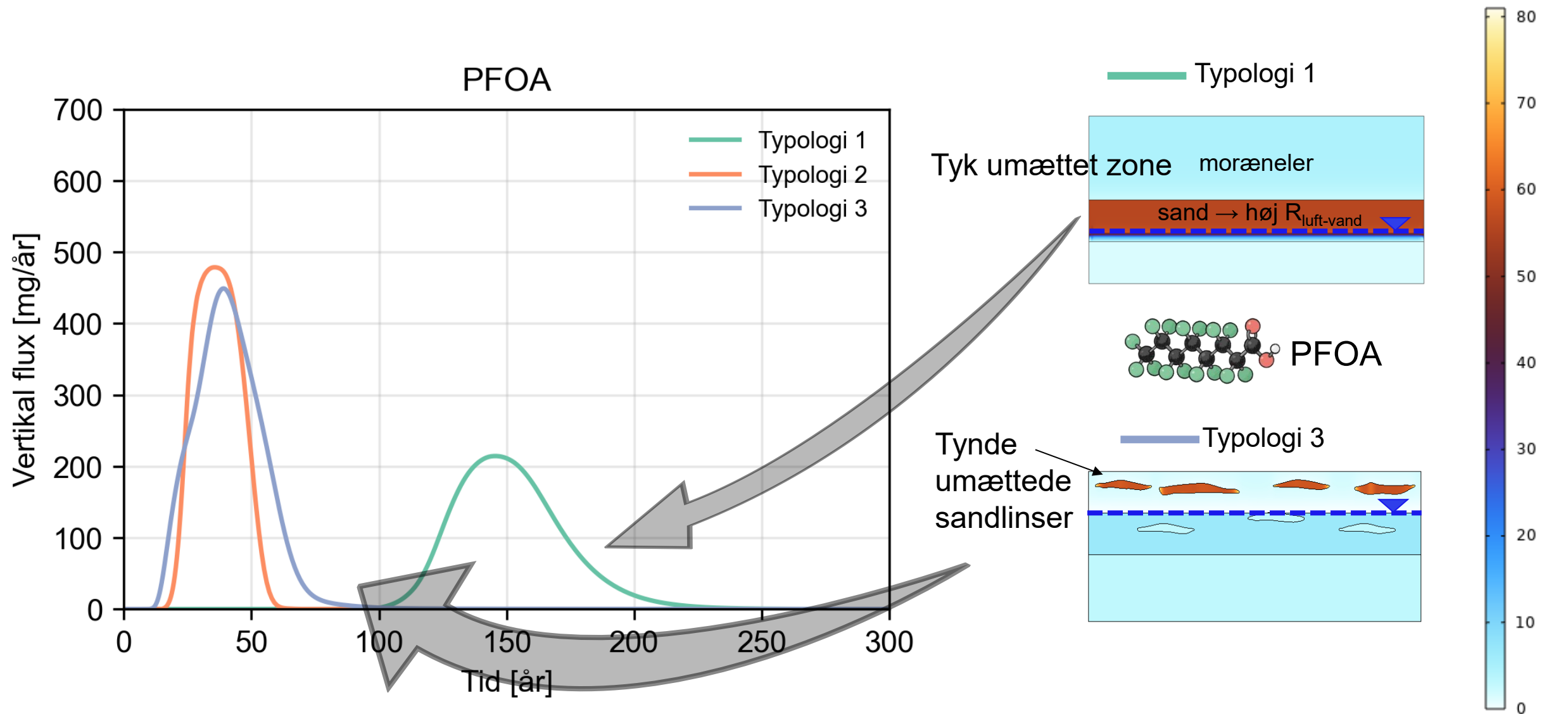


- Konservativ stoftransport



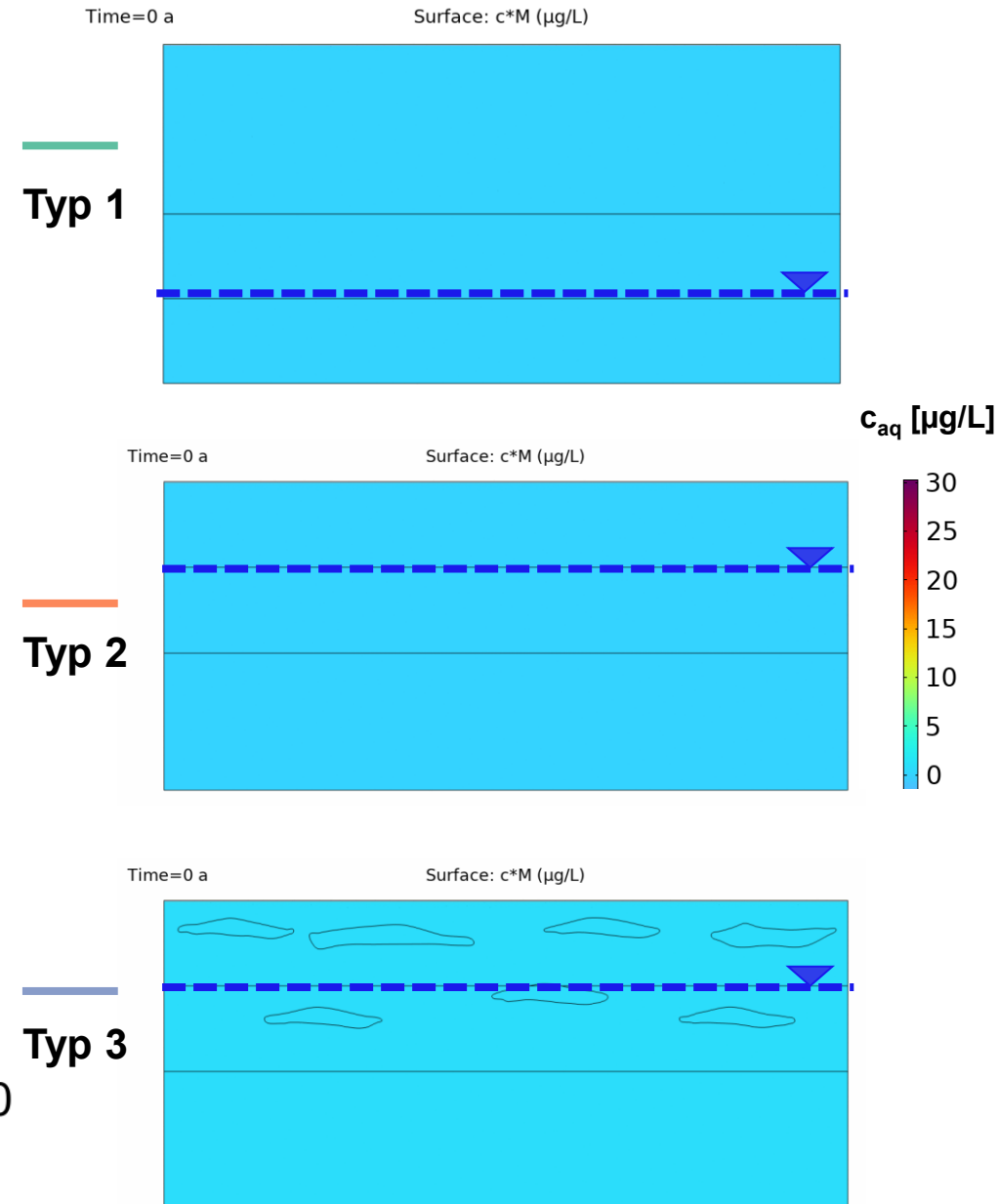
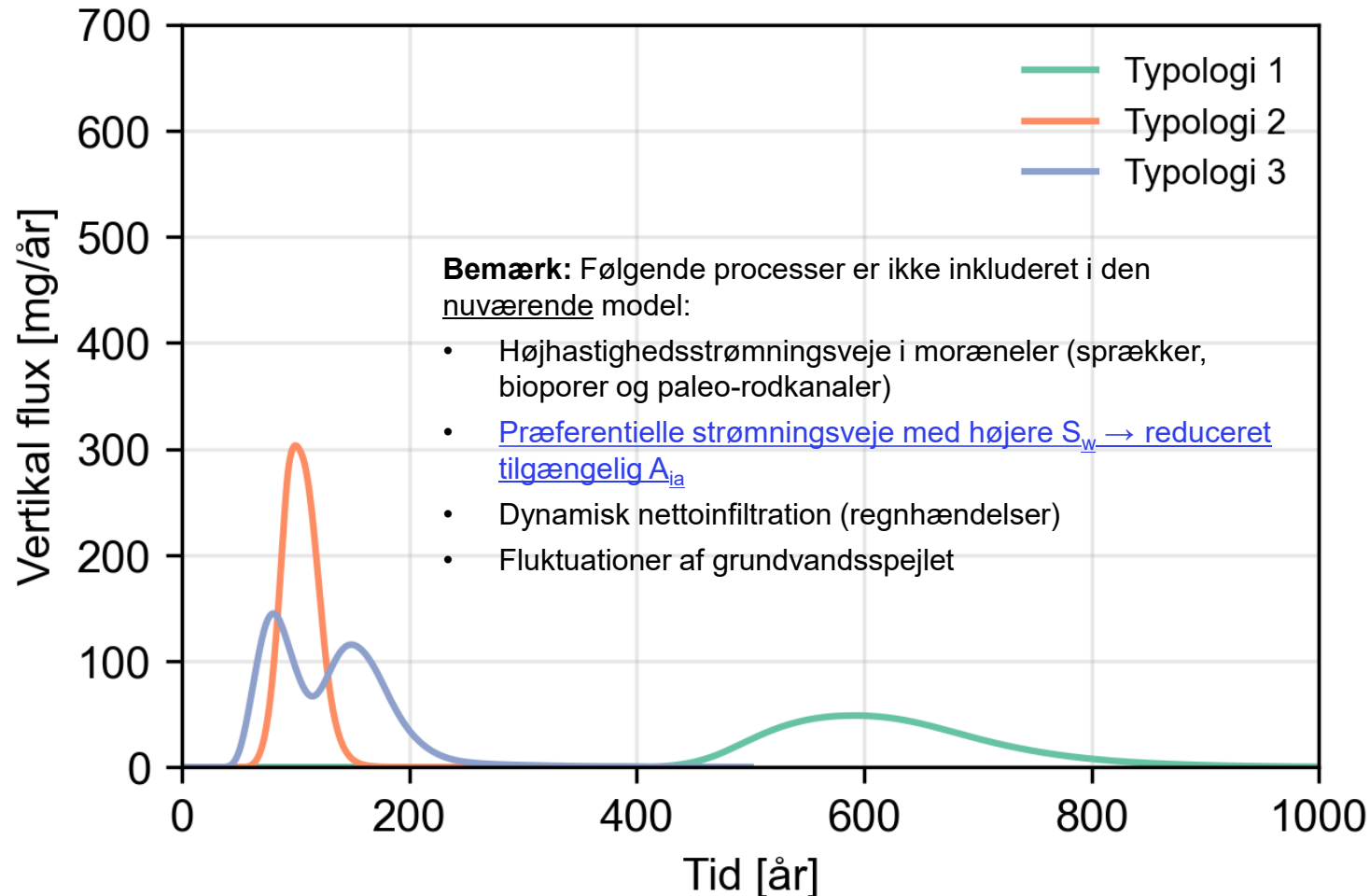
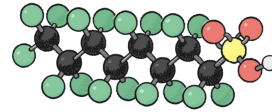
- Meget lav sorption

PFOA: Vertikal flux til grundvand mellem typologierne



PFOS: Vertikal flux til grundvand mellem typologierne

PFOS



Konklusion

Hvordan påvirker geologisk heterogenitet og de særlige egenskaber af typologierne de vertikale PFAS fluxe?

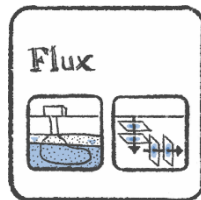
- **Heterogenitet og grundvandsspejl (lavt/højt) påvirker i høj grad PFAS-fluxe**
 - **Tykkelsen** af den umættede zone har betydning for fluxen, især for langkædede PFAS
 - Lav vandmætning → højt luft-vand-grænsefladeareal → **høj tilbageholdelse**
 - Sandlag og sandlinser i den umættede zone (lav vandmætning) fører til høj tilbageholdelse
 - **Vandmætningen og hydrogeokemiske egenskaber varierer med dybden → påvirker retardationsfaktoren og dermed resulterer i forskellige vertikale PFAS fluxe**
- Geologisk og hydrogeokemisk heterogenitet fører til ikke-intuitive PFAS fluxe og kan gøre det nødvendigt at anvende en mere kompleks model

Tak for jeres opmærksomhed!

Spørgsmål?

kontakt: henwie@dtu.dk

**Tak til alle medforfattere.
Tak for finansiering og støtte til:**



**Region
Hovedstaden**

