



Centrum pro výzkum  
toxických látek  
v prostředí

# Distribuční modely polutantů

## 3. Fugacita a tvorba modelu

Jiří Komprda



evropský  
sociální  
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,  
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



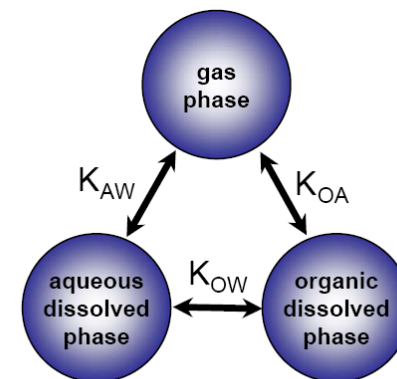
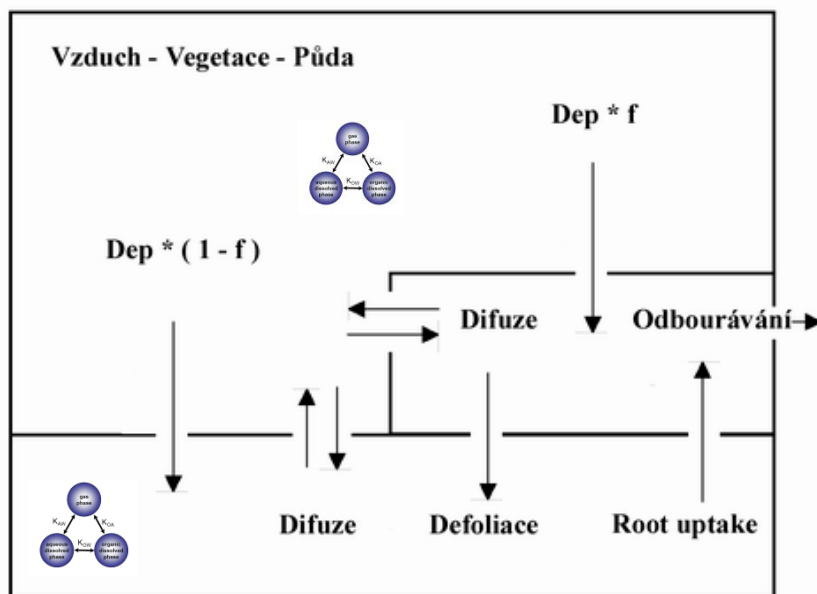
OP Vzdělávání  
pro konkurenceschopnost



INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

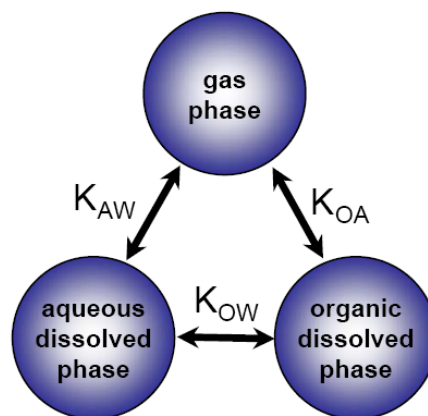
# Distribuční modely polutantů - shrnutí

- ❑ Boxový model se skládá z homogenních kompartmentů
- ❑ Polutant se uvnitř kompartmentu dělí mezi jeho složky na základě rozdělovacích koeficientů
- ❑ Rozdělovací koeficient je poměr rovnovážných koncentrací ve dvou sousedních fázích



# Distribuční modely polutantů - shrnutí

- Pomocí základních rozdělovacích koeficientů jako je  $K_{ow}$  a  $K_{aw}$  můžeme vypočítat řadu odvozených koeficientů jako jsou  $K_p$ ,  $K_{oa}$ ,  $K_{sw}$ ,  $K_{va}$ ,  $BCF$
- První fází výpočtu v environmentálním modelu je tedy zjištění, jak je koncentrace polutantu distribuovaná mezi složkami prostředí uvnitř kompartmentů
- Teprve v další fázi můžeme přistoupit ke kvantifikaci transportních procesů a matematickému řešení hmotnostní bilance modelu



# Fugacitní přístup k modelování osudu polutantů

- **V distribučních modelech POPs můžeme pracovat s koncentracemi a rozdělovacími koeficienty**
  
- **Alternativní přístup nahrazuje koncentraci fugacitou a používá ji jako kritérium rovnováhy místo rozdělovacího koeficientu**
  - **Bilanční transportní rovnice mají jednodušší strukturu**
  - **Jsou přehlednější**
  - **Matematické řešení je jednodušší a to v případě dynamických modelů i hardwarově**
  - **Zacházení s termínem fugacita a fugacitní kapacita je intuitivní a riziko vzniku chyb v matematickém zápisu je nižší**
  
- **V modelech polárních polutantů může být alternativně používána i aktivita**

# Fugacitní přístup k modelování osudu polutantů

- ❑ Ve fugacitních modelech je pojem koncentrace nahrazen fugacitou
- ❑ Fugacita se dá přeložit jako „tendence k úniku“ (G.N. Lewis, 1901)
- ❑ Při použití rozdělovacího koeficientu jako kritéria rovnováhy pracujeme s fázemi po dvojicích- zdroj variability ?
- ❑ Jednotkou fugacity je Pascal
- ❑ Při nízkých koncentracích = reálné environmentální podmínky POPs má význam parciálního tlaku polutantu v kompartmentu
- ❑ POPs jsou nepolární, lipofilní, pohybují se v kompartmentech jako plyn
- ❑ Fugacita je lineárně závislá na koncentraci

# Fugacitní přístup k modelování osudu polutantů

$$C = Z f$$

- ▣ Vztažným koeficientem je tzv. fugacitní kapacita  $Z$  ( $\text{mol m}^{-3} \text{Pa}^{-1}$ )
- ▣ Fugacitní kapacita vyjadřuje afinitu polutantu ke zkoumané fázi
- ▣ Je kombinací vlastností polutantů a prostředí
- ▣ Fugacitní kapacity jsou navzájem ve *stejném poměru jako rovnovážné koncentrace*

$$C_{\text{vzduch}} / C_{\text{voda}} = K_{aw} = Z_{\text{vzduch}} / Z_{\text{voda}}$$

# Fugacitní přístup k modelování osudu polutantů

- ▣ Prvním úkolem je tedy vypočítat fugacitní kapacitu každého kompartmentu, nebo jeho složky
- ▣ Musíme znát alespoň jednu fugacitní kapacitu  $Z$  a ostatní se dopočítá pomocí rozdělovacích koeficientů

Vzduch:

$$pV = nRT$$
$$C = n/V = p(1/RT)$$
$$C = f(1/RT)$$

- ▣ Fugacitní kapacita vzduchu je tedy  $1 / (R T)$  a ostatní  $Z$  budou:

$$Z_{\text{vzduch}} \rightarrow K_{aw} \rightarrow Z_{\text{voda}} \rightarrow K_{sw} \rightarrow Z_{\text{půda}}$$

$$Z_{\text{vzduch}} \rightarrow K_{af} \rightarrow Z_{\text{vegetace}}$$

$$Z_{\text{vzduch}} \rightarrow K_p \rightarrow Z_{\text{atm.částice}}$$

# Fugacitní přístup k modelování osudu polutantů

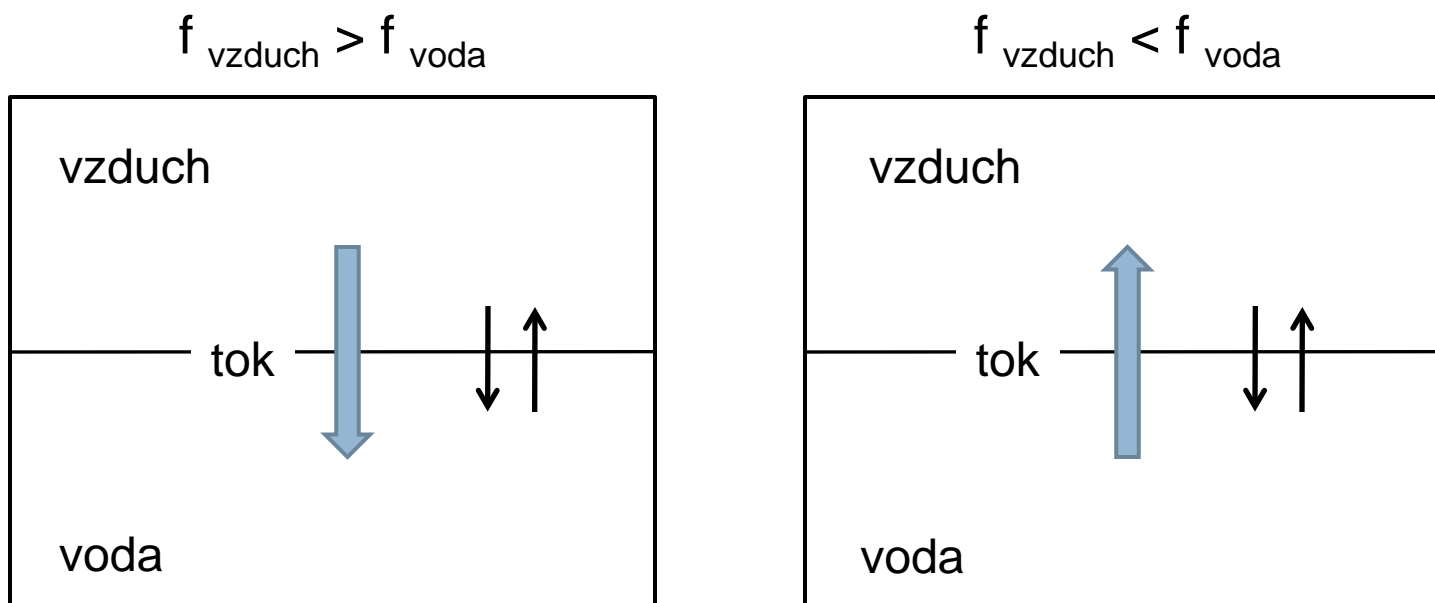
- Fugacitní kapacity jsou aditivní
- Celková fugacitní kapacita kompartmentu se vypočítá součtem dílčích fugacitních kapacit vynásobených objemovými frakcemi jeho složek
- Např. půda:

$$Z_{půda} = Z_{voda} \phi_{voda} + Z_{vzduch} \phi_{vzduch} + Z_{solid} \phi_{solid}$$



# Fugacitní přístup k modelování osudu polutantů

- Fugacita nám říká, zdali jsou sousední kompartmenty v rovnováze



- Rovnováhu kompartmentů bez fugacit můžeme zjistit jen pomocí rozdělovacích koeficientů

# Pohyb polutantů v životním prostředí

- **Z fundamentálního hlediska můžeme mezifázový transport rozdělit na *difuzivní a nedifuzivní***
- **Nedifuzivní:**
  - Jsou způsobeny pohybem média nezávisle na přítomnosti polutantu.  
Hybnou silou může být například gravitace, nebo sluneční záření.  
Většinou se jedná o jednosměrné procesy.
  - **Advektivní (piggybacking), unášení vzduchem, vodou a tuhými částicemi=**
  - **Vítr**
  - **Déšť**
  - **Suchá depozice atm. částic**
  - **Sedimentace**
  - **Splach půdy**
  - **Zprašování půdy, víření sedimentu**
  - **Vymývání**
  - **Opad vegetace**
  - **Pohyb živočichů**

# Pohyb polutantů v životním prostředí

## □ Difuzivní:

**Hybnou silou je vzdálenost systému od TD rovnováhy, daná rozdílem chemických potenciálů, či fugacit v jednotlivých kompartmentech**

- **Vytěkávání z půdy do vzduchu**
- **Vytěkávání z vody do vzduchu**
- **Adsorpce či absorpce sedimentem z vody**
- **Difuzní příjem živočichem z vody**
- **Difuzní příjem rostlinou ze vzduchu či půdy**

# Pohyb polutantů v životním prostředí

- **Matematický popis pohybu polutantů mezi kompartmenty**
- **Vyjádření hmotnostního toku  $N$  mol  $h^{-1}$**
- **Advektivní: koncentrace je vynásobena tokem média  $G$  v  $m^3 h^{-1}$**

tok = průtok \* koncentrace = průtok \* fugacitní kapacita \* fugacita

$$N = G C = G Z f$$

$$\frac{mol}{h} = \frac{m^3}{h} \frac{mol}{m^3} = \frac{m^3}{h} \frac{mol}{m^3 Pa} Pa$$

- **Fugacitní kapacita reprezentuje nosné médium**
  - Tok vody = fug. kapacita celého média včetně suspendovaných částic
  - Tok vzduchu = fug. kapacita vzduch + tuhé částice

# Pohyb polutantů v životním prostředí

- Zavedení transportních koeficientů „ $D$ “
- $D$  koeficient v sobě zahrnuje charakteristiku média a chemické látky, kinetický koeficient popisující rychlost pohybu polutantu a plochu přes kterou se polutant pohybuje

$$N = G Z f$$
$$N = A k Z f$$

$A$ : plocha přes kterou prochází advektivní tok  $m^2$

$k$ : rychlost větru  $m h^{-1}$

$$N = D f$$

$D$ : transportní koeficient  $mol h^{-1} Pa^{-1}$

- Používání  $D$  koeficientu zjednodušuje matematické řešení modelu

# Pohyb polutantů v životním prostředí

## □ Difuzní toky

- Základem popisu difuze je první Fickův zákon

$$N = -B \cdot A \cdot \frac{dC}{dy}$$

Tok  $N$  ( $\text{mol h}^{-1}$ ) procházející plochou  $A$  je přímo úměrný difuznímu koeficientu  $B$  ( $\text{m}^2 \text{h}^{-1}$ ) a gradientu koncentrace  $\Delta C$  mezi vrstvami vzdálenými  $\Delta y$

## □ Mass transfer coefficient MTC

- Používání difuzivity  $B$  není v environmentálních aplikacích vždy ideální díky neznámé veličině  $\Delta y$ .

$$N = A \cdot K_m \cdot \Delta C$$

- $K_m$  je MTC s jednotkou  $\text{m h}^{-1}$

# Pohyb polutantů v životním prostředí

## □ Difuzní toky

- Ve vyjádření pomocí  $D$  koeficientu

$$N = A \cdot K_m \cdot \Delta C$$

$$N = A \cdot K_m \cdot (C_2 - C_1) = A \cdot K_m \cdot (Z \cdot f_2 - Z \cdot f_1)$$

$$A \cdot K_m \cdot Z \cdot (f_2 - f_1) = D \cdot (f_2 - f_1)$$

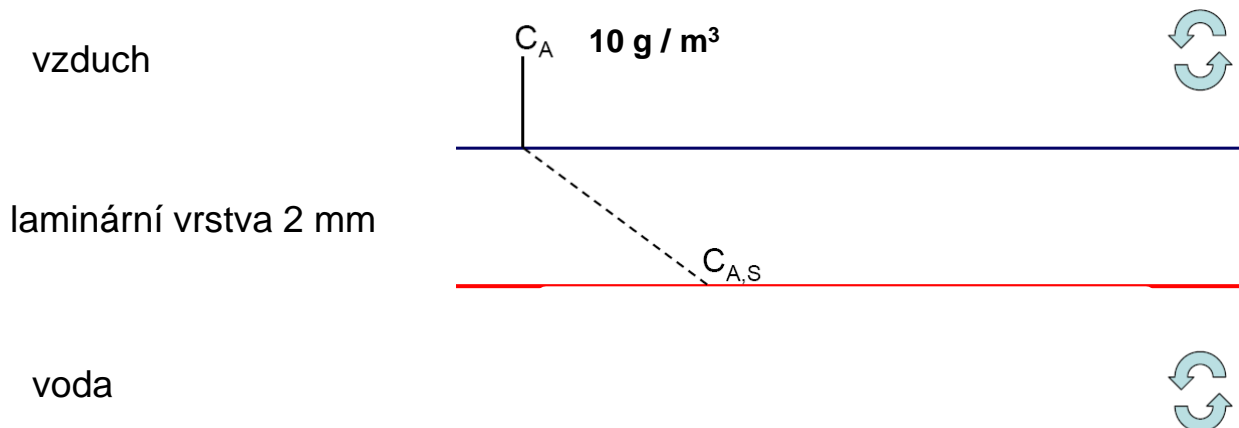
Tok  $N$  procházející plochou  $A$  je přímo úměrný hmotnostnímu transportnímu koeficientu  $K_m$  ( $\text{m h}^{-1}$ ) a rozdílu fugacit  $f_2$  a  $f_1$

# Pohyb polutantů v životním prostředí

## □ Úkol

- **Voda se vypařuje z naplněné nádoby o ploše  $1 \text{ m}^2$  a hluboké  $1 \text{ cm}$ . Vypařování je kontrolováno laminární vrstvou vzduchu o tloušťce  $2 \text{ mm}$  nad povrchem kapaliny. Koncentrace vody v okolním vzduchu je  $10 \text{ g m}^{-3}$ .**
- **Jak dlouho bude trvat, než se voda vypaří?**
- **Jaké vstupní hodnoty je nutné znát pro výpočet?**
- **Co by teoreticky mohlo odpařování ovlivňovat?**
- **Jaká zjednodušení se v modelu nacházejí?**

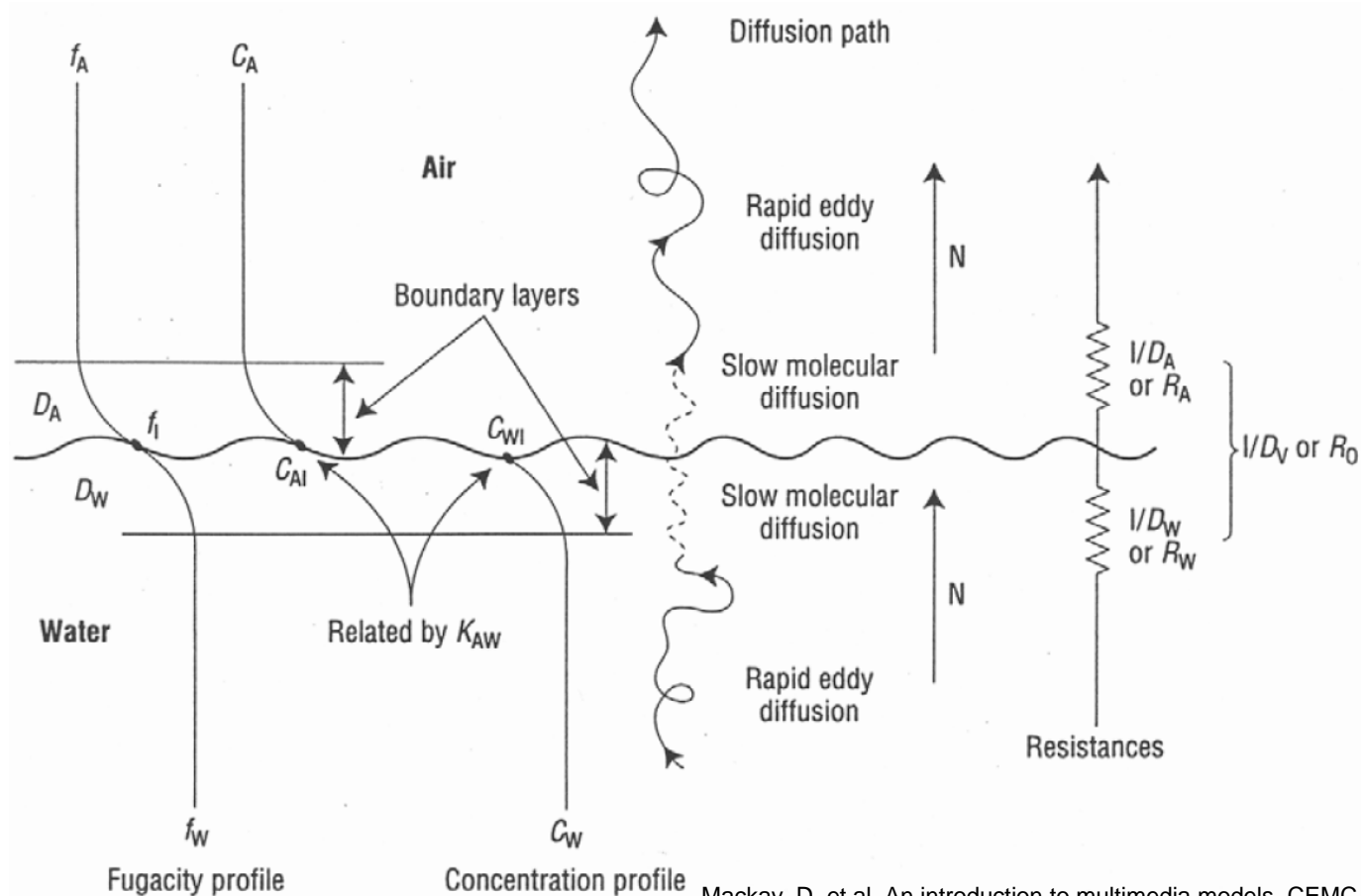
$$N = -B \cdot A \cdot \frac{dC}{dy}$$





# Pohyb polutantů v životním prostředí

- Koncept fázového rozhraní jako série odporů
- Polutant při přechodu z vody do vzduchu musí překonat dvě laminární vrstvy- pod povrchem hladiny a nad ní (viz předchozí příklad).



# Pohyb polutantů v životním prostředí

- Polutant musí postupně překonat obě vrstvy (indexy  $w$ ,  $a$  označují médium tj. vodu a vzduch)
  - $f_i$  je fugacita na fázovém rozhraní

$$f_w - f_i = N / D_w$$

$$f_i - f_a = N / D_a$$

$$(f_w - f_a) = N ( 1 / D_w + 1 / D_a )$$

$$1 / D_v = 1 / D_w + 1 / D_a$$

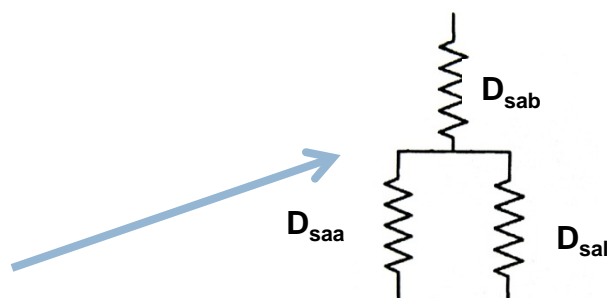
- Jednotlivé parciální transportní koeficienty jsou tedy:

$$D_w = k_w A Z_w$$

$$D_a = k_a A Z_a$$

# Pohyb polutantů v životním prostředí

- ❑ Fázové rozhraní půda / vzduch je popsáno na rozdíl od rozhraní voda / vzduch, pomocí 3 odporů
- ❑ Polutant difunduje přes fázové rozhraní z kapalně a plynné složky půdy ( $D_{saa}$ ,  $D_{sal}$ )
- ❑ Kombinace sériového a paralelního zapojení odporů
- ❑ V našem případě má  $D$  spíše význam vodivosti



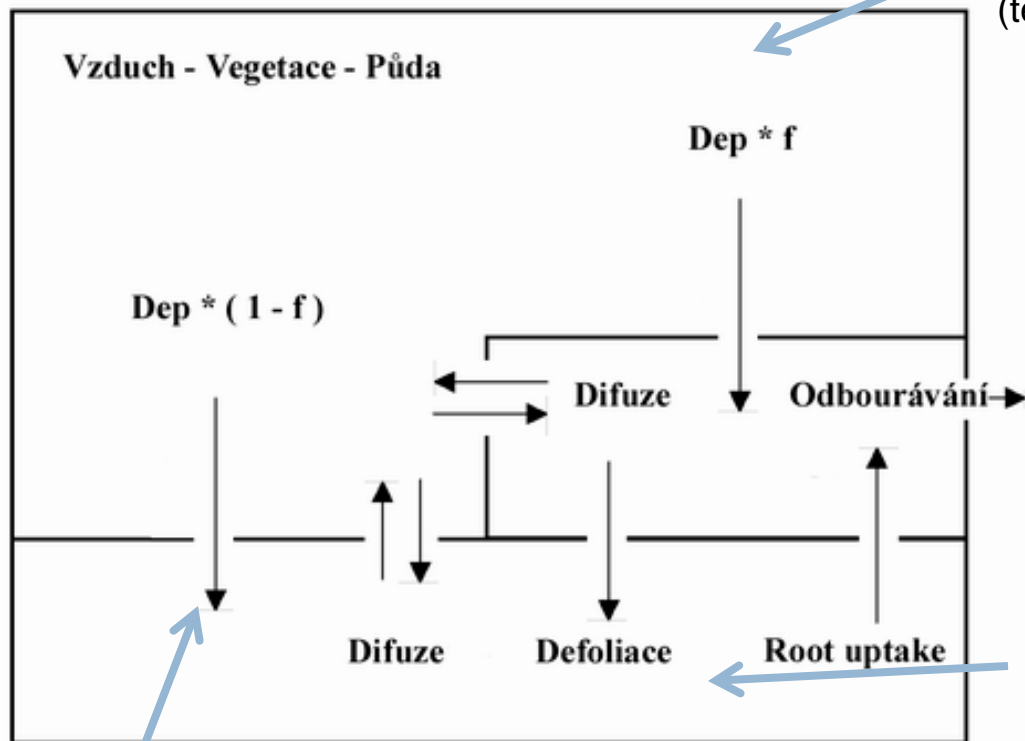
$$D_{sa} = 1 / \left( 1 / D_{sab} + 1 / (D_{saa} + D_{sal}) \right)$$

Fázové rozhraní vzduch / půda

# Pohyb polutantů v životním prostředí

## □ Jak zatím vytváření modelu probíhalo

1. Rozdělovací koeficienty charakterizují dělení uvnitř jednotlivých kompartmentů (teplota, org. uhlík, TSP, obj. frakce)



2. Fugacitní kapacity definují afinitu polutantů k jednotlivým kompartmentům (rozdělovací koeficienty)

3.  $D$  koeficienty kvantifikují transportní procesy (fugacitní kapacity, MTC, rychlosti větru, vody, plochy kompartmentů)

# Pohyb polutantů v životním prostředí

## □ **D koeficienty ostatních transportních procesů**

Obecné schéma:

$$D = A Z k$$

plocha, fug. kapacita, kinetický koeficient

## □ **Chemické reakce, odbourávání polutantu**

$$D_r = V Z k_r \quad m^3 \cdot \frac{mol}{m^3 \cdot Pa \cdot hod}$$

$k_r$  rychlostní koeficient prvního řádu

Odbourávání polutantu probíhá v celém objemu kompartmentu  $V$ !

# Pohyb polutantů v životním prostředí

## □ Vymývání polutantů z atmosféry

- Plynná frakce- předpokládá se rovnovážné dělení popsané  $K_{aw}$

$$D_{dešť} = A U_r Z_{voda}$$

plocha, intenzita srážek, fug. kapacita vody

- Tuhé částice- efektivita vymývání je popsána tzv. vymývacím koeficientem

$$D_{dešť\_č} = A V_{č} U_r Z_{částice} W_p$$

plocha, obj. frakce částic, intenzita srážek, vymývací koeficient

- $W_p$  vyjadřuje efektivitu vymývání částic deštěm. Je to poměr objemu sloupce kterým proletí dešťová kapka ku jejímu objemu (cca 200000)
- Intenzita srážek  $U_r$  je popsána v jednotkách  $m h^{-1}$

# Pohyb polutantů v životním prostředí

- ▣ **Suchá atmosférická depozice (tuhé částice)**

- ▣ **Plynná frakce- předpokládá se rovnovážné dělení popsané  $K_p$**

$$D_s = A V_{\check{c}} K_s Z_{\text{částice}}$$

plocha, obj. frakce částic, rychlost padání částic, fug. kapacita částic

- ▣ **Stejným způsobem bývá popsána sedimentace tuhých částic ve vodě**

# Pohyb polutantů v životním prostředí

## ▣ Obecný přístup k řešení procesů spojených s vegetací

### ■ Plynná výměna mezi vzduchem a listem

Bývá popsána podobně jako těkání z vody

Je ale nutné mít na paměti, jaká je reálná plocha listové plochy

$$S = A * LAI$$

plocha půdy \* leaf area index ( $m^2/m^2$ )

### ■ Příjem kořeny

Kinetickým koeficientem je transpirační tok. Efektivitu příjmu polutantu vyjadřuje  
Transpiration stream concentration factor

### ■ Záchyt mokré a suché depozice listem

Většinou se řeší jako určitá frakce mokré a suché atm. depozice, která se zachytí vegetací.  $D$  koeficient, který popisuje příjem depozice půdou musí být o zachycenou frakci snížen



# Sestavování modelu

## □ Kombinování $D$ koeficientů

- $D$  koeficienty jsou plně aditivní

$$D_{depozice} = D_{suchá} + D_{mokrá} + D_{difuzní}$$

- Příklad: atmosféra

$$N = f_{vzduch} * (D_{suchá} + D_{mokrá} + D_{difuzní} + D_{difvegetace} + D_{advekce} + D_r)$$

fugacita

- $N$  vyjadřuje celkový hmotnostní tok polutantu mol h<sup>-1</sup> mířící pryč z atmosférického kompartmentu

# Sestavování modelu

- **Matematické řešení boxového modelu je založeno na zákoně o zachování hmoty**

$$akumulace = vstup - výstup \pm reakce$$

- **Celková hmotnostní bilance modelu musí být rovna nule**
- **Pro každý kompartment lze napsat bilanční rovnici**

$$výstupy = vstupy \pm reakce$$

**Počet bilančních rovnic je roven počtu kompartmentů ( $n$ ). Neznámými hodnotami jsou fugacity (v každém kompartmentu jedna). Jedná se tedy o řešení soustavy  $n$  rovnic o  $n$  neznámých.**

# Sestavování modelu

## □ Příklad hmotnostní bilance modelu

### ■ 3 kompartmenty, ustálený nerovnovážný model

*vstup = výstup*

celkový D koeficient výstupu  
z kompartmentu č. 1

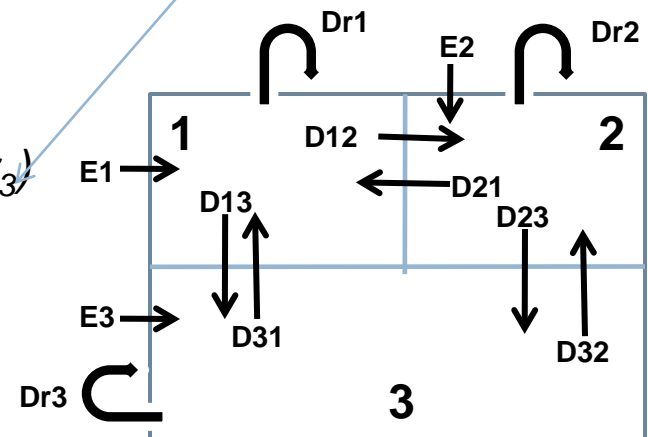
$$E_1 + f_2 D_{21} + f_3 D_{31} = f_1 (D_{12} + D_{13} + Dr_1)$$

emise

$$E_2 + f_1 D_{12} + f_3 D_{32} = f_2 (D_{23} + D_{21} + Dr_2)$$

odbourávání

$$E_3 + f_1 D_{13} + f_2 D_{23} = f_3 (D_{32} + D_{31} + Dr_3)$$



# Sestavování modelu

Atmospheric Compartment

$$dM_A/dt = d(V_A BZ_A f_A)/dt = E_A + D_{FCA} f_{FC} + D_{FDA} f_{FD} + D_{BA} f_B + D_{EA} f_E + D_{UA} f_U + D_{WA} f_W + D_{TA} f_T + D_{CA} f_C + D_{OA} f_O + D_{Ain} f_{Ain} - f_A (D_{RA} + D_{AFC} + D_{AFD} + D_{AB} + D_{AE} + D_{AU} + D_{AW} + D_{AT} + D_{AC} + D_{AO} + D_{Aout})$$

Forest coniferous canopy compartment

$$dM_{FC}/dt = d(V_{FC} BZ_{FC} f_{FC})/dt = E_{FC} + D_{AFC} f_A - f_{FC} (D_{RFC} + D_{FCA} + D_{FCB})$$

Forest deciduous canopy compartment

$$dM_{FD}/dt = d(V_{FD} BZ_{FD} f_{FD})/dt = E_{FD} + D_{AFD} f_A - f_{FD} (D_{RFD} + D_{FDA} + D_{FDB})$$

Forest soil compartment

$$dM_B/dt = d(V_B BZ_B f_B)/dt = E_B + D_{AB} f_A + D_{FCB} f_{FC} + D_{FDB} f_{FD} - f_B (D_{RB} + D_{BA} + D_{BW})$$

Agricultural soil compartment

$$dM_E/dt = d(V_E BZ_E f_E)/dt = E_E + D_{AE} f_A - f_E (D_{RE} + D_{EA} + D_{EW})$$

Uncultivated soil compartment

$$dM_U/dt = d(V_U BZ_U f_U)/dt = E_U + D_{AU} f_A - f_U (D_{RU} + D_{UA} + D_{UW})$$

Fresh water compartment

$$dM_W/dt = d(V_W BZ_W f_W)/dt = E_W + D_{AW} f_A + D_{BW} f_B + D_{EW} f_E + D_{UW} f_U + D_{WS1W} f_{WS1} + D_{WS2W} f_{WS2} - f_W (D_{RW} + D_{WA} + D_{WT} + D_{WWS1} + D_{WWS2})$$

Fresh water sediment compartment 1

$$dM_{WS1}/dt = d(V_{WS1} BZ_{WS1} f_{WS1})/dt = D_{WWS1} f_W + D_{WS2WS1} f_{WS2} - f_{WS1} (D_{RWS1} + D_{WS1W} + D_{LWS1} + D_{WS1WS2} + D_{WS1TS1})$$

Fresh water sediment compartment 2

$$dM_{WS2}/dt = d(V_{WS2} BZ_{WS2} f_{WS2})/dt = D_{WWS2} f_W + D_{WS1WS2} f_{WS1} - f_{WS2} (D_{RWS2} + D_{WS2W} + D_{LWS2} + D_{WS2WS1})$$

Estuary water compartment

$$dM_T/dt = d(V_T BZ_T f_T)/dt = E_T + D_{AT} f_A + D_{WT} f_W + D_{CT} f_C + D_{TS1T} f_{TS1} + D_{TS2T} f_{TS2} - f_T (D_{RT} + D_{TA} + D_{TC} + D_{TTS1} + D_{TTS2})$$

Estuary sediment compartment 1

$$dM_{TS1}/dt = d(V_{TS1} BZ_{TS1} f_{TS1})/dt = D_{TTS1} f_T + D_{TS2TS1} f_{TS2} + D_{WS1TS1} f_{WS1} - f_{TS1} (D_{RTS1} + D_{TTS1T} + D_{LTS1} + D_{TS1TS2} + D_{TS1CS1})$$

Estuary sediment compartment 2

$$dM_{TS2}/dt = d(V_{TS2} BZ_{TS2} f_{TS2})/dt = D_{TTS2} f_T + D_{TS1TS2} f_{TS1} - f_{TS2} (D_{RTS2} + D_{TTS2T} + D_{LTS2} + D_{TS2TS1})$$

Coastal water compartment

$$dM_C/dt = d(V_C BZ_C f_C)/dt = E_C + D_{AC} f_A + D_{TC} f_T + D_{OC} f_O + D_{CS1C} f_{CS1} + D_{CS2C} f_{CS2} - f_C (D_{RC} + D_{CA} + D_{CT} + D_{CO} + D_{CCS1} + D_{CCS2})$$

Coastal sediment compartment 1

$$dM_{CS1}/dt = d(V_{CS1} BZ_{CS1} f_{CS1})/dt = D_{CCS1} f_C + D_{CS2CS1} f_{CS2} + D_{TS1CS1} f_{TS1} - f_{CS1} (D_{RCS1} + D_{CS1C} + D_{LCS1} + D_{CS1CS2} + D_{CS1DS1})$$

Coastal sediment compartment 2

$$dM_{CS2}/dt = d(V_{CS2} BZ_{CS2} f_{CS2})/dt = D_{CCS2} f_C + D_{CS1CS2} f_{CS1} - f_{CS2} (D_{RCS2} + D_{CS2C} + D_{LCS2} + D_{CS2CS1})$$

Open water compartment

$$dM_O/dt = d(V_O BZ_O f_O)/dt = E_O + D_{AO} f_A + D_{CO} f_C + D_{DO} f_D + D_{Oin} f_{Oin} - f_O (D_{RO} + D_{OA} + D_{OC} + D_{Oout} + D_{OD})$$

Deep water compartment

$$dM_D/dt = d(V_D BZ_D f_D)/dt = D_{OD} f_O + D_{DS1D} f_{DS1} + D_{DS2D} f_{DS2} - f_D (D_{RD} + D_{DO} + D_{DDS1} + D_{DDS2})$$

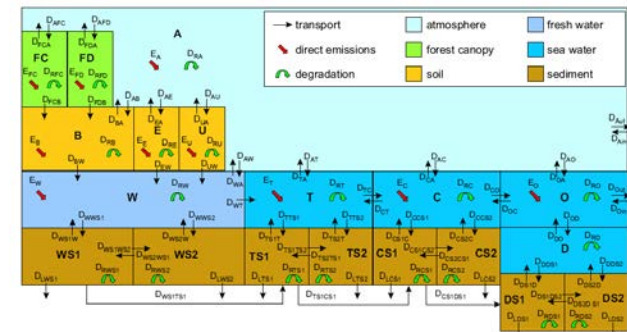
Deep sediment compartment 1

$$dM_{DS1}/dt = d(V_{DS1} BZ_{DS1} f_{DS1})/dt = D_{DDS1} f_D + D_{DS2DS1} f_{DS2} + D_{CS1DS1} f_{CS1} - f_{DS1} (D_{RDS1} + D_{DS1D} + D_{LDS1} + D_{DS1DS2})$$

Deep sediment compartment 2

$$dM_{DS2}/dt = d(V_{DS2} BZ_{DS2} f_{DS2})/dt = D_{DDS2} f_D + D_{DS1DS2} f_{DS1} - f_{DS2} (D_{RDS2} + D_{DS2D} + D_{LDS2} + D_{DS2DS1})$$

## Soustava bilančních rovnic modelu CoZMO-POP2



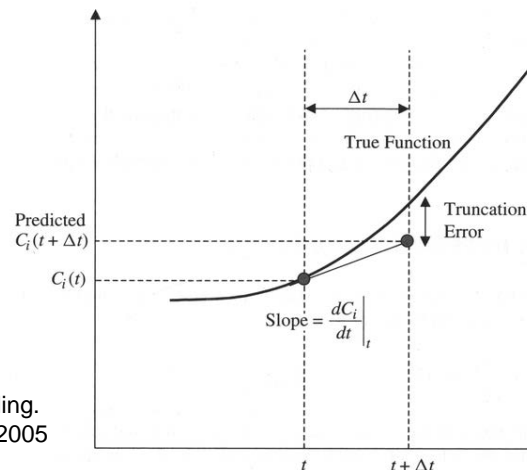
# Sestavování modelu

## □ Dynamický model

- Struktura je stejná jako u ustáleného, rovnice jsou časově závislé v diferenciálním tvaru

$$\frac{dm}{dt} = \frac{dCV}{dt} = m_{in}(C, t) - m_{out}(C, t) + E(C, t) \pm R(C, t)$$

- Řešení může být analytické (málo pravděpodobné), nebo numerické (po časových krocích)
- Nejjednodušší metodou je použít známou směrnici křivky v čase  $t$  k extrapolaci do času  $t + \Delta t$



# Sestavování modelu

## □ Dynamický model

- V praxi se používá konstantní časový krok (Eulerova metoda), nebo proměnlivý
- Volba časového kroku má významný vliv na stabilitu a přesnost řešení
- Malý časový krok zvyšuje HW náročnost a může se negativně projevit chybou zaokrouhlováním
- Velký časový krok může být zdrojem nestability modelu
  - Nutnost testování modelu za nejrůznějších podmínek nastavení
- Výhodné je použití časového kroku s proměnlivou délkou (ODE solvery v Matlabu založené na metodách Runge-Kutty, vyšších řádů- Fehlberg 7, Dormand-Prince apod)

# Příklad č. 1

- Do jezera o ploše  $10^6 \text{ m}^2$  a objemu  $10^7 \text{ m}^3$  je vypouštěna chemická látka v množství  $400 \text{ mol/den}$ .
- Do jezera také přitéká řekou ( $10^4 \text{ m}^3/\text{den}$ ) stejný polutant o koncentraci  $0.01 \text{ mol/m}^3$ . Polutant se odbourává reakcí prvního řádu s rychlostním koeficientem  $k=10^{-3} \text{ h}^{-1}$ . Polutant z jezera vytékává rychlostí  $10^{-5} C \text{ mol/m}^2\text{s}$  ( $C$  je koncentrace v jezeře). Výtok vody z jezera je  $8000 \text{ m}^3/\text{den}$ .
- Jaká je koncentrace  $C$  v jezeře?

## Příklad č. 2

- V budově o rozměrech 20x25x5 m je ventilace s kapacitou 200 m<sup>3</sup>/h. Vzduch na vstupu do ventilace má koncentraci CO<sub>2</sub> 0.6 g/m<sup>3</sup>. Uvnitř budovy je zdroj produkující 500 g CO<sub>2</sub> za hodinu.
- Jaké je celkové množství CO<sub>2</sub> v budově (kg) a jeho koncentrace na výstupu z ventilace?



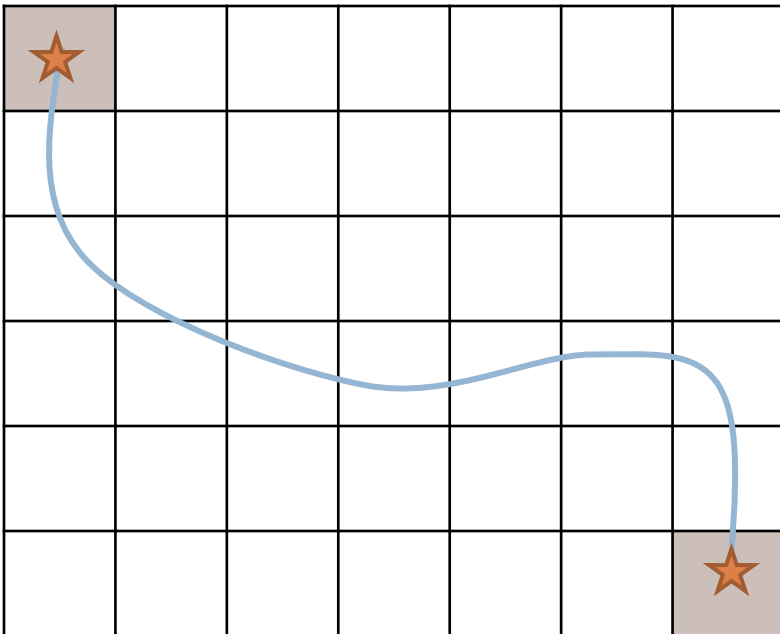
## Příklad č. 3

- Na jezero o objemu  $10^6 \text{ m}^3$ , které nemá žádný přítok ani odtok je jednorázově aplikováno 10 molů prostředku hubícího ryby (tzv. piscicid).
- Tato látka se v jezeře odbourává reakcí prvního řádu s rychlostní konstantou  $k = 10^{-2} \text{ h}^{-1}$ .
- Jaká bude koncentrace za 1 a 10 dní a kdy se množství látky sníží na 1/2?

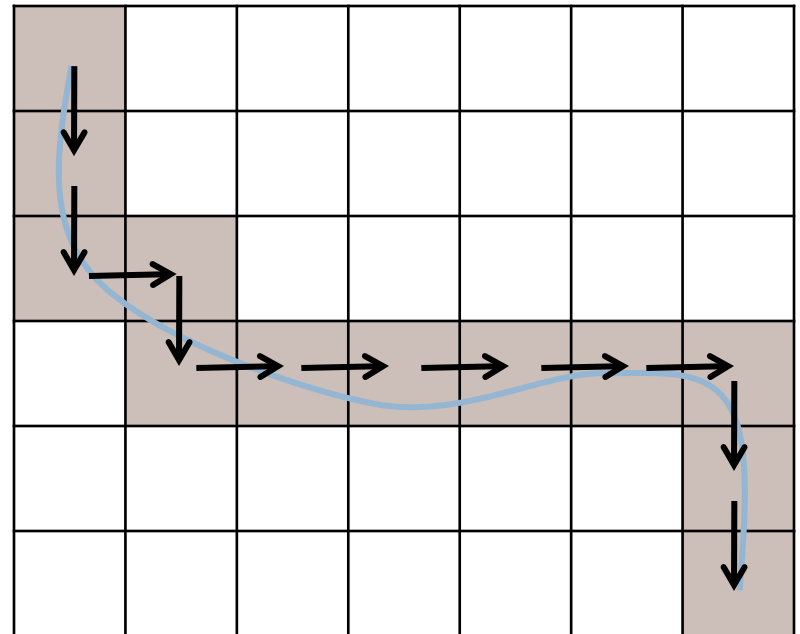
## Příklad č. 4

- U řeky se rozkládá město, jehož obyvatelé do ní v odpadních vodách vypouštějí 93.3 kg detergentu za hodinu.
- Rychlost toku vody v řece je 1.097 km/h. Hloubka a šířka řeky jsou 0.91 x 18.3 m.
- Rychlost odbourávání detergentu odpovídá poločasů života 7.2 hod.
- Jaká bude koncentrace ve vzdálenosti 1.609 km (1 míle) a 16.09 km (10 mil)?
- Řešení vypočítejte v Lagrangianském a Eulerovském souřadném systému.

Lagrangian: pohybující se „parcela“ média

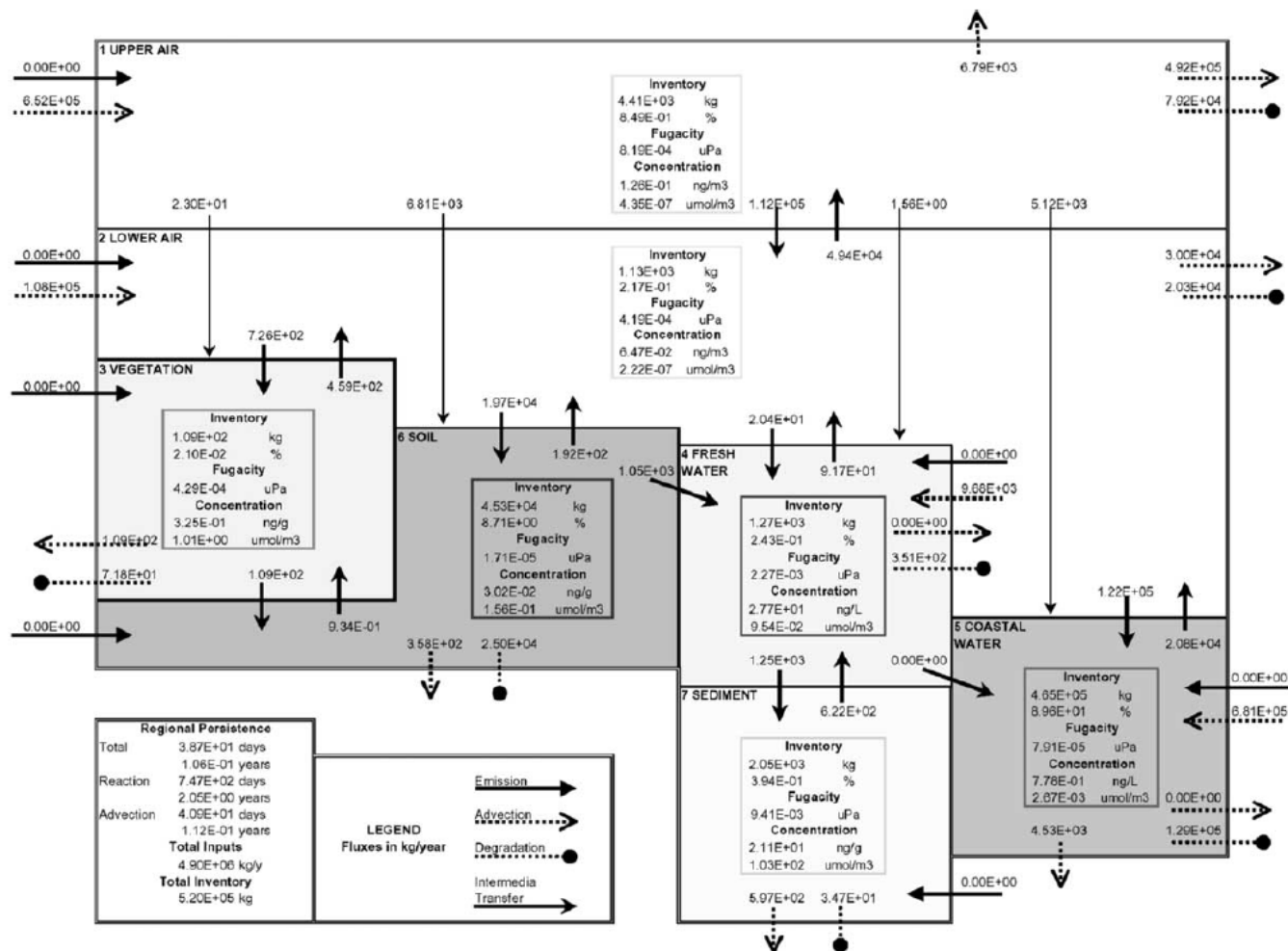


Euler: médium je rozděleno na soustavu čtverců



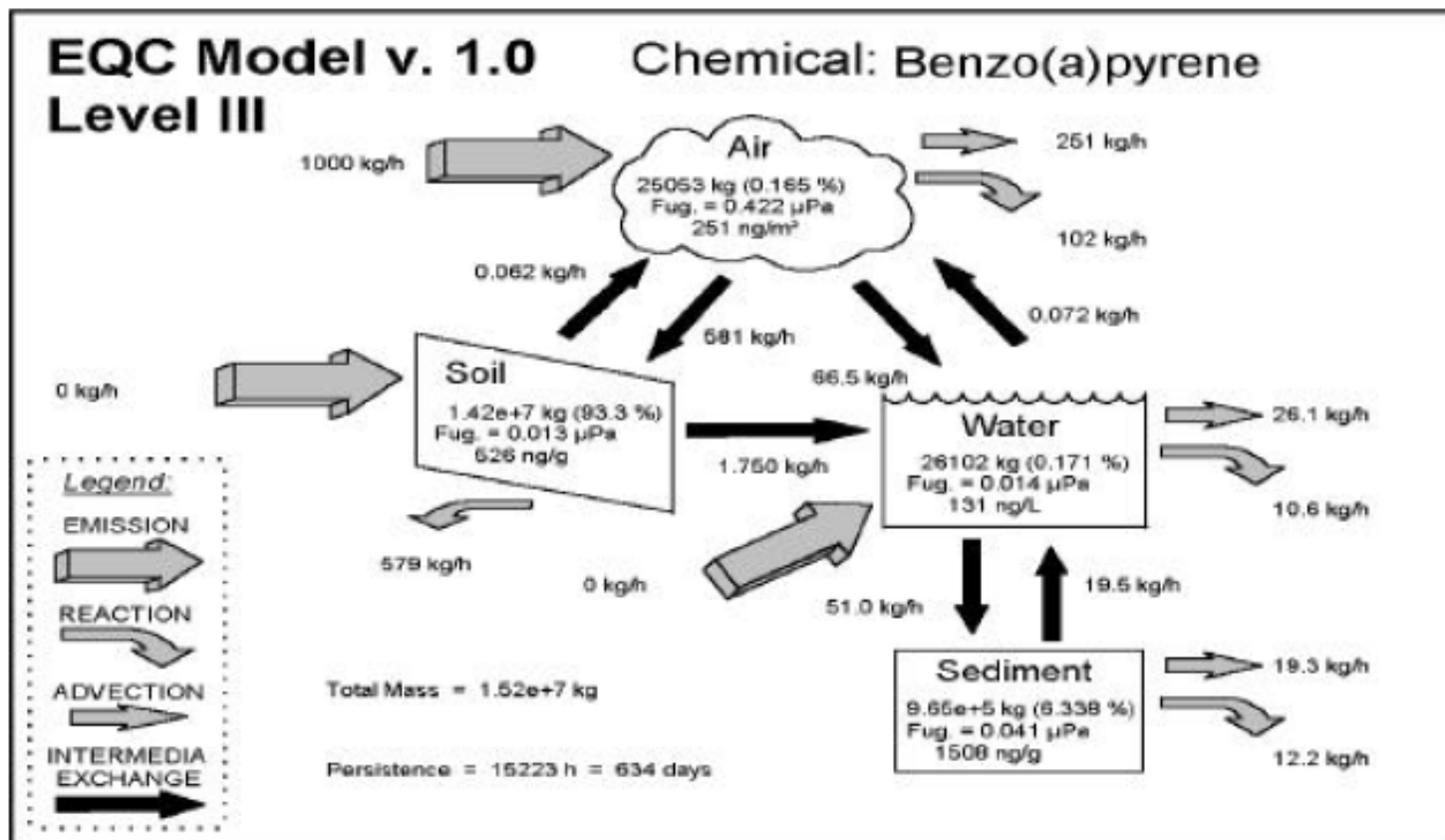
# Ukázka prezentace výsledků modelu

## □ Schéma struktury s hmotnostní bilancí



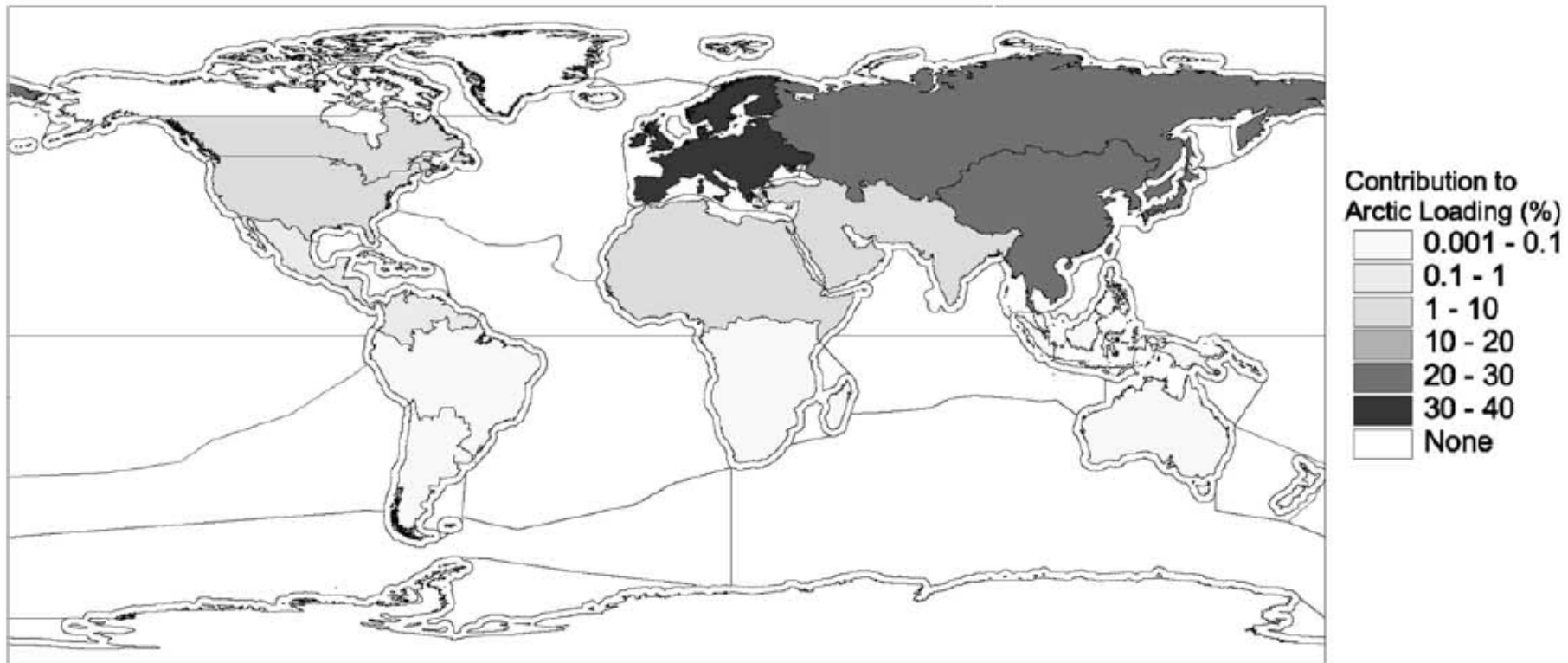
# Ukázka prezentace výsledků modelu

## □ Schéma struktury s hmotnostní bilancí



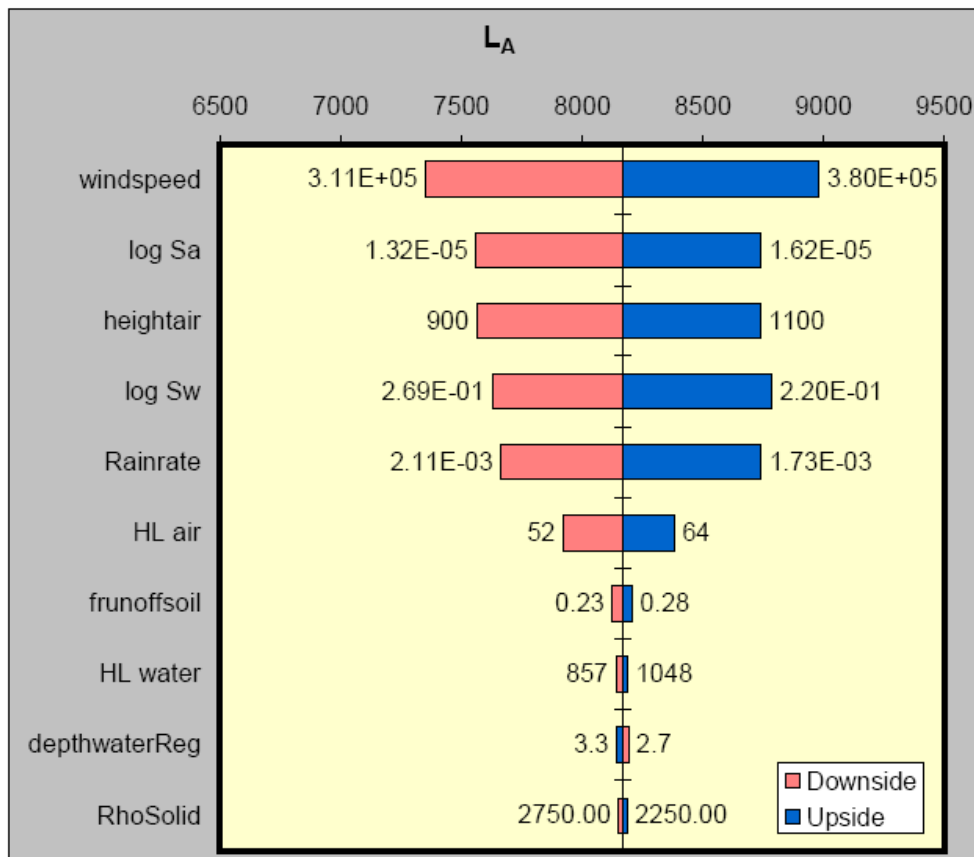
# Ukázka prezentace výsledků modelu

## ▣ Mapy



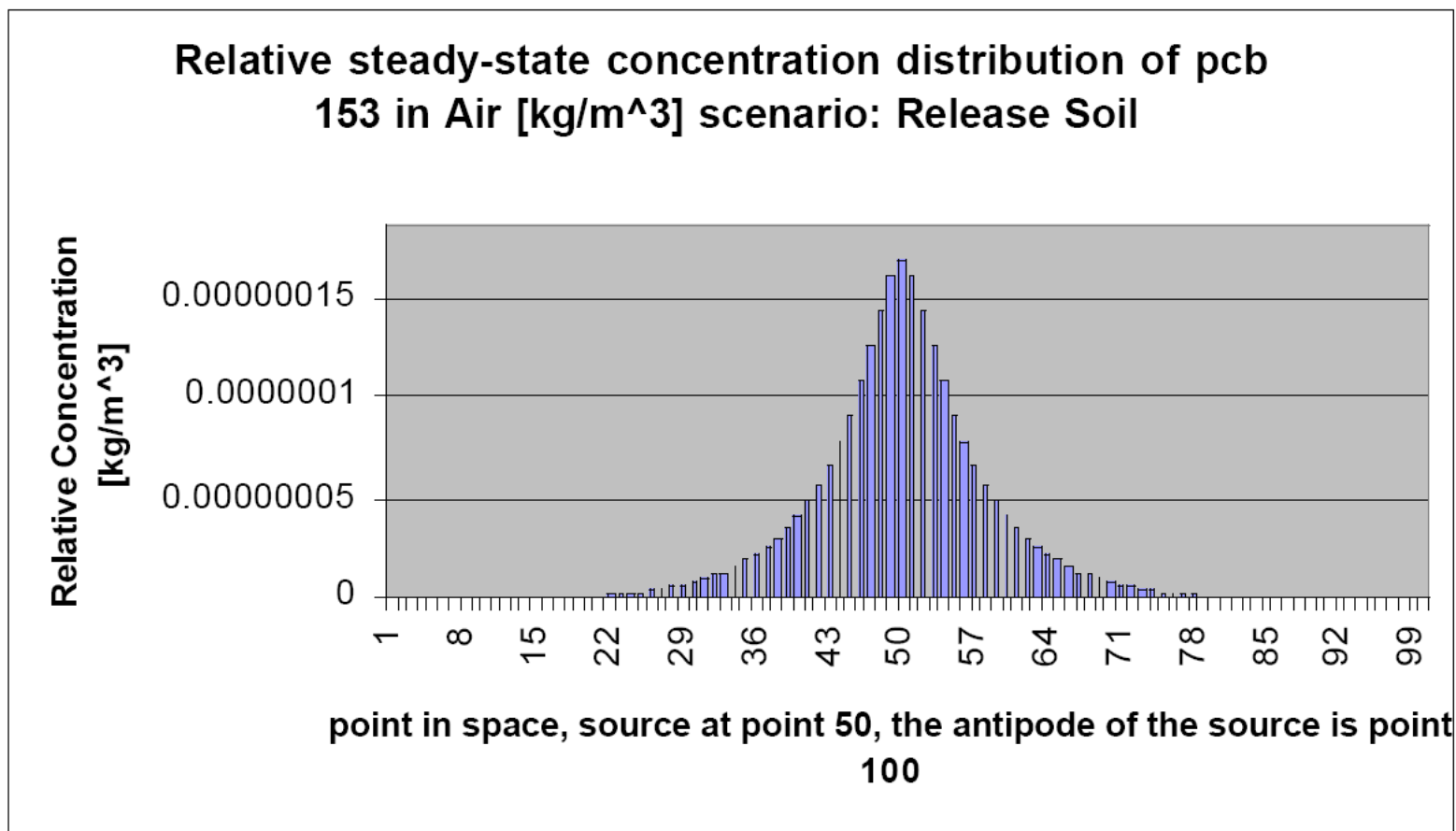
# Ukázka prezentace výsledků modelu

## □ Grafy



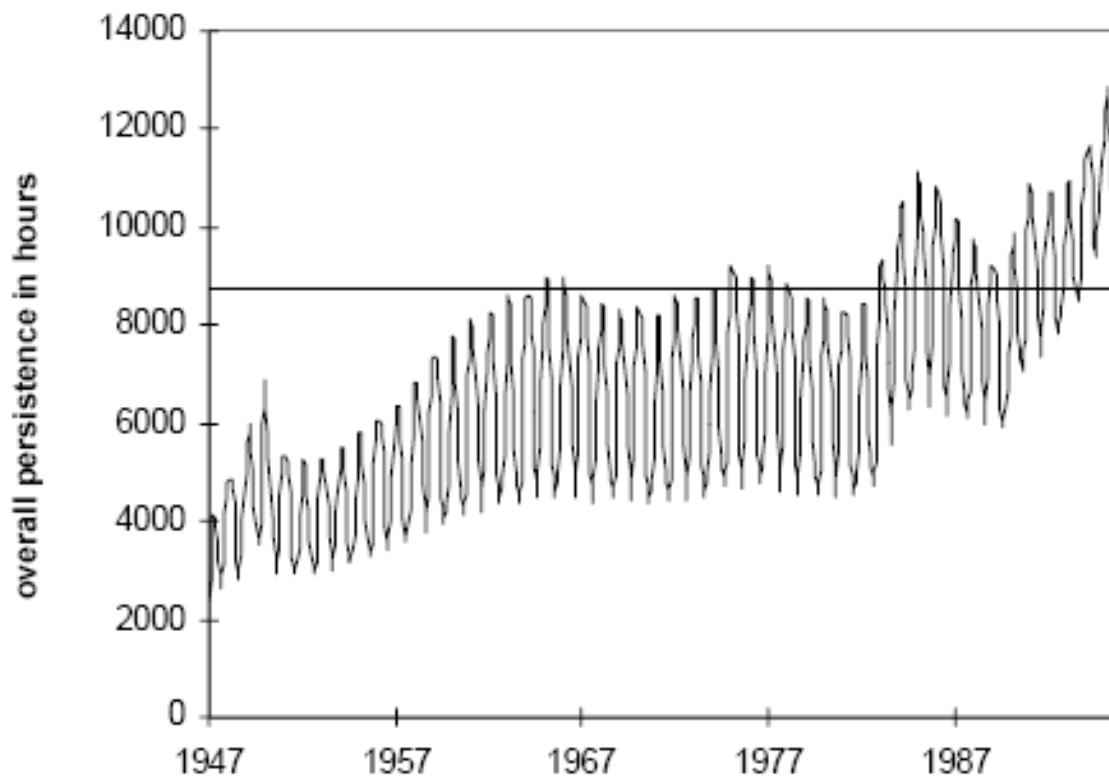
# Ukázka prezentace výsledků modelu

## ▣ Grafy



# Ukázka prezentace výsledků modelu

## ▣ Grafy- dynamické modely





# Závěr

- **The Canadian Centre for Environmental Modelling and chemistry**
  - ChemCAN Model
- **U.S. Environmental Protection Agency**
  - Estimation Program Interface (EPI) Suite
- **EQC, CalTox, SimpleBox, ELPOS, TAPL3, BETRGlobal, ClimoChem, CemoS2, PLANTX, MSCE-POP, HYSPLIT, CHEMCAN, CTSPAC, NIAES-MMM-Global model, CoZmo-POP**

# Doporučená literatura

- ❑ **Mackay, D. Multimedia Environmental Models: The Fugacity Approach - Second Edition, Lewis Publishers, Boca Raton Fl. 2001.**
- ❑ **Mackay, D. et al. An introduction to multimedia models. CEMC Report No. 2001/02, 2001.**
- ❑ **Mackay, D.; Paterson, S.; Di Guardo, A.; Cowan, C.E. Evaluating the environmental fate of types of chemicals using the EQC model. Environmental Toxicology and Chemistry 1996,15,1627-1637.**
- ❑ **Schnoor, J.L. Environmental modeling. Fate and transport of pollutants in water, air and soil. Wiley-Interscience. 1996**
- ❑ **Ramaswami, A.; Milford, J.B.; Mitchell, J. Small. Integrated environmental modeling. Pollutant transport, fate and risk in the environment. John Wiley and sons. INC. 2005**
- ❑ **Komprda, J.; Kubosova, K.; Dvorska, A.; Scheringer, M.; Klanova, J.; Holoubek, I. Application of an unsteady state environmental distribution model to a decadal time series of PAH concentrations in Central Europe. Journal of Environmental Monitoring 2009,11, 269-276.**
- ❑ **Wania, F.; Persson, J.; Di Guardo, A.; McLachlan, M.S. A fugacity-based multi-compartmental mass balance model of the fate of persistent organic pollutants in the coastal zone. WECC-Report 1/2000, 2000.**
- ❑ **Wania, F.; Persson, J.; Di Guardo, A.; McLachlan, M.S. The POPCYCLING-Baltic Model A Non-Steady State Multicompartment Mass Balance Model of the Fate of Persistent Organic Pollutants in the Baltic Sea Environment. NILU: OR 10/2000.**