

## Modelling and Interpretation of Environmental Data

### Cvičení #4

#### Level II Model a rezidenční časy polutantů v prostředí

Vliv emisí na osud polutantů v životním prostředí.

Pro model level II nebyl zatím v přednášce diskutován vliv kompartmentu do kterého směřuje emise na celkovou distribuci.

**Úkol 1:** Změňte emise alfa-HCH v tabulce ze cvičení č. 3 na 50% do vzduchu a 50% do vody. Jak to ovlivní distribuci látky v prostředí ve vyjádření  $T_{ov}$ ,  $P_{ov}$  a  $A_{ov}$ ? Proč? Výsledek vyjádřete pouze odpovědí, bez tabulek.

Rovnovážné rozdělení v půdě.

**Úkol 2:** Půdní kompartment se skládá ze tří fází za podmínek TD rovnováhy: vzduch (A), voda (W) a tuhá složka (S).

Předpokládejme, že „průměrná“ půda se sestává z 20% vzduchu ( $V_{air}/V_{tot}$ ), 30% vody a 50% tuhé fáze. Tuhá složka obsahuje 2% organického uhlíku ( $f_{oc}$ ) a má hustotu ( $\rho_s$ ) 2.5 kg/L. Dále předpokládáme, že rozdělovací koeficient mezi tuhou frakcí a vodou ( $K_{sw}$ ) lze vypočítat pomocí rovnice:  $K_{sw} = f_{oc} \cdot \rho_s \cdot K_{oc} = f_{oc} \cdot \rho_s \cdot 0.35 \cdot K_{ow}$ .

Odvoďte matematickou rovnici pro výpočet frakce polutantu v půdním vzduchu ( $\Phi_A$ ) jako funkci objemových frakcí všech tří fází a rozdělovacích koeficientů  $K_{ow}$ ,  $K_{aw}$  a/nebo  $K_{oa}$ . Pro které kombinace hodnot  $K_{ow}$ ,  $K_{aw}$  a/nebo  $K_{oa}$  se hypotetická chemická látka převážně vyskytuje v plynné fázi ( $\Phi_A$  vyšší než 0.50)?

Analogicky odvoďte rovnici pro frakci chemické látky v půdním roztoku (vodě) ( $\Phi_W$ ) a tuhé frakci ( $\Phi_S$ ) jako funkci objemových frakcí a rozdělovacích koeficientů  $K_{ow}$ ,  $K_{aw}$  a/nebo  $K_{oa}$ . Pro které kombinace hodnot  $K_{ow}$ ,  $K_{aw}$  a/nebo  $K_{oa}$  se chemická látka převážně nachází v půdním roztoku ( $\Phi_W$  vyšší než 0.50), nebo v tuhé fázi ( $\Phi_S$  vyšší než 0.50)?

Vytvořte si následující tabulku pro určení dominantní fáze s frakcí polutantu  $\Phi$ . Začněte tím, že budete měnit  $K_{aw}$  od -5 do 5 pro  $\log K_{ow}=0$ , analogicky pokračujte pro další hodnoty  $K_{ow}$ , nebo  $K_{oa}$  atd..

Log Kaw	Log Kow	Log Koa		Phi-A	Phi-W	Phi-S
-5	0	5		...	...	...
-4	0	4		...	...	...
...	...	...		...	...	...