

# Utjecaj transportnih parametara na procjenu rizika u vodonosnicima

---

**Alagić, Antonija**

**Master's thesis / Diplomski rad**

**2015**

*Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj:*

**University of Split, Faculty of Civil Engineering, Architecture and Geodesy / Sveučilište u Splitu, Fakultet građevinarstva, arhitekture i geodezije**

*Permanent link / Trajna poveznica:* <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:123:053891>

*Rights / Prava:* [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

*Download date / Datum preuzimanja:* **2024-07-22**



*Repository / Repozitorij:*

[FCEAG Repository - Repository of the Faculty of Civil Engineering, Architecture and Geodesy, University of Split](#)



**SVEUČILIŠTE U SPLITU  
FAKULTET GRAĐEVINARSTVA ARHITEKTURE I GEODEZIJE**

# **DIPLOMSKI RAD**

**Antonija Alagić**

**Split, 2015.**

**SVEUČILIŠTE U SPLITU  
FAKULTET GRAĐEVINARSTVA ARHITEKTURE I GEODEZIJE**

**Antonija Alagić**

**Utjecaj transportnih parametara na procjenu rizika u  
vodonosnicima**

**Diplomski rad**

**Split, 2015.**

**SVEUČILIŠTE U SPLITU**  
**FAKULTET GRAĐEVINARSTVA, ARHITEKTURE I GEODEZIJE**

STUDIJ: **DIPLOMSKI SVEUČILIŠNI STUDIJ GRAĐEVINARSTVA**  
KANDIDAT: Antonija Alagić  
BROJ INDEKSA: 483  
KATEDRA: **Katedra za privrednu hidrotehniku**  
PREDMET: Modeliranje toka i pronosa u podzemlju

**ZADATAK ZA DIPLOMSKI RAD**

Tema: Utjecaj transportnih parametara na procjenu rizika u vodonosnicima

Opis zadatka: Od kandidatkinje se očekuje da ispita utjecaj varijance i strukture polja konduktiviteta te procesa advekcije i disperzije na varijacije polja koncentracije u vodonosnicima. Za ulazne podatke koristiti rezultate Monte-Carlo simulacija na osnovu kojih treba definirati funkcije gustoće vjerojatnosti ili kumulativne funkcije distribucije iste varijable. Kroz svojstva i izgled navedenih funkcija potrebno je identificirati utjecaj svakog od navedenih parametara. U drugom koraku potrebno je koristiti Beta distribuciju te izvršiti usporedbu sa MC distribucijama. Analizu rizika izvršiti konceptom granične vrijednosti za MC distribucije i Beta distribucije te analizirati eventualne razlike u izlaznim vrijednostima procjene rizika.

U Splitu, 08. rujna 2015.

Voditelj Diplomskog rada:

doc.dr.sc. Veljko Srzić

Predsjednik Povjerenstva  
za završne i diplomske ispite:  
Prof. dr. sc. Ivica Boko

# Utjecaj transportnih parametara na procjenu rizika u vodonosnicima

## *Sažetak:*

Promatra se utjecaj strukture polja hidrauličkog konduktiviteta, Peclet-ov broja i varijance konduktiviteta na vrijednosti koncentracije te u konačnici i na sami rizik. Za dobivanje CDF-a korištene su Monte Carlo metoda i Beta distribucija. Na osnovu dobivenih rezultata definira se valjanost Beta distribucije da opiše varijacije koncentracije i mogućnost korištenja iste u procjeni rizika.

## *Ključne riječi:*

Advekcija, disperzija, hidraulički konduktivitet, Peclet-ov broj, varijanca konduktiviteta, izloženost, referentna doza, Monte Carlo metoda, Beta distribucija, procjena rizika

# Impact of transport parameters to risk assessment in aquifers

## *Abstract:*

The main task of the work is to investigate how the hydraulic conductivity structure, Peclet value and hydraulic conductivity variance influence the concentration fluctuations and appropriate risk probabilities. Both Monte-Carlo method and the Beta distribution are used to obtain the cumulative distribution functions of the concentration scalar. Based on the obtained results, the validity of Beta distribution to capture the concentration fluctuation and to be used in risk assessment, is investigated.

## *Keywords:*

Advection, dispersion, hydraulic conductivity, Peclet's number, variance of the conductivity, exposure, reference dose, Monte Carlo method, Beta distribution, risk assessment

## Sadržaj

1. Uvod.....	3
2. Pronos tvari .....	4
2.1 Advektivni transport .....	4
2.2. Dispezivni transport.....	5
2.2.1. Molekularna difuzija .....	5
2.2.2. Mehanička disperzija .....	6
3. Opis polja koncentracije.....	9
3.1. Utjecaj strukture tla .....	10
3.2. Utjecaj disperzije .....	13
3.3. Utjecaj varijance konduktiviteta.....	16
4. Procjena izloženosti.....	18
4.1. Karakterizacija potencijalno izloženih populacija.....	18
4.2. Kvantificiranje izloženosti prema USEPA [1] .....	19
4.3. Procjena izloženosti koncentracije u podzemnim vodama.....	20
4.4 Unos podzemnih i površinskih voda .....	20
5. Toksikološka procjena za nekancerogene učinke .....	21
5.1. Pojam praga .....	21
5.2. Izvođenje oralnog RfDa.....	21
5.3. Log-normalna distribucija Cs .....	24
6. Procjena nekancerogenog rizika temeljena na konceptu granične vrijednosti.....	25
6.1. Utjecaj strukture polja konduktiviteta na rizik dobiven pomoću MC metode .....	27
6.2. Utjecaj Pe-broja na rizik dobiven pomoću MC metode .....	28
6.3 Utjecaj varijance konduktiviteta na rizik dobiven pomoću MC metode .....	29
6.4. Utjecaj različitih parametara srednje vrijednosti lognormalne distribucije dobiven pomoću MC metode .....	31
7. Beta distribucija.....	32
7.1. Usporedba Beta distribucije i Monte Carla u ovisnosti o strukturi tla .....	33
7.2. Usporedba Beta distribucije i Monte Carla u ovisnosti o disperziji .....	35
7.3. Usporedba Beta distribucije i Monte Carla u ovisnosti o varijanci konduktiviteta.....	37
8. Procjena nekancerogenog rizika pomoću Monte Carlo i Beta distribucije temeljena na konceptu granične vrijednosti .....	39

---

8.1. Usporedba rizika Beta distribucije i Monte Carla za strukture tla .....	39
8.2. Usporedba rizika Beta distribucije i Monte Carla za Pe-broj .....	40
8.3 Usporedba rizika Beta distribucije i Monte Carla za varijance konduktiviteta .....	41
8.4. Usporedba rizika Beta distribucije i Monte Carla za različite parametare srednje vrijednosti lognormalne distribucije .....	42
9. Zaključak .....	43
10. Literatura .....	45

## **1. Uvod**

Podzemne vode su jedan od najvažnijih slatkovodnih resursa. Voda u podzemlje dolazi primarno kao posljedica oborina, procesima infiltracije i perkolacije kroz poroznu sredinu. Intezitet kojim voda ulazi u podzemlje do zasićene zone određen je karakteristikama podzemnog medija, te stupnjom heterogenosti. Podzemne vode čine najveći odjeljak tekuće svježe vode. Fizičke, biološke ili kemijske promjene u kvaliteti vode koje negativno utječu na žive organizme ili čine vodu neprikladnom za željene namjene može se smatrati onečišćenjem [4]. Postoje prirodni izvori onečišćenja kao što su otrovni izvori, curenje nafte i sedimentacija od erozije. No, u ovom radu promatra se promjene uzrokovane ljudskim utjecajem na kvalitetu vode i upotrebljivost.

Procjenjivanje koncentracije izloženosti u podzemnim vodama pomoću modela može biti složen zadatak zbog mnogih fizičkih i kemijskih procesa koji mogu utjecati na transport i transformaciju u podzemnim vodama. Detaljni postupak procjene izloženosti počinje nakon što su podaci o kemikalijama prikupljeni i potvrđeni i kada se odaberu određene kemikalije koje mogu biti potencijalan razlog za brigu.

Korištene su Monte Carlo Metoda i Beta distribucija kako bi se na samom kraju zaključilo može li Beta distribucija dobro opisati sve varijacije koncentracije kod ovakvog tipa problema.

Također, promatra se utjecaj strukture polja hidrauličkog konduktiviteta, Peclet-ov broj i varijanca konduktiviteta na vrijednosti koncentracije te u konačnici i na sami rizik.

Funkcija gustoće vjerojatnosti koncentracija koje čovjek može konzumacijom vode unijeti u organizam opisuje se log-normalnom distribucijom. Prikazat će se rizik za različite parametre srednje vrijednosti (0.1, 0.2 i 0.3) te za standardnu devijaciju 0.1.



## 2. Pronos tvari

Način prodora tvari u podzemlje, oblik pronosa tvari, koncentracija tvari i njegovo trajanje ovise ponajprije o značajkama vodonosnika i njegove neposredne krovine i podine, te o tipu izvora onečišćenja [6].

Pronos tvari u vodonosniku vrlo je složen proces koji ovisi o:

- hidrogeološkim značajkama vodonosnika;
- stanju i tečenju podzemne vode;
- fizikalnim i kemijskim procesima koji se odvijaju između onečišćivača, podzemne vode i minerala od kojih se sastoje čestice vodonosnika;
- fizikalnim i kemijskim značajkama onečišćivača;
- načinu i mjestu unosa onečišćivača u podzemlje

Pronos mase kroz porozni medij opisan je jednadžbom pronosa koja obuhvaća procese advekcije i disperzije.

### 2.1 Advektivni transport

Advekcija je proces pomicanja zagađenja kroz poroznu formaciju uzrokovan brzinom toka vode u istoj. Brzina advektivnog transporta odgovara stvarnoj brzini tečenja u podzemlju, a u 1-D slučaju stvarna brzina može se izraziti preko Darcy-eve [7] :

$$v_x = \frac{K}{n_{ef}} \frac{dh}{dl}$$

gdje je  $v_x$  - stvarna brzina toka ( $LT^{-1}$ )

$K$  - hidraulička propusnost ( $LT^{-1}$ )

$h$  - piezometarska visina (L)

$l$  - duljina (L)

$n_{ef}$  - poroznost

Protok mase kroz neki kontrolni presjek označen s  $K_p$ , uzrokovan advekcijom jednak je iznosu umnoška toka vode i koncentracije:

$$K_p = v_x n_{ef} C$$

Advektivni pronos opisan je advekcijском јednadžbom

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v_x \frac{\partial C}{\partial x}$$

pri čemu je  $C$  - koncentracija mase ( $\text{ML}^{-3}$ )

$t$  - vrijeme (T)

$v_x$  - stvarna brzina ( $\text{LT}^{-1}$ )

$\frac{\partial C}{\partial x}$  - gradijent koncentracije ( $\text{ML}^{-4}$ )

## 2.2. Dispeziivni transport

Hidrodinamička disperzija je proces širenja otopljene tvari u podzemnoj vodi u smjeru njezina gibanja i okomito na taj smjer mehanizmima difuzije i fizičkog miješanja podzemne vode s vodom koja ima manje koncentracije otopljenih tvari. Ona je posljedica mehaničke disperzije i molekularne difuzije [6].

### 2.2.1. Molekularna difuzija

Pronos uzrokovan molekularnom difuzijom je posljedica razlike u koncentraciji promatrane tvari u otopini [8]. Protok promatrane tvari unutar neke otopine uzrokovan difuzijom se može opisati prvim Fickovim zakonom:

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x}$$

pri čemu je  $J$  - fluks mase ( $\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$ )

$D$  - koeficijent difuzije ( $\text{L}^2\text{T}^{-1}$ )

$\frac{\partial C}{\partial x}$  - gradijent koncentracije ( $\text{ML}^{-4}$ )

Fick-ov zakon kaže da je masa zagađenja koja prolazi nekim kontrolnim presjekom jedinične površine u jedinici vremena, proporcionalna gradijentu koncentracije u tom smjeru. Negativan predznak je potreban kako bi se osiguralo da fluks mase ima točan smjer.

Difuzija ima tendenciju minimizirati gradijente uzrokujući tok mase iz područja visoke u područje male koncentracije.

Uvodeći Fickov prvi zakon u nestacionarnu jednadžbu kontinuiteta zapisan u obliku:

$$-\nabla \cdot \rho \cdot \mathbf{J} = \frac{\partial \rho C}{\partial t}$$

Pri čemu je  $\nabla$ - Laplaceov diferencijalni operator

$\rho$ - gustoća fluida ( $\text{ML}^{-3}$ )

$\mathbf{J}$ - fluks mase ( $\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$ )

$C$ - koncentracija mase ( $\text{ML}^{-3}$ )

$t$ - vrijeme (T)

Konačni oblik difuzne jednadžbe u 1-D je

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{\partial C}{\partial t}$$

gdje je  $D$ -koeficijent molekularne difuzije ( $\text{L}^2\text{T}^{-1}$ )

$C$ - koncentracija mase ( $\text{ML}^{-3}$ )

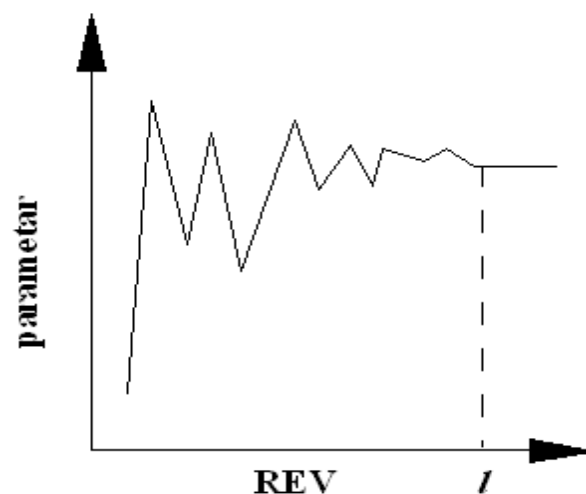
$t$ - vrijeme (T)

$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$  – druga derivacija koncentracije

### 2.2.2. Mehanička disperzija

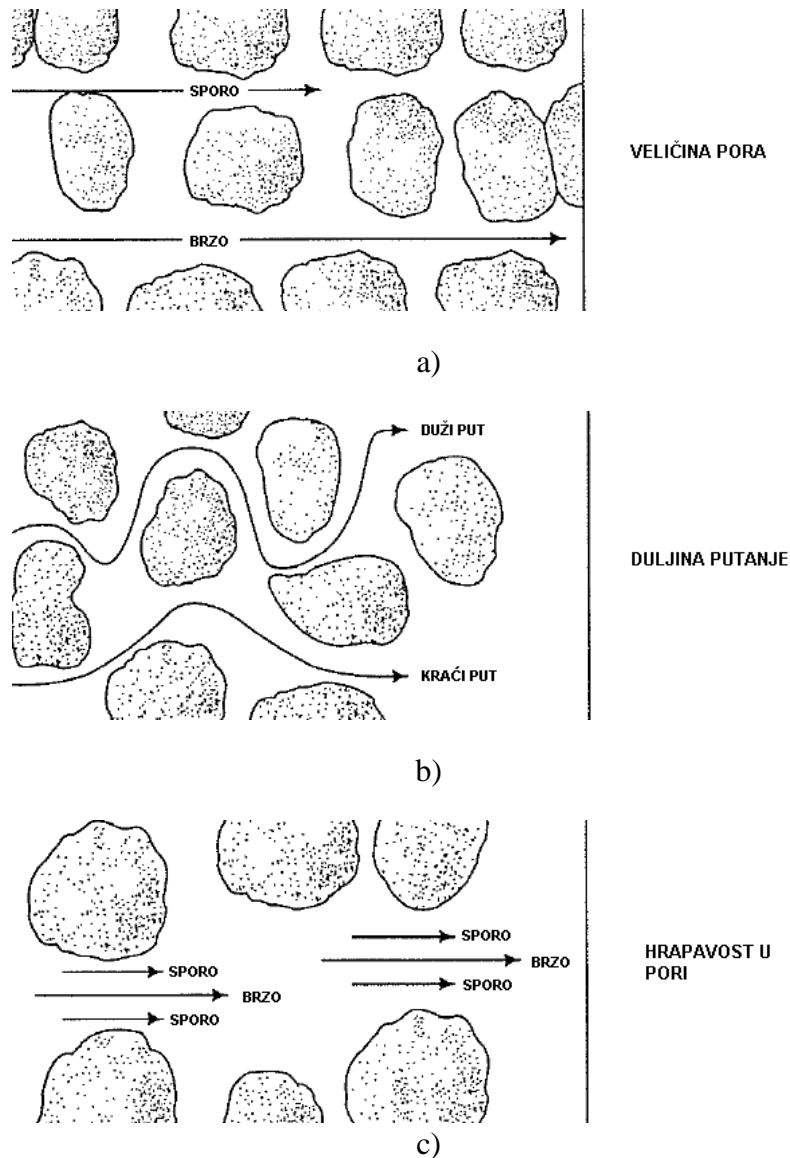
Mehanička disperzija uzrokovana je fluktuacijom brzina u odnosu na prosječnu brzinu toka, što je posljedica mikroskopske i makroskopske heterogenosti.

Prije određivanja utjecaja mehaničke disperzije na transport zagađenja potrebno je definirati pojam skale na kojoj se promatra tečenje. Skala se kreće od mikro skale do neke velike makro skale. Makro skala veličinom odgovara veličini reprezentativnog elementarnog volumena, ili skale na kojoj mjerena veličina prestaje pokazivati fluktuacijska svojstva [7].



Slika 1. Prikaz reprezentativnog elementarnog volumena

Zbog prirodne heterogenosti poroznog medija na svim skalama su prisutne varijacije brzina po veličini i smjeru što uzrokuje miješanje. Uzroci miješanja na mikroskopskoj skali mogu se iskazati kroz sliku 2. Varijabilnost pore vidi se iz slike 2a. U manjim porama brzine tečenja bit će veće dok će se suprotan efekt javljati u većim porama. Duljina putanje također ima utjecaj jer će se pojedine čestice gibati dužom putanjom dok će se ostatak gibati kraćom.



Slika 2. Prikaz pojave različitih brzina na mikro skali

U presjeku brzine gibanje tekućine u pori, uočava se da je brzina najveća u središtu dok s približavanjem čvrstoj fazi ta brzina opada.

Na makro skali, proces miješanja je uzrokovan heterogenošću poroznog medija, što dodatno stvara varijaciju brzina na svim skalama većim od mikroskale. Istovremeno se događa i molekularna difuzija zbog postojanja gradijenta koncentracije. Možemo reći da je disperzija posljedica različite brzine vode u prostoru na skali manjoj od reprezentativnog elementarnog volumena (REV).

Jednadžba pronosa predstavljena je advektivno-disperzivnom jednadžbom koja obuhvaća procese advekcije i hidrodinamičke disperzije na skali većoj od Darcy-eve ili skale pora.

Advektivno-disperzivna jednadžba:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x}$$

gdje je C- koncentracija mase ( $ML^{-3}$ )

t- vrijeme (T)

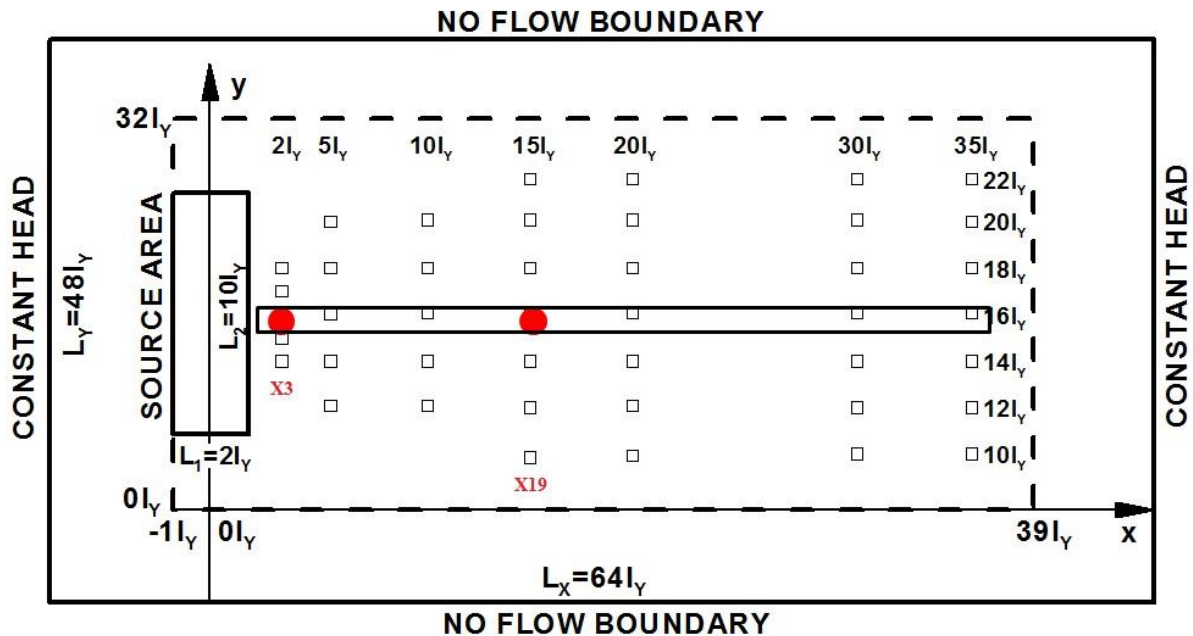
v- brzina toka ( $LT^{-1}$ )

D- tenzor disperzije ( $L^2T^{-1}$ )

### 3. Opis polja koncentracije

Poznati su izlazni rezultati kumulativne funkcije distribucije (CDF) koncentracije za Monte Carlo metodu.

Parametri koji su promatrani: struktura polja hidrauličkog konduktiviteta, Peclet-ov broj i varijance konduktiviteta.



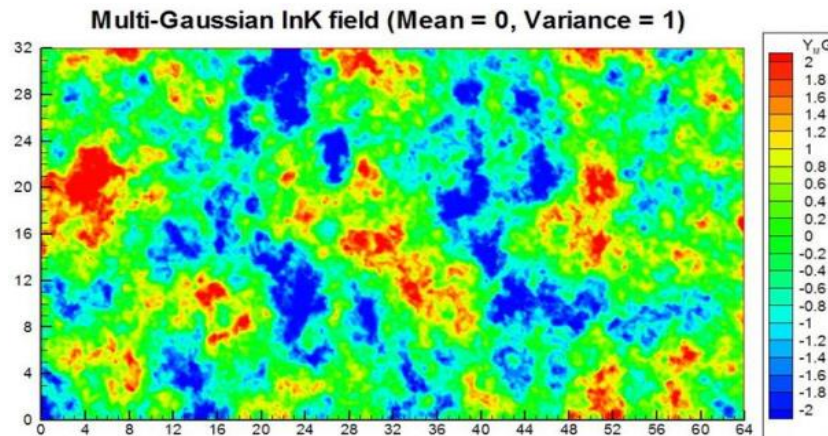
Slika 3. Prikaz lokacija bunara

Promatrani su procesi na manjoj i većoj udaljenosti od mjesta utiskivanja zagađenja, tj na mjestima označenim crvenim kružićima, pri čemu X3 predstavlja točku neposredno u blizini zagađenja, a X19 nešto udaljeniju točku.

Analiziraju se CDF podaci točaka na različitim udaljenostima u odnosu na izvor za određene parametre. Centar oblaka točke X3 definiran je za udaljenost  $2l_y$  i vrijeme  $t=2$ , a točke X19 za udaljenost  $15l_y$  i vrijeme  $t=15$ .  $l_y$  je udaljenost na kojoj su različite vrijednosti polja konduktiviteta međusobno korelirane.

### 3.1. Utjecaj strukture tla

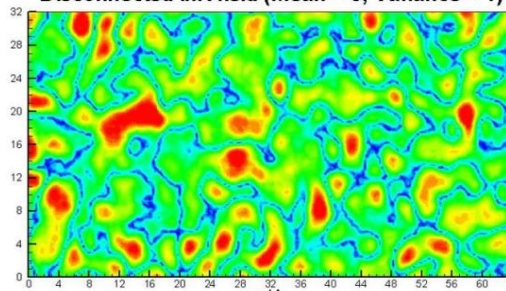
Kod multi Gaussove strukture (MG) prikazane na slici 2, zelena boja je polje hidrauličkog konduktiviteta koje odgovara srednjoj vrijednosti polja konduktiviteta ,tj. srednja vrijednost polja K je značajno korelirana u polju MG.



Slika 4. Prikaz Multi Gaussova strukture tla

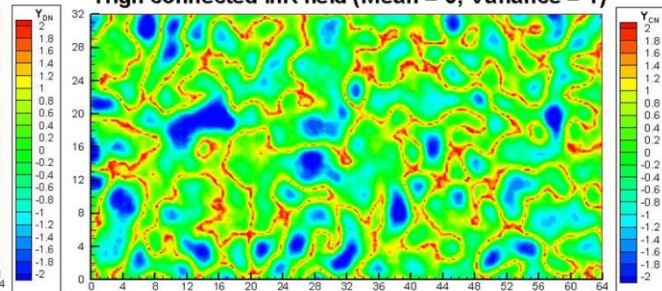
DN struktura označava kanale slabe vodljivosti koji su značajno korelirani, dok su kanali dobre vodljivosti slabo korelirani. Postoji i CN struktura polja kod koje su kanali dobre vodljivosti povezani, nego oni slabije propusnosti.

**Disconnected lnK field (Mean = 0, Variance = 1)**



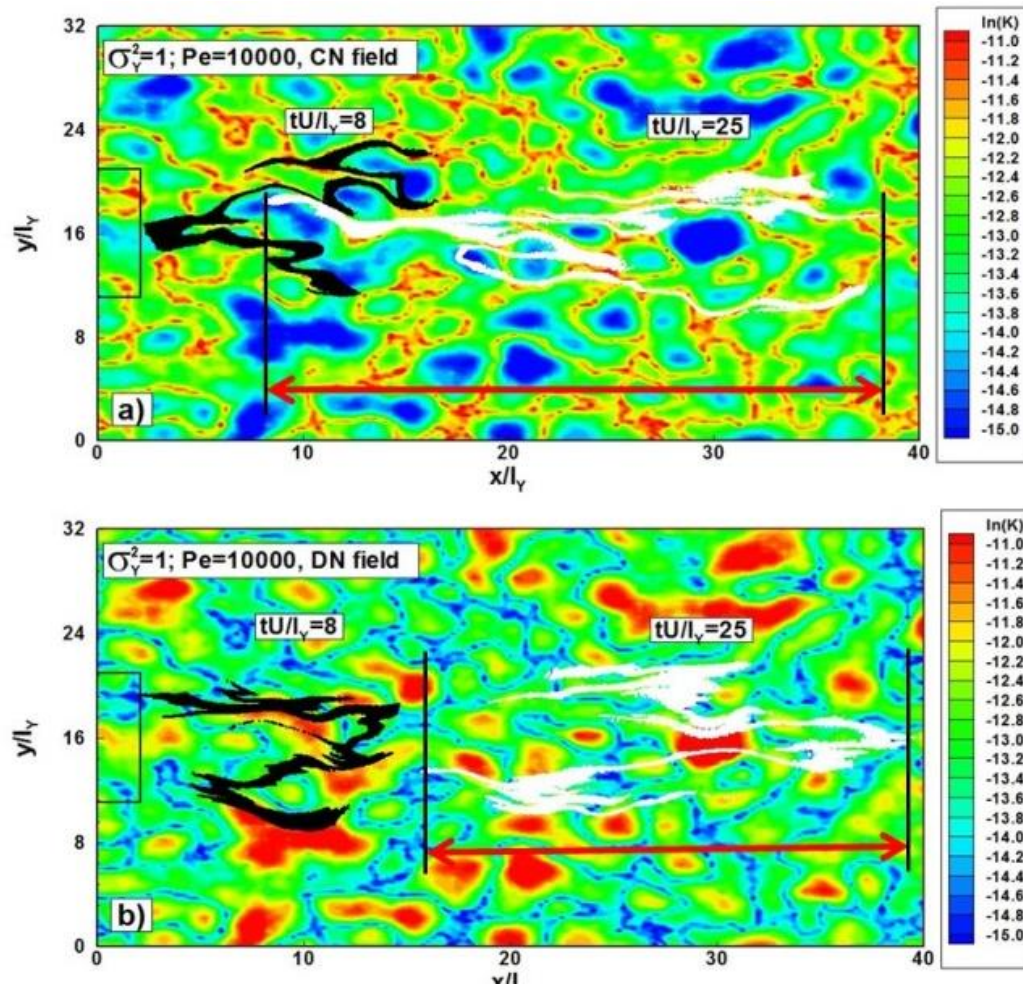
Slika 5. Prikaz DN strukture tla

**High connected lnK field (Mean = 0, Variance = 1)**



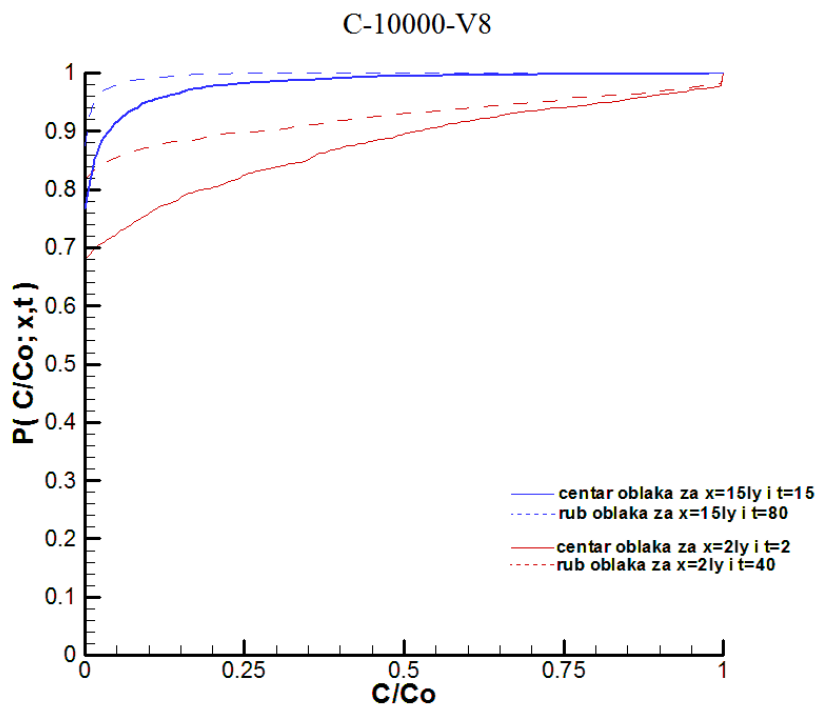
Slika 6. Prikaz CN strukture tla

Koliko hidraulički konduktivitet utječe na geometriju oblaka može se vidjeti iz slike 7.

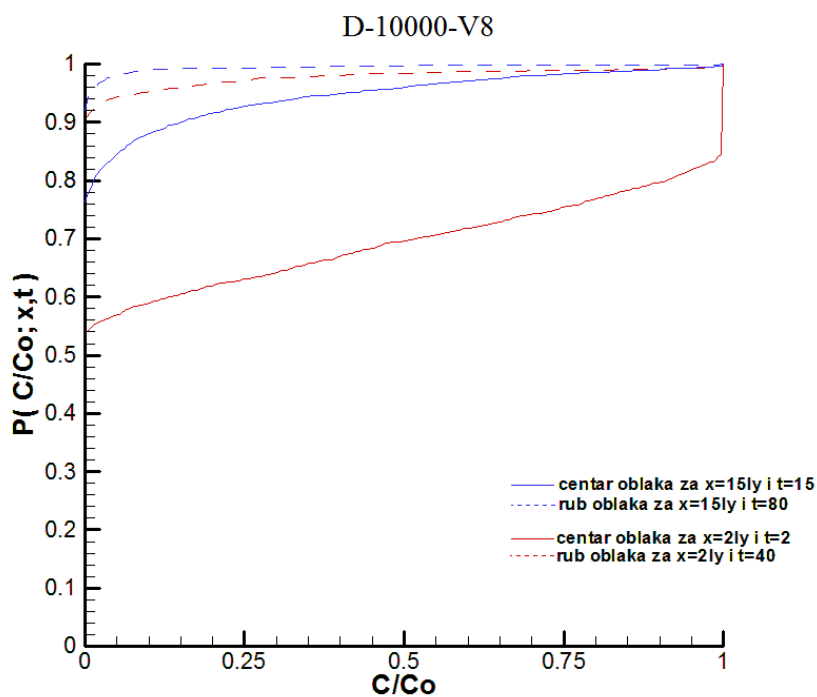


Slika 7. Prikaz rasporeda čestica Random Walk Particle Tracking modela

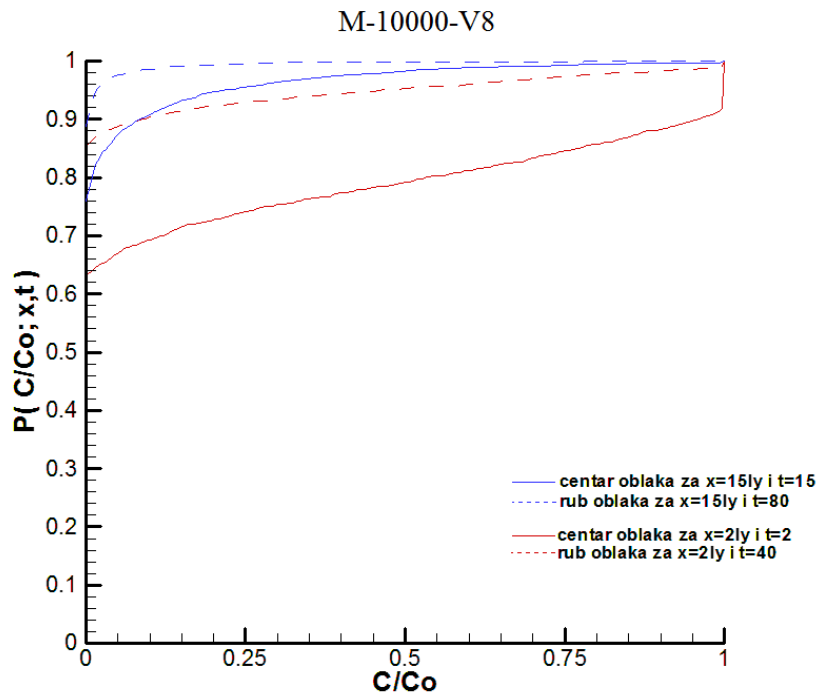




Slika 8. Prikaz CDF-a za Pe broj 10000, varijancu konduktiviteta 8 i CN strukturu tla



Slika 9. Prikaz CDF-a za Pe broj 10000, varijancu konduktiviteta 8 i DN strukturu tla



Slika 10. Prikaz CDF-a za Pe broj 10000, varijancu konduktiviteta 8 i Multi Gaussovu (MG) strukturu tla

Promatra se utjecaj strukture na koncentraciju za Pe broj 10000 i varijancu konduktiviteta 8. Ukoliko se promatra centar oblaka za  $x=2ly$  vidi se da je najveća pojava nula u CN strukturi, tj. najmanja je učestalost pojavljivanja koncentracije  $C_0$ . No, promatrajući rub oblaka za  $x=2ly$  vidi se da je najmanja pojava nula u CN strukturi, a najveća u DN strukturi.

### 3.2. Utjecaj disperzije

Peclet-ov broj predstavlja odnos procesa advekcije naspram procesa disperzije.

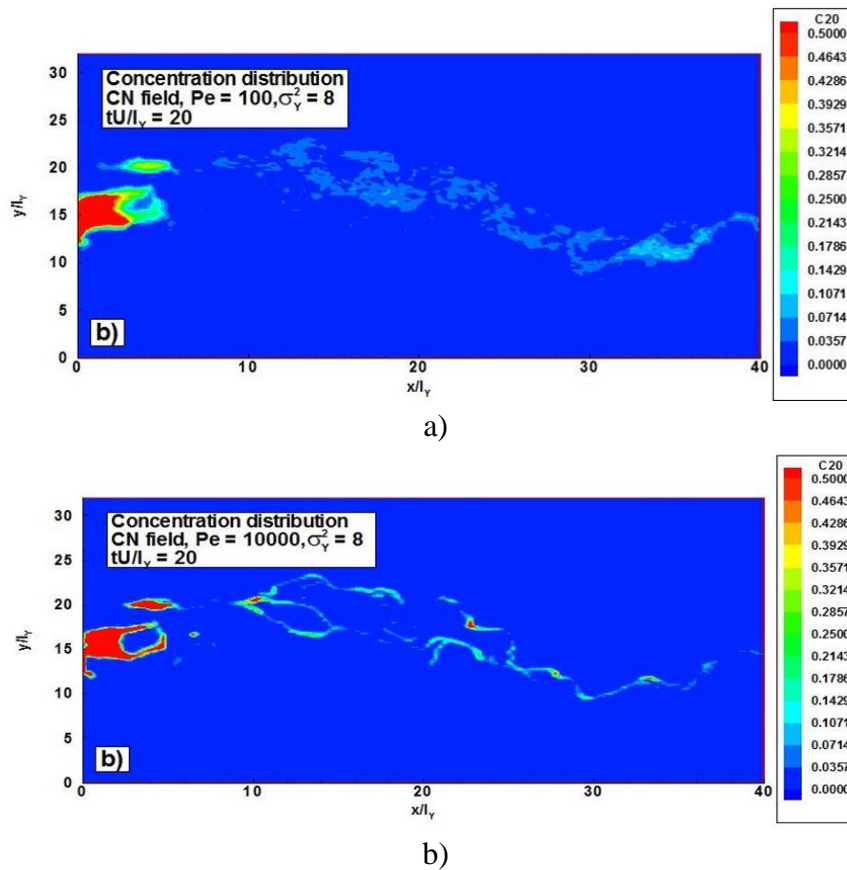
$$Pe = \frac{v \cdot \Delta x}{D}$$

gdje je

$\Delta x$  - duljina elementa u smjeru tečenja podzemne vode (L)

$v$  - prosječna brzina toka podzemnih voda ( $LT^{-1}$ )

$D$  - koeficijent disperzije ( $L^2T^{-1}$ )



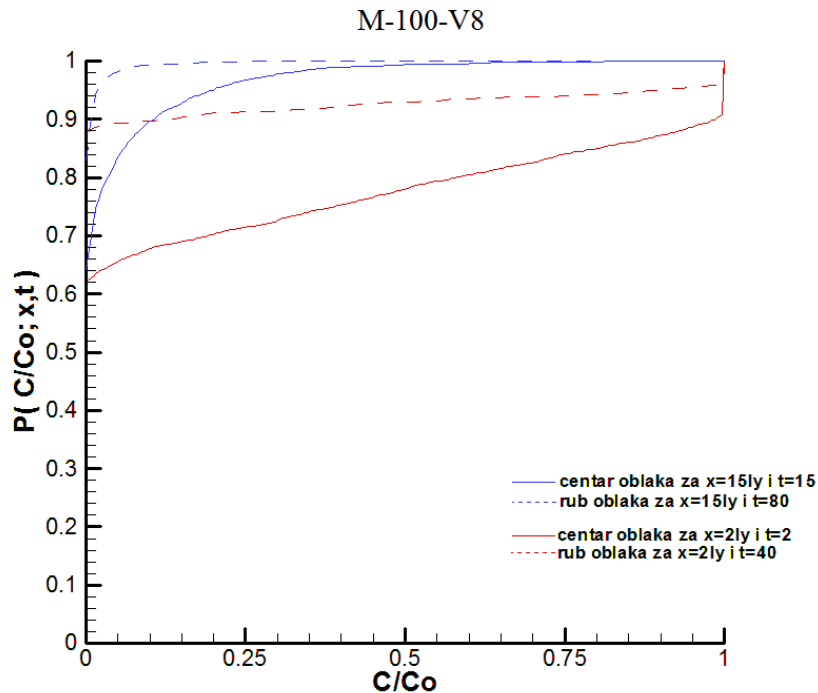
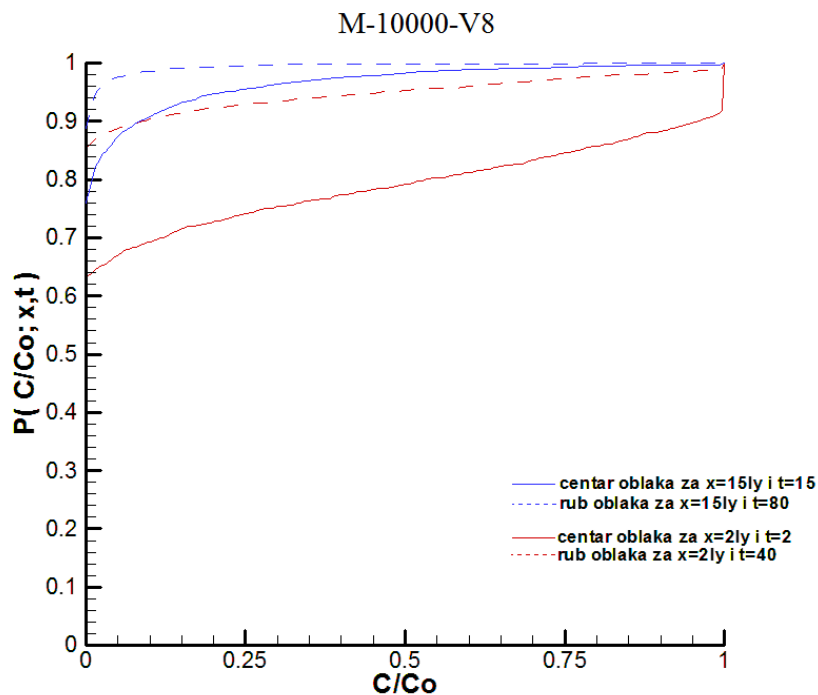
Slika 11. Pikaz koncentracije u CN strukturi za različite Pe brojeve  
a) Pe=100 i b) Pe=10000

Poznato je da je koncentracija jednaka omjeru mase otopljene tvari i volumena otopine:

$$C = \frac{m}{V}$$

Uzme li se da je koncentracija  $C_0$  konstantna vrijednost i da tvar nije kemijski reaktivna, masa ostaje konstantna.

Utjecaj razrijeđenja najjači je na rubovima oblaka jer su tamo gradijenti koncentracije najveći. Promatrajući koncentracije, intenzivnije razrjeđenje opaža se za manje Pe brojeve zbog toga što je tada utjecaj disperzije intenzivniji.

Slika 12. Prikaz CDF-a za multi Gaussovu strukturu, varijancu konduktiviteta 8 i  $Pe=100$ 

b)

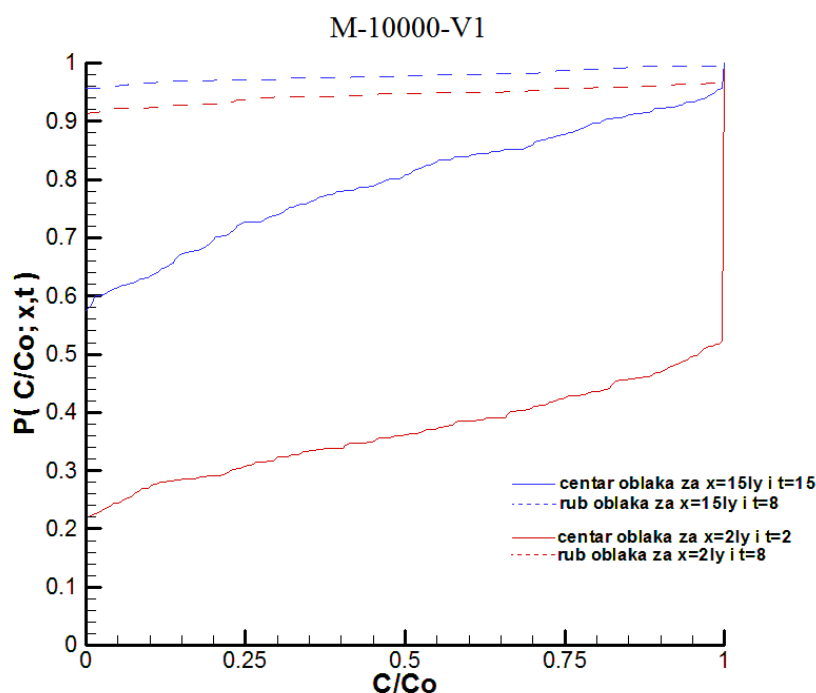
Slika 13. Prikaz CDF-a za multi Gaussovu strukturu, varijancu konduktiviteta 8 i  $Pe=10000$ 

Uspoređujući sliku 12 i sliku 13 uočava se da za bližu točku utjecaj disperzije izostaje. Razlog tome je što disperziji treba vremena da se razvije i da bude vidljiva u rezultatima. Ukoliko se promatra centar oblaka za  $x=15l_y$  vidi se da je pojavljivanje nula veće za  $Pe=10000$ , tj. najmanja je učestalost pojavljivanja koncentracije  $C_0$ . Povećanjem udaljenosti opada utjecaj

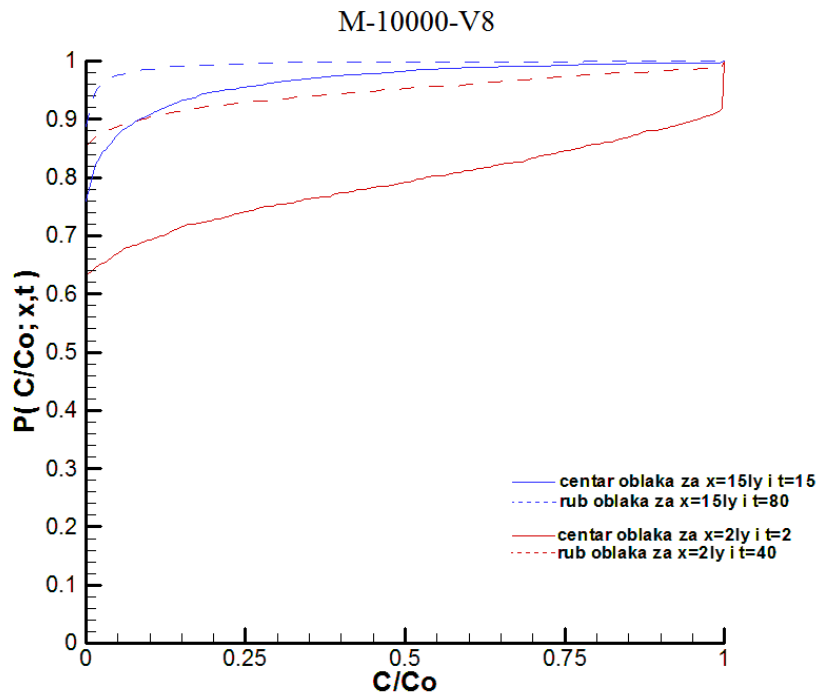
početnog uvjeta tj. veličine i oblika izvora onečišćenja. S povećanjem udaljenosti od izvora oblak se više širi i poprima nepravilnu geometriju zbog utjecaja brzina kojima je oblak nošen nizvodno od izvora. Svaka ćelija ima svoj konduktivitet, a kako je brzina definirana Darcy-evim zakonom onda je brzina ovisna o konduktivitetu pa je samim time od ćelije do ćelije različita smjerom i iznosom. Za  $Pe = 10000$  s većom udaljenošću oblak postaje stanjen a razlika brzih i sporijih dijelova oblaka uzrokuje pojavu stanjenih dijelova oblaka koji idu brže (Slika 7 i Slika 11b). Zbog stanjenog oblika oblak lakše zaobilazi lokaciju na kojoj se koncentracija bilježi pa se samim time učestalost pojave nultih vrijednosti koncentracije povećava.

Za  $Pe=100$  CDF postiže jediničnu vrijednost za manje vrijednosti koncentracije što ukazuje na veću disperziju. Povećanjem udaljenosti od izvora zagađenja disperzija počinje poprimiti sve veći utjecaj na oblak jer se širi. Kako je koncentracija najveća na rubovima oblaka, po Fickovom zakonu protok mase iz oblaka u područje van oblaka veće je što je gradijent veći. Iz slike 11a vidi se da za  $Pe=100$  boja oblaka nije jedinstvena, možemo uočiti prijelaz iz veće koncentracije u manju. Samim tim uočljivo je da će koncentracija  $C_0$  prije iščeznuti.

### 3.3. Utjecaj varijance konduktiviteta



Slika 14. Prikaz CDF-a za multi Gaussovu strukturu, Pe broj 10000 i varijancu konduktiviteta  $V=1$



Slika 15. Prikaz CDF-a za multi Gaussovu strukturu, Pe broj 10000 i varijancu konduktiviteta  $V=8$

Manja varijanca konduktiviteta znači manju prostornu varijabilnost brzina što oblak drži na okupu. U tom slučaju nema „tankih“ rubova na kojima su gradijenti najveći kao što je objašnjeno u poglavlju 3.2. Veća varijanca karakterizirana je većim vrijednostima nula i manjim učestalostima maksimalne koncentracije.

Iz slike 14 i slike 15 vidi se da za manju varijancu konduktiviteta imamo veću učestalost pojava koncentracija  $C_0$ .

## **4. Procjena izloženosti**

Izloženost se definira kao kontakt ljudi s kemijskim ili fizičkim sredstvom. Procjena izloženosti je utvrđivanje ili procjena veličine, učestalosti, trajanje i rute izlaganja.

Detaljni postupak procjene izloženosti počinje nakon što su podaci o kemikalijama prikupljeni i potvrđeni i kada se odaberu određene kemikalije koje mogu biti potencijalan razlog za brigu.

Proces procjene izloženosti sastoji se od tri koraka:

1. Karakterizacije okolnosti izloženosti (fizička okolina i potencijalno izložene populacije)
2. Prepoznavanja putova izlaganja (kemijski izvor, točku izloženosti, pravac izloženosti)
3. Kvantificiranja izloženosti

Treći korak se često provodi u dvije faze. Prva je procjena koncentracija izloženosti, a druga je računanje kemijskog unosa.

Kemijski unosi se računaju pomoću jednadžbi koje uključuju varijable za koncentraciju izloženosti, učestalost izloženosti, učestalost kontakta, vremensko trajanje izloženosti, težine tijela i prosječno vrijeme izloženosti[1].

### **4.1. Karakterizacija potencijalno izloženih populacija**

Uzima se u obzir položaj trenutne populacije u odnosu na mjesto zagađenja, određeno je trenutno korištenje zemljišta te su karakterizirani obrasci aktivnosti na sljedeći način:

1. Određen je postotak vremena koje potencijalno izložene populacije provode u potencijalno kontaminiranom području. Na primjer, ako je potencijalno izložena populacija komercijalna ili industrijska, razumno maksimalno dnevno izlaganje je vjerojatno 8 sati (tipičan radni dan). Isto tako, ako je populacija stambena, maksimalno dnevno izlaganje može biti 24 sata.
2. Određeno je da li se aktivnosti primarno javljaju u zatvorenom prostoru, otvorenom, ili oboje. Na primjer, uredski radnici mogu provesti cijelo radno vrijeme u zatvorenom prostoru, dok građevinski radnici mogu cijelo vrijeme biti na otvorenom.
3. Određeno je kako se aktivnosti mijenjaju s godišnjim dobima. Na primjer, neke vanjske, ljetne rekreacijske aktivnosti (plivanje, ribolov) će se pojavljivati rjeđe ili nikako tijekom zimskih mjeseci. Slično tome, djeca će se vjerojatno na otvorenom igrati rjeđe i nosit će više odjeće tijekom zimskih mjeseci.
4. Utvrđeno je da li se sama lokacija može koristiti od strane lokalne populacije, pogotovo ako pristup lokaciji nije ograničen ili na neki drugi način limitiran (npr, udaljenošću). Na primjer,

djeca koja žive u tom području mogu se igrati na licu mjesta, i lokalni stanovnici mogu loviti ili planinariti na licu mjesta.

5. Identificirane su sve karakteristike stanovništva na zadanoj lokaciji koje bi mogle utjecati na izloženost. Na primjer, ako se lokacija nalazi blizu većih trgovačkih ribarnica, potencijalno izložena populacija je vjerojatnija da će jest ribu uhvaćenu na licu mjesta nego populacija koja se nalazi u unutrašnjosti zemlje [1].

#### 4.2. Kvantificiranje izloženosti prema USEPA [1]

Nakon što se pusti u prirodu, kemikalija može biti: transportirana, fizički transformirana (isparavanje, taloženje), kemijski transformirana (fotoliza, hidroliza, oksidacija), biološki transformirana (biološka razgradnja) i/ili akumulirana u jednom ili više medija

Svaka točka potencijalnog kontakta s kontaminiranim medijem je točka izlaganja.

Opća jednadžba za računanje izloženosti kemijskom spoju jest:

$$I = \frac{C * CR * EF * ED}{BW} * \frac{1}{AT}$$

gdje je:

I - unos kemikalija (mg/kgdan)

C - prosječna koncentracija kemikalije tijekom izloženog perioda (mg/l vode)

CR - količina onečišćenja kojoj je prijemnik izložen po jedinici vremena (l/dan)

EF - učestalost izloženosti (dan/god)

ED - trajanje izloženosti (god)

BW - tjelesna težina (kg)

AT - razdoblje u kojem je izloženost osrednjena (dan)



### 4.3. Procjena izloženosti koncentracije u podzemnim vodama

Koncentracija izlaganja u podzemnim vodama može se temeljiti na praćenju podataka ili kombinacijom modeliranja i praćenja podataka. U nekim slučajevima, procjenitelj izlaganja može pogodovati korištenju prikupljenih podataka nad korištenjem složenih modela za razvoj koncentracije izloženosti. Najprikladnije korištenje prikupljenih podataka podzemne vode kao procjene koncentracije izloženosti je kada točke uzorkovanja odgovaraju točkama izlaganja, kao što su uzorci uzeti iz slavina pitkih voda. Međutim, uzorke uzete direktno iz domaćeg bunara ili iz slavine treba oprezno interpretirati.

Podaci o praćenju podzemnih voda su često od male koristi za procjenu dugoročne koncentracije izloženosti jer uglavnom predstavljaju trenutačne uvjete na zadanoj lokaciji a ne dugoročne trendove. Stoga, modeli podzemnih voda mogu biti potrebni za procjenu koncentracije izloženosti. Podatke prikupljene praćenjem treba koristiti kada je moguće da se kalibriraju modeli.

Procjenjivanje koncentracije izloženosti u podzemnim vodama pomoću modela može biti složen zadatak zbog mnogih fizičkih i kemijskih procesa koji mogu utjecati na transport i transformaciju u podzemnim vodama.

U ovom diplomskom radu procjena izloženosti dobivena je iz Monte Carlo simulacija koje su korištene kao ulazni podaci. Prvo su generirane realizacije ulazne varijable, u slučaju tečenja u podzemlju to je hidraulička propusnost. Za dobiveno polje  $K$  vrši se numeričko modeliranje problema tečenja – uz zadane rubne uvjete te određivanje polja brzina u svakoj realizaciji. Transport se simulira u dva koraka: translacija inicijalnog oblaka kao posljedica advekcije i razrjeđenje oblaka kao posljedica disperzivnog dijela advekcijско-disperzijske jednadžbe. Proračunavaju se osnovne varijable pronosa za svaku realizaciju kao što su koncentracija i vrijeme putovanja zagađenja. Postupak se ponavlja za željeni broj realizacija  $N$ . Kao rješenje dobije se  $N$  realizacija tečenja i transporta. Osrednjavanjem po realizacijama dobiju se vrijednosti apsolutnog i centralnog statističkog momenta, parametri oblika, funkcija gustoće vjerojatnosti i funkcija distribucije po prostoru i vremenu. Prilikom odabira broja realizacija  $N$  treba pripaziti. Cijena korištenja manjeg broja realizacija jest pogreška uzorka u statističkom osrednjavanju. Ukoliko se koristi prevelik broj realizacija nailazi se na tehničke poteškoće. Broj realizacija najbolje je odabrati tako da se osigura konvergencija promatrane varijable [9].

### 4.4 Unos podzemnih i površinskih voda

Pojedinci mogu biti izloženi potencijalno opasnim kemikalijama u podzemnim i površinskim vodama na sljedeće načine: uzimanjem podzemne ili površinske voda za piće, slučajnim gutanjem površinske vode prilikom kupanja i kontaktom kože s podzemnom ili površinskom vodom

## 5. Toksikološka procjena za nekancerogene učinke

Kronična referentna doza (RfD) se definira kao procjena dnevnog izlaganja za ljudsku populaciju, uključujući osjetljivu subpopulaciju, koja je dovoljno niska da postoji mala mogućnost pojavljivanja štetnih učinaka tijekom života. Kronični RfD je posebno razvijen da bude zaštita za dugotrajno izlaganje spoju.

### 5.1. Pojam praga

Za mnoge nekancerogene učinke, vjeruje se da postoje mnogi zaštitni mehanizmi koji moraju biti prevladani da bi došlo do manifestacije nepovoljnih učinaka. Na primjer, kada veliki broj stanica izvršava istu ili sličnu radnju, populacija stanica može biti značajno istrošena prije nego se vidi efekt. Kao rezultat, postoji niz izloženosti od nula do neke konačne vrijednosti koje organizam može tolerirati bez mogućnosti pojave štetnih učinaka. U razvoju toksične vrijednosti za ocjenjivanje nekancerogenih učinaka (RfD), pristup mora identificirati gornju granicu raspona tolerancije (tj. maksimalnu razinu ispod praga). Zbog različitosti u ljudskoj populaciji, pokušava se odrediti maksimalna razina ispod praga tolerancije za osjetljive pojedince u populaciji. Za većinu kemikalija, ova razina se može samo procijeniti. RfD uključuje nepouzdanu faktore koji na stupanj ili ekstrapolaciju korištenu da bi se procijenila vrijednost. RfD sažetci u informacijskom sustavu integriranog rizika (IRIS) sadržavaju izjavu o ukupnom povjerenju koje procjenjivači imaju u RfD (visoka, srednja, niska). Općenito je prihvaćeno da RfD ima nepouzdanost koja se kreće od jednog reda veličine ili više, stoga RfD ne treba gledati kao strogo razgraničenju između onoga što bi trebale biti štetne razine[1].

### 5.2. Izvođenje oralnog RfDa

U razvoju oralnog RfDa, sve dostupne studije koje [1] su ispitivale toksičnost kemikalije nakon izlaganja oralnim putem se skupljaju i određuje im se znanstvena vrijednost. Ako su adekvatni ljudski podaci na raspolaganju, te informacije se koriste kao osnova RfD-a. Inače, koriste se životinjski studijski podaci. U tim slučajevima, radi se niz stručnih procjena koje uključuju, među ostalim razlozima, procjenu relevantnosti i znanstvene kvalitete eksperimentalnih studija. Ako se ocjenjuju podaci iz nekoliko istraživanja na životinjama, EPA prvo nastoji identificirati životinjski model koji je najrelevantniji za ljude. U nedostatku vrsta koje su očito najrelevantnije, EPA pretpostavlja da su ljudi osjetljivi na tvar kao i najosjetljivije testirane životinje. Studija na najosjetljivijim vrstama se bira kao kritična studija za određivanje osnovnog RfD-a. Učinak karakteriziran „najnižom-promatranom-nepovoljnom-razinom“ (LOAEL) nakon pretvorbe za podešavanje zbog razlike između vrsta naziva se kritični toksični učinak. Nakon što je izabrana kritična studija i toksični efekt, EPA utvrđuje najvišu eksperimentalnu razinu izloženosti na kojoj nije došlo do nepovoljnih

učinaka. Najviši „stupanj-bez-opaženih-nepovoljnih-učinaka“ (NOAEL) je ključni podatak dobiven iz studije odnosa unos-reakcija. NOAEL promatran u životinjskim studijama gdje je izloženost bila povremena (pet dana u tjednu) se usklađuje kako bi se prikazalo kontinuirano izlaganje.

NOAEL za kritične toksične učinke ne treba mješati sa „stupanj-bez-ikakvog-efekta“ (NOEL). NOEL odgovara razini izlaganja pri kojoj nije primjećen nikakav učinak; često, primjećuju se učinci za koje se smatra da nemaju toksičnog značaja. U nekim studijama, samo je LOAEL, umjesto NOAEL-a, dostupan. Upotreba LOAEL-a zahtjeva primjenu dodatnih faktora nesigurnosti.

Primjena faktora nesigurnosti. RfD se izvodi iz NOAEL-a (ili LOAEL-a) kritičnog toksičnog učinka konstantnom primjenom faktora nesigurnosti (UF) i faktora modificiranja (MF). Faktori nesigurnosti se uglavnom sastoje od višekratnika broja 10 (iako se vrijednosti manje od 10 nekada koriste), gdje svaki faktor predstavlja specifično područje nesigurnosti svojstveno ekstrapolacijama iz dostupnih podataka. Osnove za primjenu različitih faktora nesigurnosti su objašnjeni u nastavku.

UF od 10 se koristi za iskazivanje varijacija u općoj populaciji i namijenjen je zaštititi osjetljivih subpopulacija (djeca, starijim ljudima)

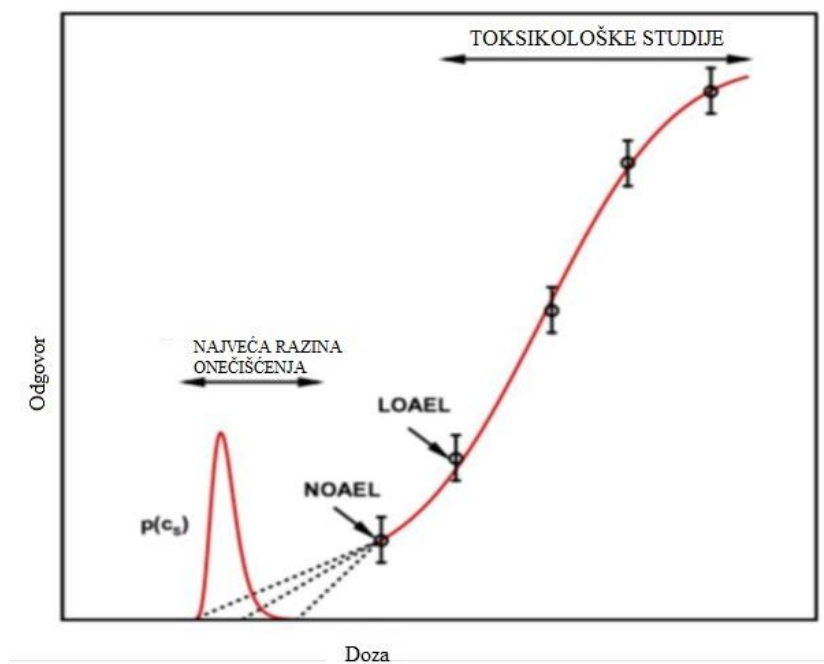
UF od 10 se koristi kada se ekstrapolira od životinja na ljude. Ovaj faktor je namijenjen za iskazivanje različitih varijabilnosti između ljudi i drugih sisavaca.

UF od 10 se koristi kada se NOAEL izveden iz subkronične umjesto kronične studije koristi kao osnova za RfD.

UF od 10 se koristi kada se uzima LOAEL umjesto NOAEL-a. Ovaj faktor je namijenjen za iskazivanje nesigurnosti povezane s ekstrapolacijom iz LOAEL-a u NOAEL.

Osim gore navedenih faktora nesigurnosti, primjenjuje se i faktor modificiranja.

MF u rasponu od 0 do 10 se koristi kako bi se odražavala kvalitativna stručna procjena dodatnih nesigurnosti u kritičnim studijama i u čitavoj bazi podataka za kemikalije koje nisu izričito adresirane prethodnim faktorima nesigurnosti. Zadana vrijednost za MF je 1.



Slika 16. Prikaz krivulje doziranja i odgovora sa ekstrapolacijom problema.

U ovom diplomskom radu nije korištena opća jednadžba za računanje izloženosti kemijskom spoju kao što je prikazano u poglavlju 4.2. Opterećenje je prikazano kroz koncentraciju (C) koja je dobivena iz MC metode, a otpor kao koncentraciju koju čovjek može primiti u organizam ( $C_s$ ). Koncentracija koju čovjek može primiti jednaka je umnošku kronične referentne doze i recipročne vrijednosti  $I^*$ , pri čemu je  $I^* = \frac{CR \cdot EF \cdot ED}{BW \cdot AT}$ .

U nastavku je prikazana log-normalna distribucija varijable  $C_s$  koja je odabrana da obuhvati sve vajabilnosti parametre: kroničnu referentnu dozu, tjelesnu težinu i razdoblje u kojem je izloženost osrednjena, količinu zagađenja, učestalost i trajanje izloženosti.

### 5.3. Log-normalna distribucija Cs

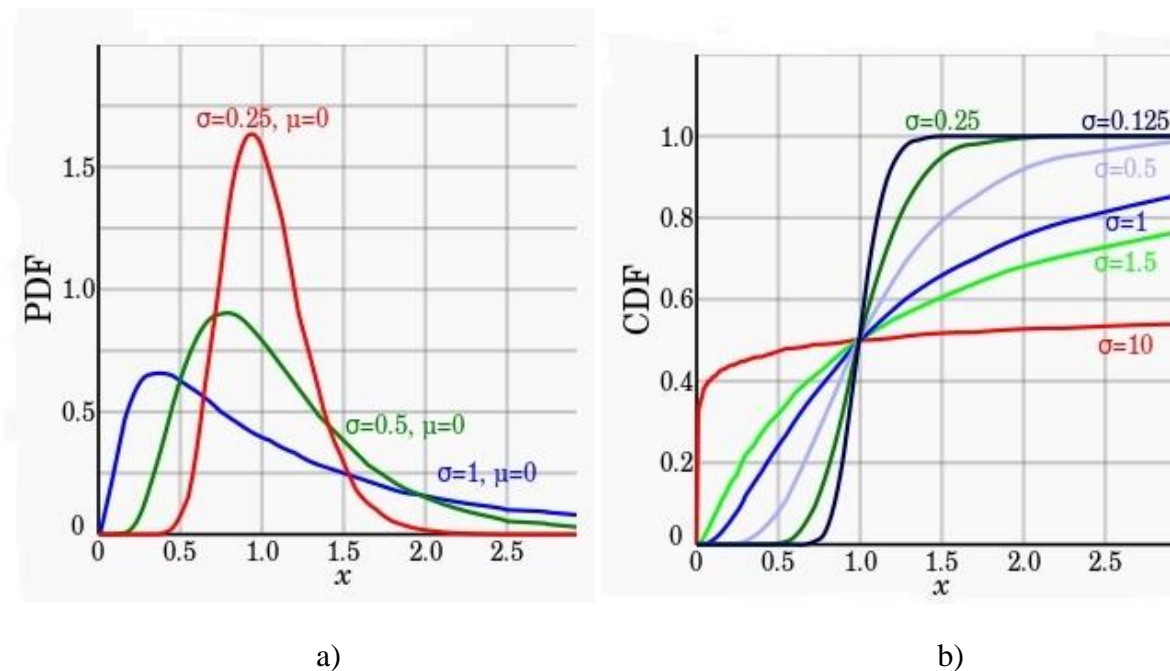
Funkciju gustoće vjerojatnosti koncentracija koje čovjek može primit (Cs) opisana je pomoću log-normalne distribucije. To je kontinuirana funkcija distribucije vjerojatnosti slučajne varijable čiji je logaritam normalno distribuiran. Izrazito je zakrivljena u desno. [5]

Log-normalna distribucija  $\ln N(\mu, \sigma)$  :

$$f(c_s, \mu, \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\ln x - \mu)^2}{2\sigma^2}}$$

pri čemu su  $\mu$  i  $\sigma$  parametri lokacije i skale, a  $m$  i  $v$  parametri srednje vrijednosti i standardne devijacije normalne distribucije  $N(m, v)$

$$\mu = \ln\left(\frac{m}{\sqrt{1 + \frac{v}{m^2}}}\right) \quad \sigma = \sqrt{\ln\left(1 + \frac{v}{m^2}\right)}$$



Slika 17. a) Funkcije gustoće s identičnim položajem parametra  $\mu$  ali različitog parametra  $\sigma$

b) Kumulativna funkcija distribucije sa različitim parametrima  $\sigma$

Iz slike 17a zapaža se kako graf funkcije gustoće mijenja svoj oblik ovisno o standardnoj devijaciji, što je ona manja graf je uži i visočiji. Kod kumulativne funkcije distribucije prikazane na slici 17b uočava se sve veći nagib koji je uzrokovan smanjenjem standardne devijacije.

## 6. Procjena nekancerogenog rizika temeljena na konceptu granične vrijednosti

Otkazivanje nekog sustava može se definirati kao slučaj kada opterećenje  $L$  (koncentracija) postaje veće od otpora  $R$  (konc. koju čovjek može primiti u organizam) sustava. Pouzdanost se definira kao vjerojatnost sigurnog rada sustava kada je otpor sustava uvijek veći ili isti opterećenju  $p_s = P(L \leq R)$

Sukladno tome, vjerojatnost otkazivanja sustava definira se:  $p_f = P(L > R)$

Faktor sigurnosti jednak je omjeru otpora i opterećenja. Za  $FS \geq 1$  kažemo da je sustav pouzdan, a za  $FS < 1$  da je nepouzdan.

$$p_s = P(FS > 1)$$

Ukoliko imamo dvije  $f$ -je gustoće, jednu koja predstavlja otpor i drugu koja predstavlja opterećenje. Pouzdanost možemo prikazati pomoću integrala :

$$p_s = \int_0^l \int_0^r f(L)f(R)dldr$$

Integracijom funkcije gustoće vjerojatnosti slučajne varijable  $L$  dobije se kumulativna funkcija distribucije iste pa se prethodni izraz može zapisati kao:

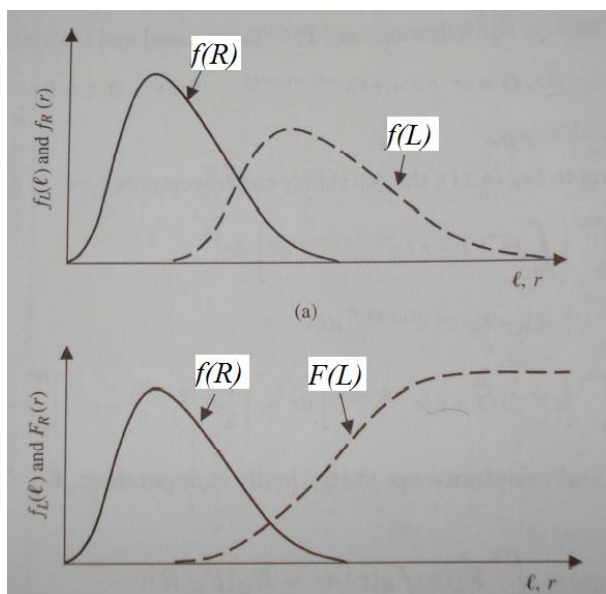
$$F(x) = \int_0^x f(X)dx = P(X \leq x)$$

$$p_s = \int_0^l F(L)f(R)dr$$

U ovom slučaju opterećenje ( $L$ ) predstavlja koncentraciju, a otpor ( $R$ ) koncentraciju koju čovjek može primiti.

Pouzdanost je jednaka integralu umnoška CDF-a koncentracije ( $c$ ) i funkcije gustoće vjerojatnosti koncentracija koje čovjek može primiti ( $c_s$ ) na intervalu  $[0, C_0]$

$$p_s = \int_0^{C_0} P(c_s)f(C_s)dc_s$$



Slika18. Prikaz otpora kroz funkciju gustoće  $f(R)$  i opterećenja kroz funkciju gustoće  $f(L)$  i kumulativnu funkciju  $F(L)$

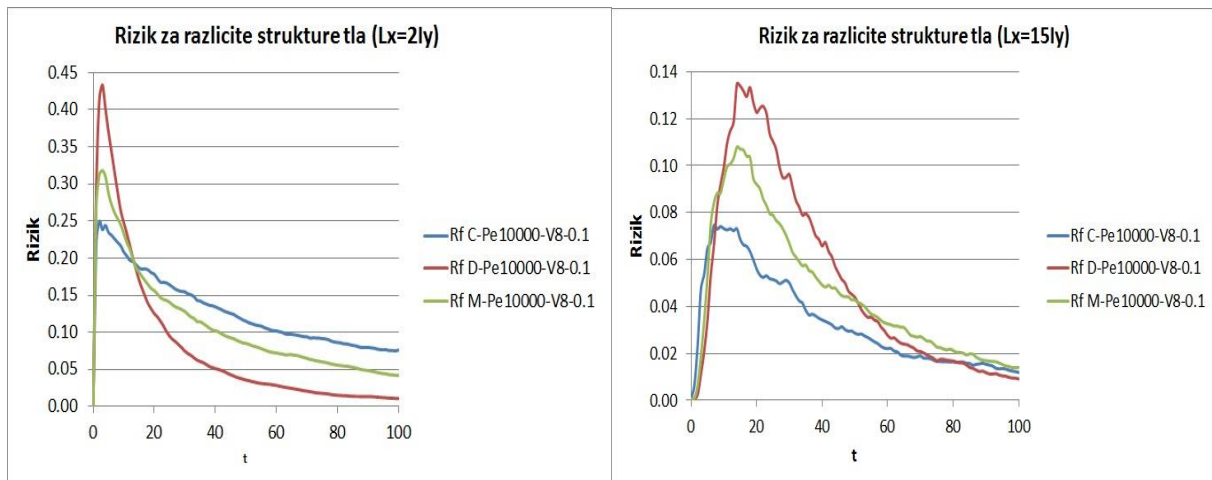
Rizik, tj. nepouzdanost sustava izračunat ćemo iz razlike :

$$p_f = 1 - p_s$$

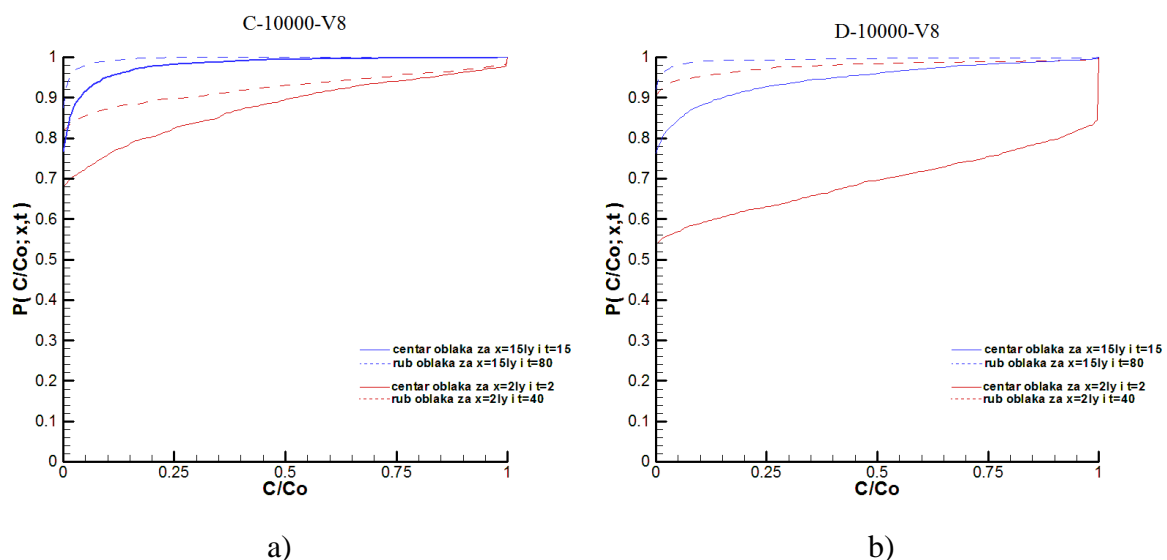
ili

$$p_f = \int_0^{c_0} (1 - P(c_s)) * f(c_s) dc_s$$

## 6.1. Utjecaj strukture polja konduktiviteta na rizik dobiven pomoću MC metode



Slika 19. Prikaz rizika za različite strukture tla

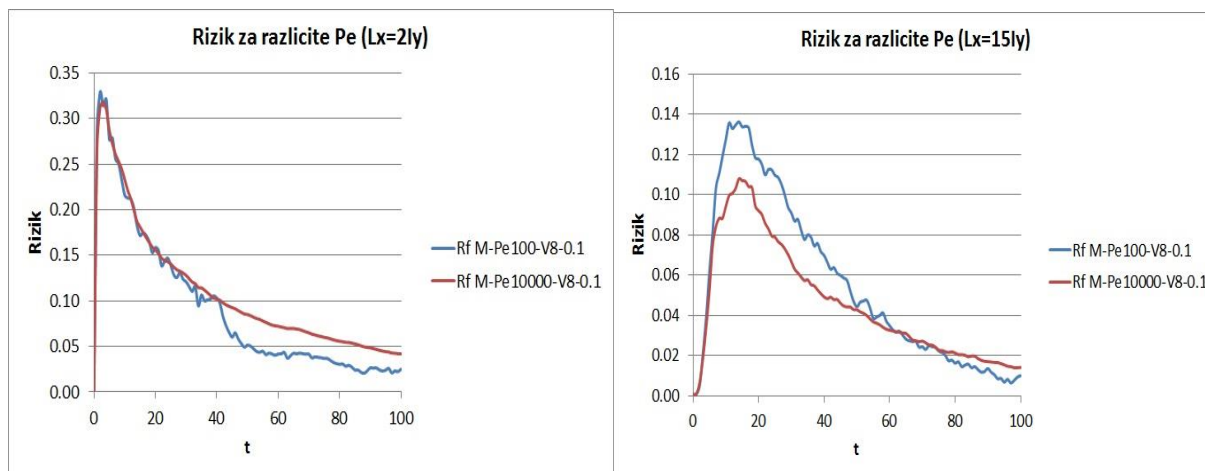


Slika 20. Prikaz CDF-a za Pe broj 10000, varijancu konduktiviteta 8 te različite strukture tla:  
a) CN strukturu tla i b) DN strukturu tla

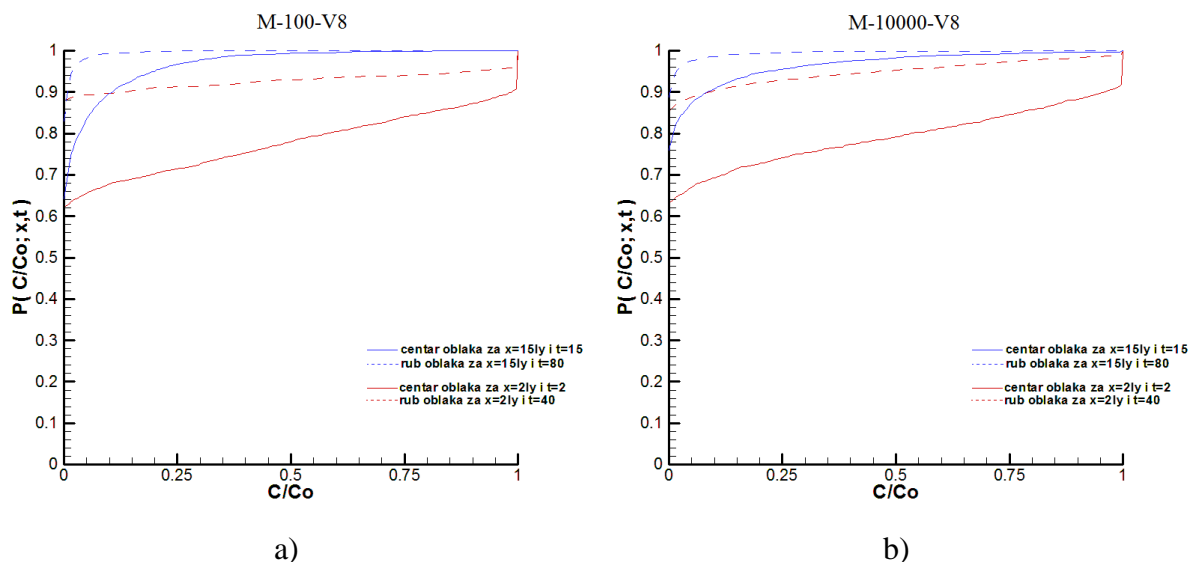
Promatrajući točku  $Lx=2Iy$ , vidi se da je rizik za DN strukturu polja najveći za  $t=2$ , a za  $t=40$  postane najmanji, dok za strukturu CN vrijedi obratno. Odgovor na pitanje zašto je to tako može se pronaći promatrajući kumulativne funkcije za pojedino polje. Promatrajući DN strukturu za bližu točku (označenu crvenom bojom) u trenutku  $t=2$ , vidi se da postoji puno veća učestalost pojave koncentracije  $C_0$  nego u CN strukturi stoga je i rizik veći za DN polje u trenutku  $t=2$ . Ukoliko se promatra rub oblaka za  $t=40$ , vidi se da veća učestalost pojave koncentracije  $C_0$  postoji u CN strukturi. Zbog toga je u trenutku  $t=40$  rizik u CN polju veći nego u DN polju.



## 6.2. Utjecaj Pe-broja na rizik dobiven pomoću MC metode



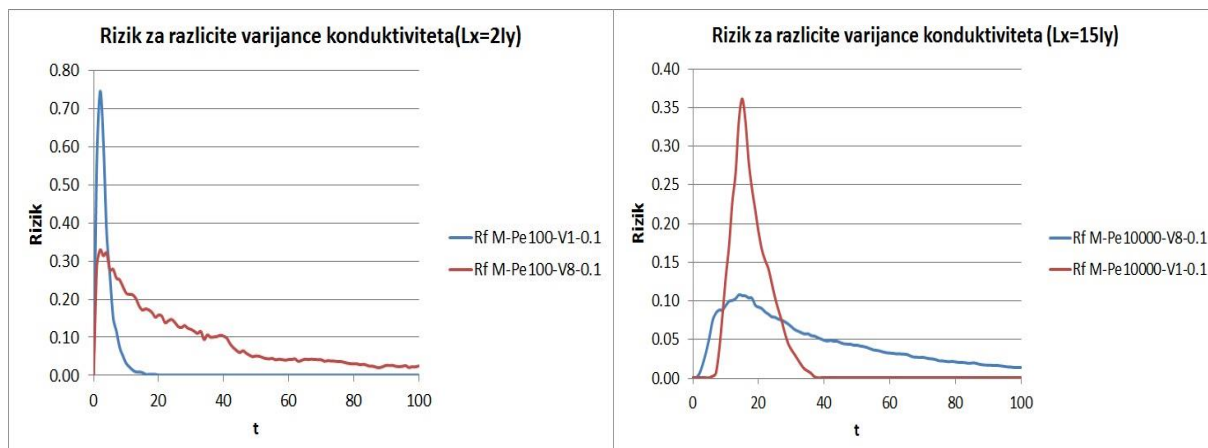
Slika 21. Prikaz rizika za različite Pe brojeve



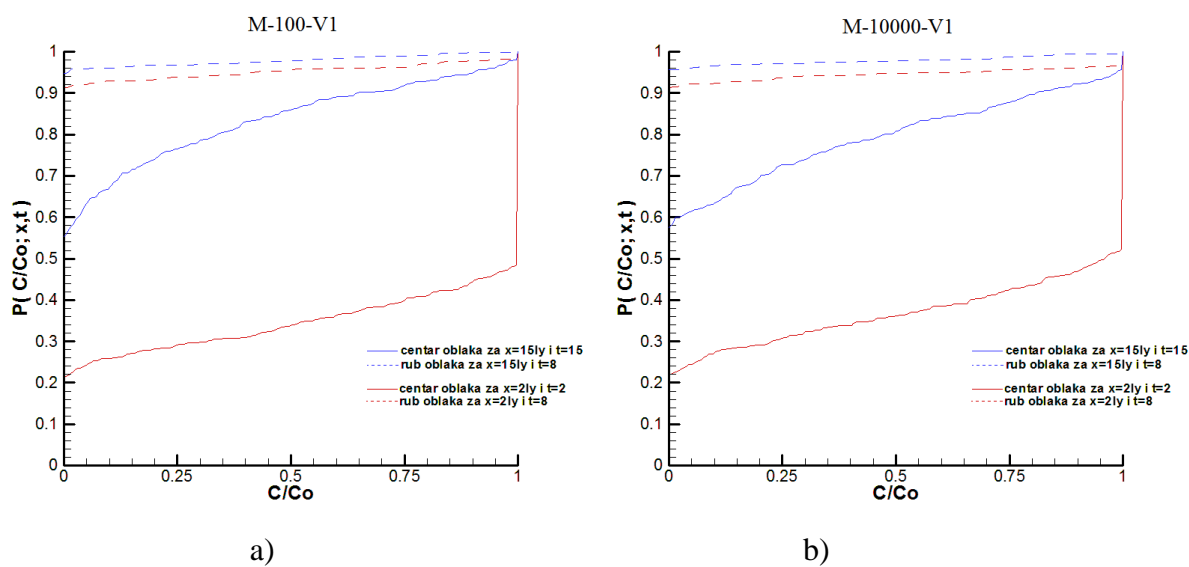
Slika 22. Prikaz CDF-a za multi Gaussovu strukturu tla, varijancu konduktiviteta 8 te:  
 a) Pe=100 i b) Pe=10000

Promatrajući točku  $Lx=15ly$ , vidi se da je učestalost pojave nula manja za  $P=100$ . Također se vidi da je disperzija veća, prije iščeznu vrijednosti visokih koncentracija a naročito  $Co$ . Zbog iščezavanja visokih koncentracija koje obično smanjuju rizik trebalo bi detaljnije proučiti zašto je rizik veći za Peclet-ov broj 100.

### 6.3 Utjecaj varijance konduktiviteta na rizik dobiven pomoću MC metode

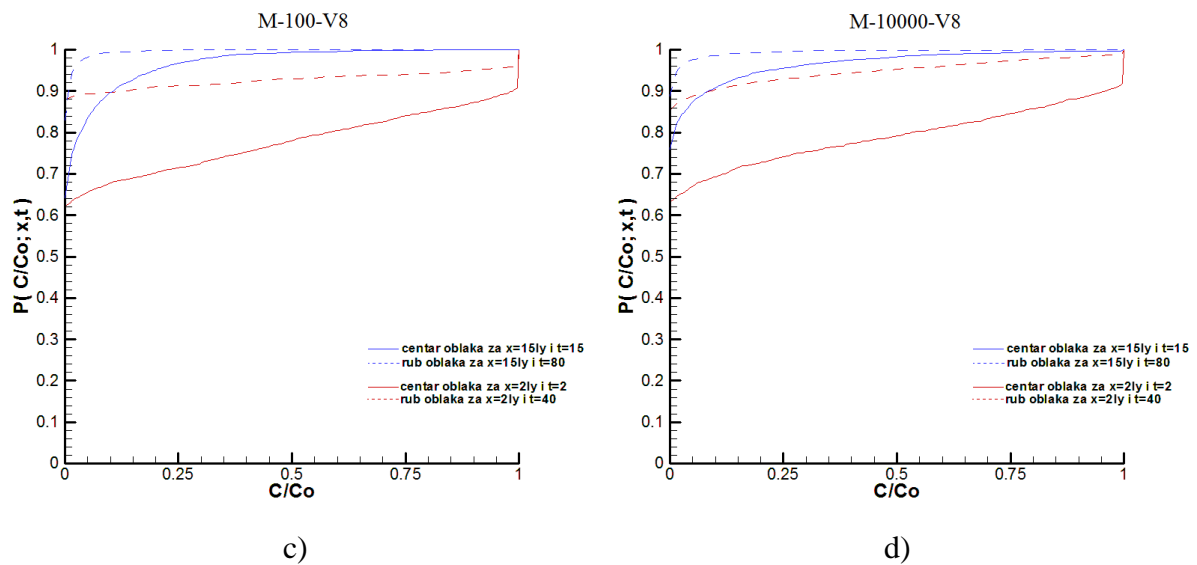


Slika 23. Prikaz rizika za različite varijance konduktiviteta



a)

b)

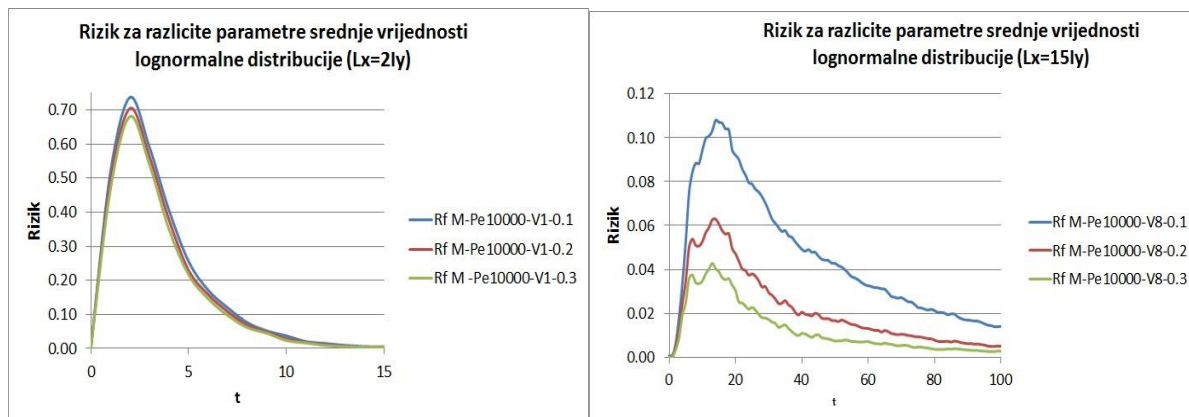


Slika 24. Prikaz CDF-a za multi Gaussovu strukturu tla te

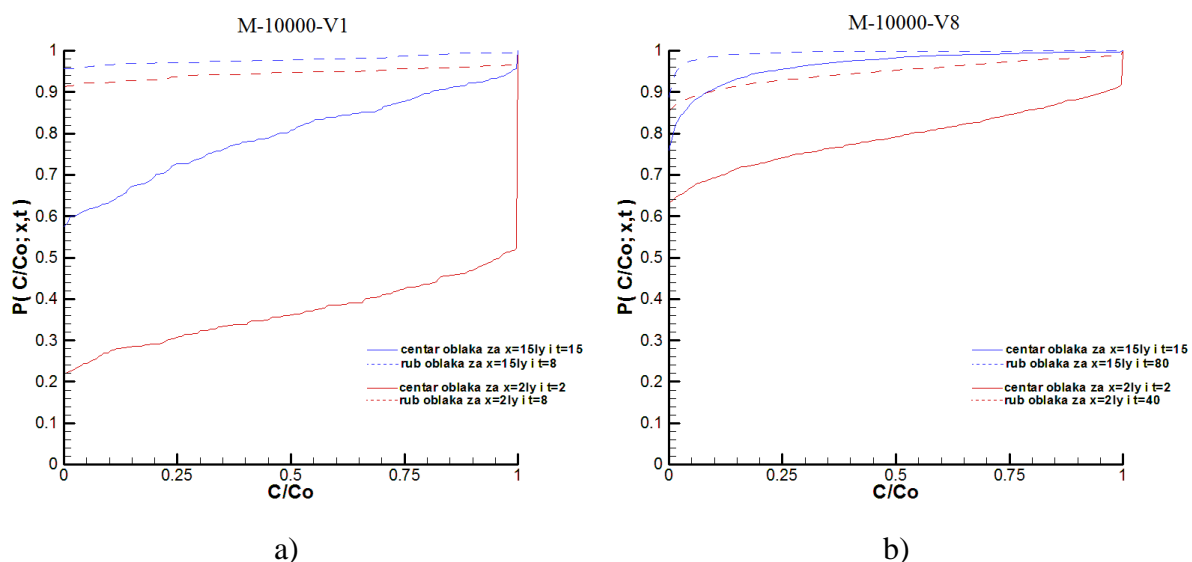
- a)  $Pe=100$  i varijancu konduktiviteta 1      b)  $Pe=10000$  i varijancu konduktiviteta 1  
 c)  $Pe=100$  i varijancu konduktiviteta 8      d)  $Pe=10000$  i varijancu konduktiviteta 8

Promatrajući CDF udaljenije točke u trenutku  $t=15$  vidi se da je veća učestalost pojave  $Co$  za varijancu konduktiviteta  $V1$ . Ukoliko se promatra rub oblaka za trenutak  $t=80$ , vidi se da je učestalost nula manja za varijancu  $V8$ . Stoga je rizik za varijancu  $V1$  u trenutku  $t=15$  veći, a u trenutku  $t=80$  manji.

## 6.4. Utjecaj različitih parametara srednje vrijednosti lognormalne distribucije dobiven pomoću MC metode



Slika 25. Prikaz rizika za različite parametre srednje vrijednosti lognormalne distribucije



Slika 26. Prikaz CDF-a za multi Gaussovu strukturu tla, Pe broj 10000 te za varijancu konduktiviteta a)  $V=1$  i b)  $V=8$

Mijenjanjem srednje vrijednosti, tj povećavajući je vidi se da se rizik smanjuje. Povećavajući parametre srednje vrijednosti krivulja funkcije gustoće vjerojatnosti koncentracija koje čovjek može primiti se translacija u desno. CDF koncentracija izloženosti se ne mijenja, stoga se rizik smanjuje što odgovara definiciji pouzdanosti:  $p_s = \int_0^{C_0} P(c_s) f(c_s) dc_s$

## 7. Beta distribucija

Beta-distribucija je familija krivulja kontinuiranih distribucija vjerojatnosti definiranih na intervalu  $[0, 1]$ . Parametri  $\alpha$  i  $\beta$  pojavljuju se kao eksponenti slučajne varijable i utječu na oblik distribucije. Ona je statistička distribucija vjerojatnosti, koja može biti simetrična ili zakrivljena (udesno ili ulijevo) zavisno od prirode određene pojave, odnosno aktivnosti. Beta distribucija primjenjena je kao model ponašanja slučajnih varijabli ograničena na određenom intervalu. [3]

Funkcija gustoće vjerojatnosti beta distribucije za  $x \in [0, 1]$  i  $\alpha, \beta > 0$  je funkcija snage varijable  $x$  i njene refleksije  $(1-x)$ :

$$f(c; \alpha, \beta) = \frac{1}{B(\alpha, \beta)} \cdot c^{\alpha-1} (1-c)^{\beta-1}$$

Pri čemu je :

$B(\alpha, \beta)$  - beta funkcija konstanta koja osigurava da integral vjerojatnosti bude 1

$c$  - promatrana vrijednost koja se dogodila

$\alpha, \beta$  - parametri oblika

$$\alpha = \left( \frac{1-m_1}{m_2} - \frac{1}{m_1} \right) \cdot m_1^2 \qquad \beta = \alpha \cdot \left( \frac{1}{m_1} - 1 \right)$$

Kumulativna funkcija distribucije jednaka je:

$$F(c; \alpha, \beta) = \frac{B(c; \alpha, \beta)}{B(\alpha, \beta)} = I_c(\alpha, \beta)$$

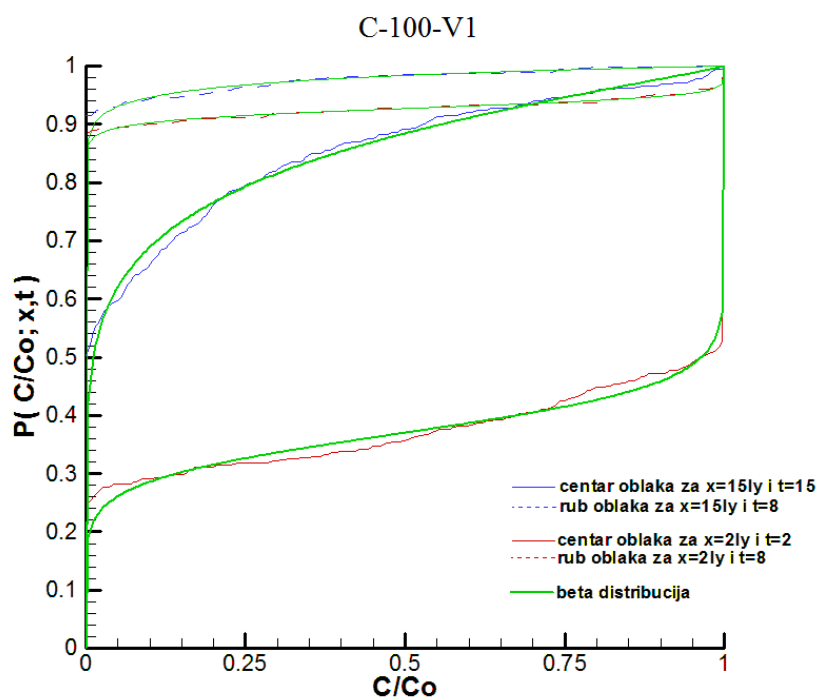
Pri čemu je  $B(c; \alpha, \beta)$  nepotpuna beta funkcija, a  $I_c(\alpha, \beta)$  regulira nepotpune beta funkcije.

Iz dobivenih rezultata Monte Carla uzimaju se vrijednosti za prvi i drugi statistički moment. Srednja vrijednost i varijanca uvrštavaju se u parametre oblika. Nakon toga dobiva se beta funkcija s parametrima  $\alpha$  i  $\beta$ .

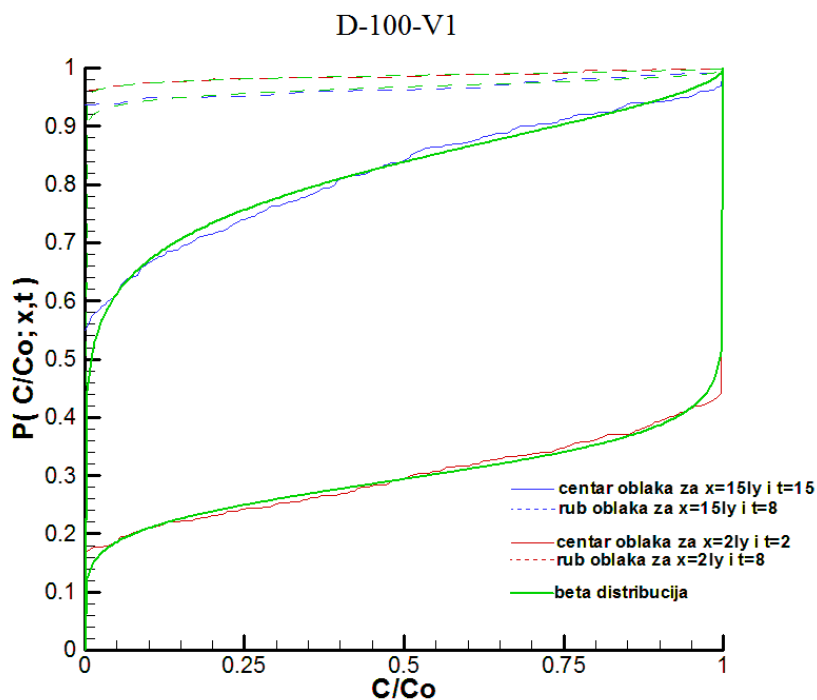
## 7.1. Usporedba Beta distribucije i Monte Carla u ovisnosti o strukturi tla

Uzimaju se rezultati CDF-a koncentracije za različite parametre iz MC simulacija. Potom se za pripadajuće vrijednosti srednje vrijednosti i varijance koncentracije računaju parametri Beta distribucije i Beta CDF.

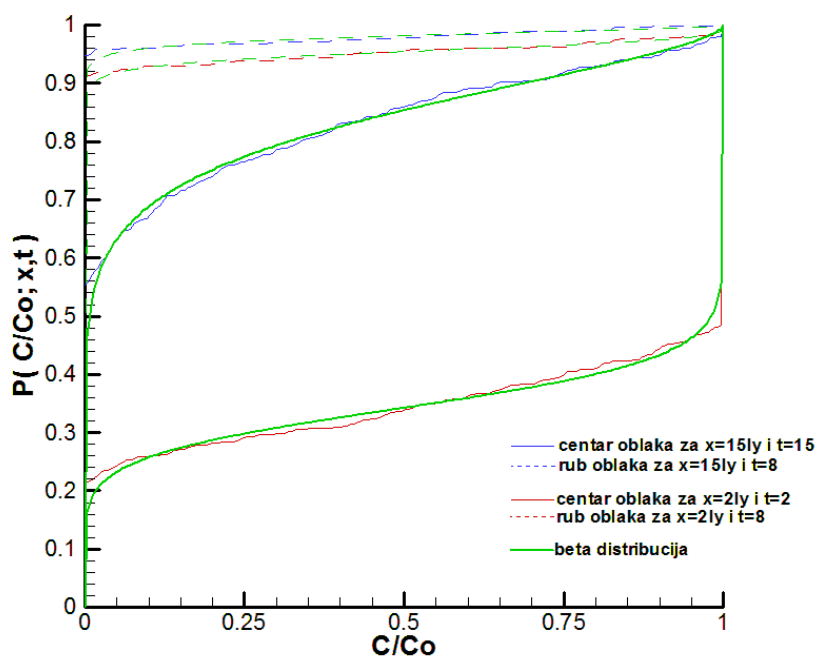
Dobiveni rezultati za pojedine strukture sa Peclet-ovim brojem 100 i varijancom konduktiviteta 1, prikazani su na zajedničkom grafu kako bi ih se moglo što bolje usporediti. Vidi se da točke na rubu oblaka u potpunosti zadovoljavaju, Beta distribucija odlično aproksimira rezultate MC metode. Promatrajući centar oblaka mogu se uočiti manja odstupanja, no ona su zanemariva.



Slika27. Prikaz CDF-a Monte Carla i Beta distribucije za  $Pe=100$ , varijancu konduktiviteta 1 i CN strukturu tla



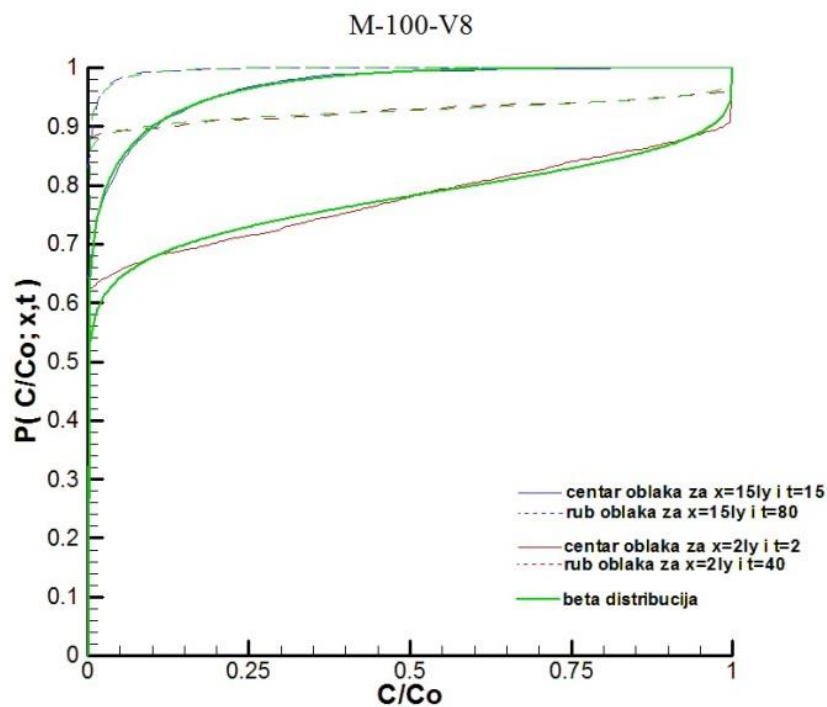
Slika28. Prikaz CDF-a Monte Carla i Beta distribucije za  $Pe=100$ , varijancu konduktiviteta 1 i DN strukturu tla



Slika29. Prikaz CDF-a Monte Carla i Beta distribucije za  $Pe=100$ , varijancu konduktiviteta 1 i DN strukturu tla

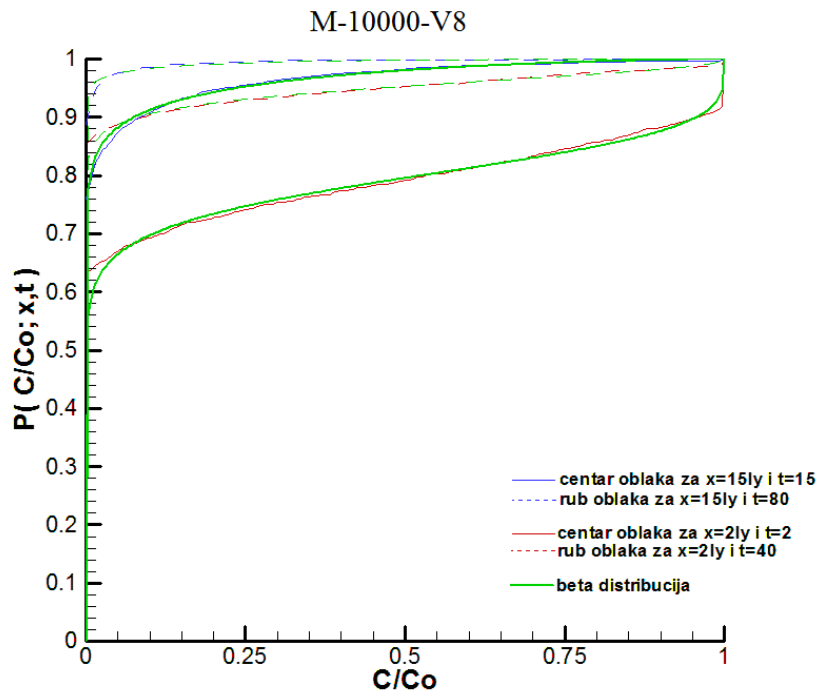
## 7.2. Usporedba Beta distribucije i Monte Carla u ovisnosti o disperziji

Promatrajući rezultate za MG strukturu tla i varijancu konduktiviteta 1, vidi se da je Beta izvrsno opisala MC krivulje za udaljeniju točku. Za centar oblaka bliže točke, kod Beta distribucije se javlja manji broj nula kao i manji broj učestalosti maksimalnih koncentracija  $C_0$ . Malo odstupanje uočava se i na krivulji koja opisuje centar oblaka bliže točke za manji Peclet-ov broj.



Slika30. Prikaz CDF-a Monte Carla i Beta distribucije za multi Gaussovu strukturu tla, varijancu konduktiviteta 8 i  $Pe=100$

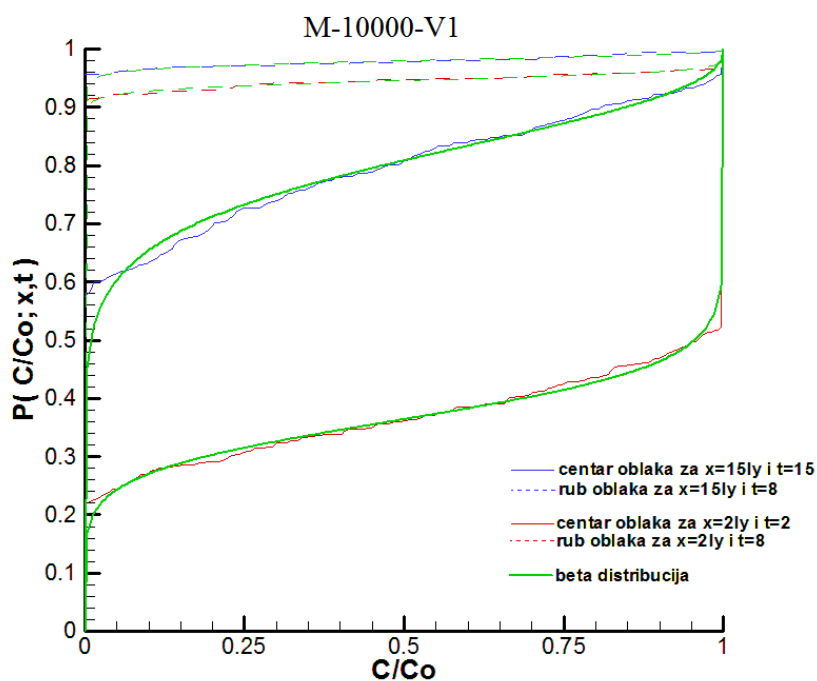




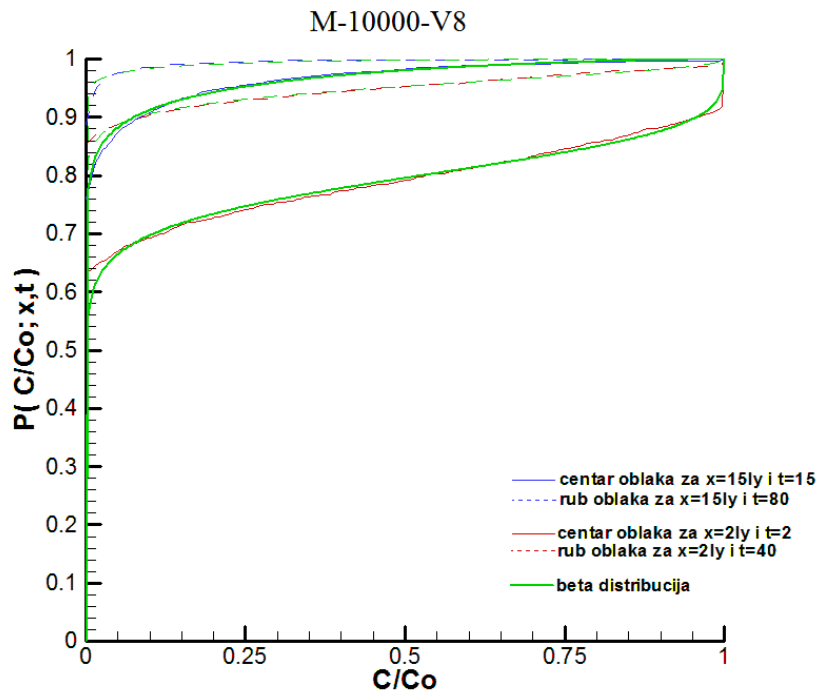
Slika 31. Prikaz CDF-a Monte Carla i Beta distribucije za multi Gaussovu strukturu tla, varijancu konduktiviteta 8 i  $Pe=10000$

### 7.3. Usporedba Beta distribucije i Monte Carla u ovisnosti o varijanci konduktiviteta

Krivulje Beta distribucije još su jednom odlično preklapile MC krivulje prikazane za rub oblaka. Za veću varijancu konduktiviteta puno bolje aproksimiraju Monte Carlo krivulje, jedina razlika vidi se u učestalosti nula i maksimalne koncentracije što možemo i zanemariti. Kod manje varijance promjene su nešto izražajnije.



Slika 32. Prikaz CDF-a Monte Carla i Beta distribucije za multi Gaussovu strukturu tla, Pe broj 10000 i varijancu konduktiviteta  $V=1$

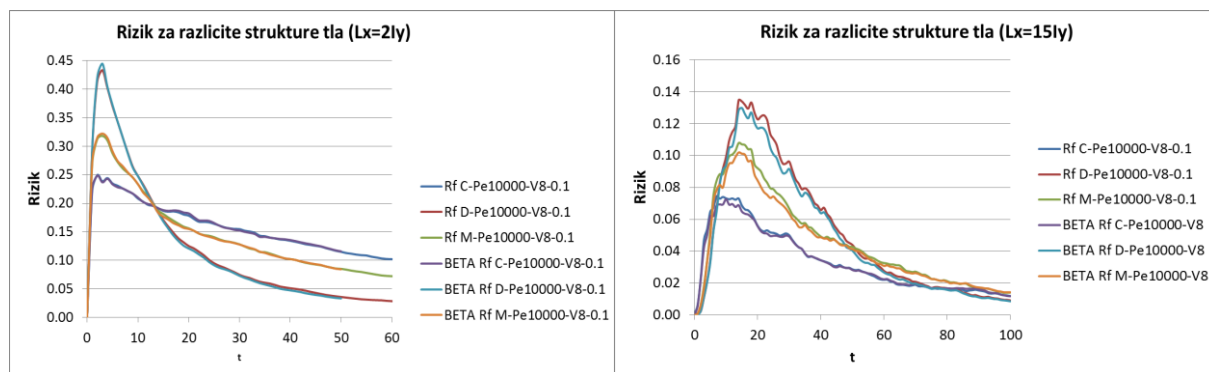


Slika 33. Prikaz CDF-a Monte Carla i Beta distribucije za multi Gaussovu strukturu tla, Pe broj 10000 i varijancu konduktiviteta  $V=8$

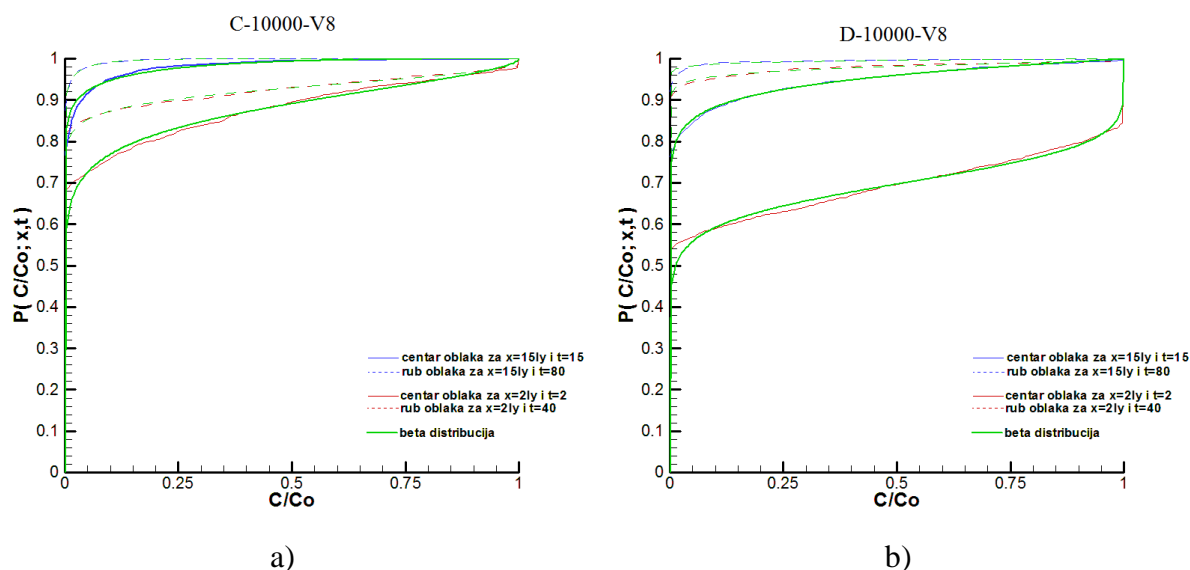
## 8. Procjena nekancerogenog rizika pomoću Monte Carlo i Beta distribucije temeljena na konceptu granične vrijednosti

### 8.1. Usporedba rizika Beta distribucije i Monte Carla za strukture tla

Na temelju Beta i Monte Carlo CDF-ova, te log-normalne distribucije opisane u poglavlju 5.3. računaju se oba rizika. Dobiveni rezultati rizika za različite strukture tla sa Peclet-ovim brojem 10000 i varijancom konduktiviteta 8, na različitim udaljenostima od izvora zagađenja prikazani su na slici 34.



Slika34. Prikaz rizika Monte Carlo i Beta distirbucije za različite strukture tla

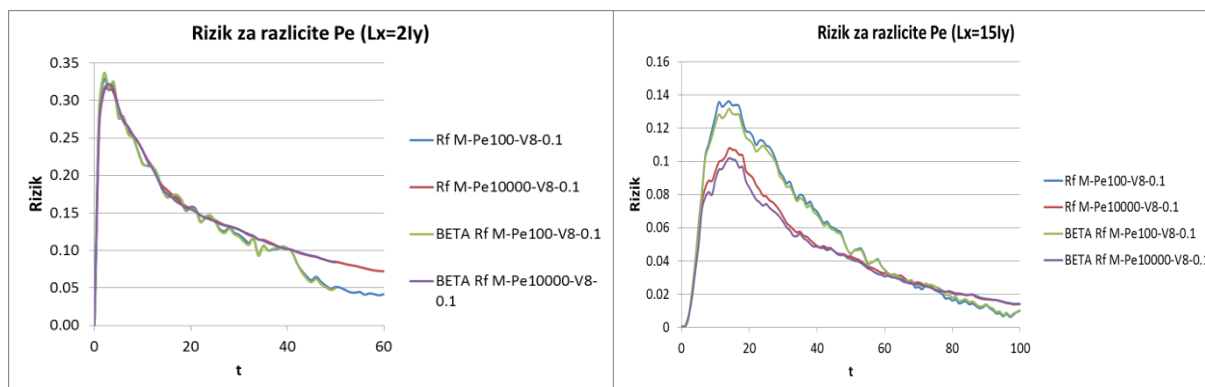


Slika35. Prikaz CDF-a Monte Carla i Beta distribucije za Pe broj 10000, varijancu konduktiviteta 8 te: a) CN strukturu tla i b) DN strukturu tla

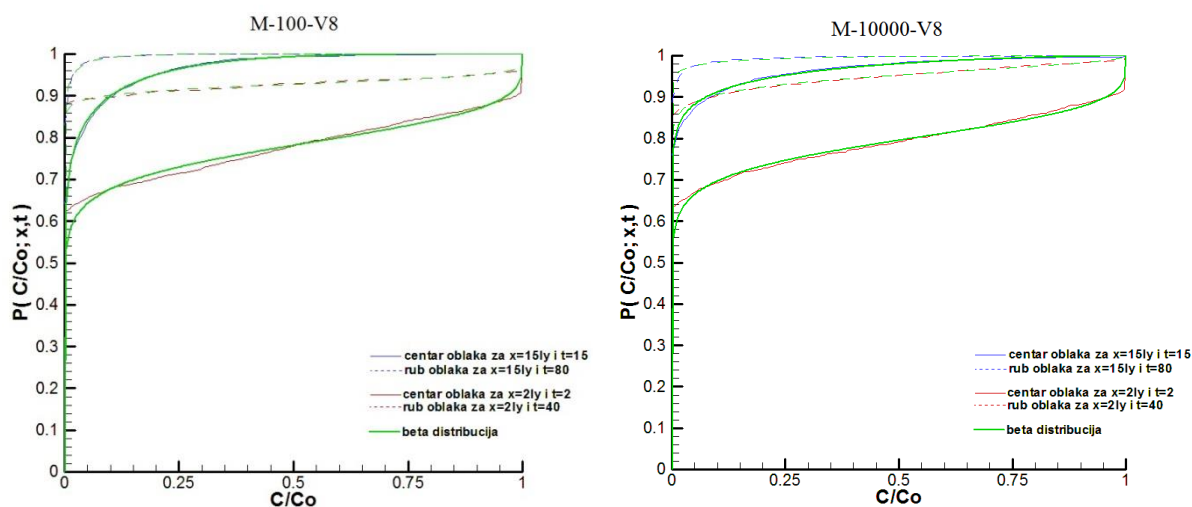
Beta rizik za manju udaljenost od izvora zagađenja više odgovara MC riziku. Kod veće udaljenosti nailazi se na manja odstupanja. Iz ovoga se može zaključiti da se Beta CDF-ovi za bližu točku bolje podudaraju sa MC. Iz priloženih CDF-ova na slici 35. vidi se da Beta CDF bolje aproksimira MC krivulju za DN strukturu tla.

## 8.2. Usporedba rizika Beta distribucije i Monte Carla za Pe-broj

Na temelju Beta i Monte Carlo CDF-ova, te log-normalne distribucije opisane u poglavlju 5.3. računaju se oba rizika. Dobiveni rezultati rizika za različite Peclet-ove brojeve, MG strukturu tla i varijancu konduktiviteta 8, na različitim udaljenostima od izvora zagađenja prikazani su na slici 36.



Slika 36. Prikaz rizika Monte Carlo i Beta distirbucije za različite Pe

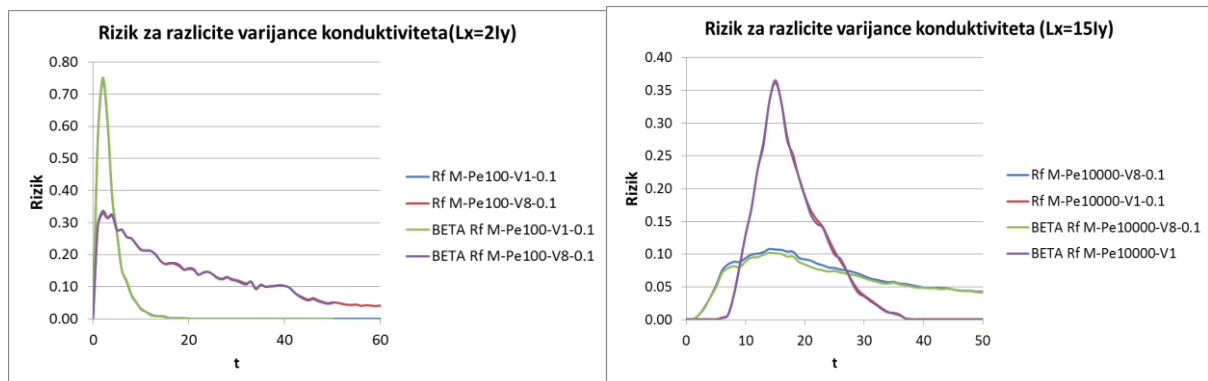


Slika 37. Prikaz CDF-a Monte Carla i Beta distribucije za multi Gaussovu strukturu tla, varijancu konduktiviteta 8 te: a) Pe=100 i b) Pe=10000

Nakon određenog vremena Beta i MC rizik se savršeno preklapaju, a to je zahvaljujući tome što Beta CDF odlično opisuje Monte Carlov za sve točke na rubu. Također vidi se da za centar oblaka bliže točke kod Peclet-ovog broja 10000 manja odstupanja možemo i zanemariti jer gotovo pa da i nisu utjecala na rizik

### 8.3 Usporedba rizika Beta distribucije i Monte Carla za varijance konduktiviteta

Na temelju Beta i Monte Carlo CDF-ova, te log-normalne distribucije opisane u poglavlju 5.3. računaju se oba rizika. Dobiveni rezultati rizika za različite varijance konduktiviteta u MG strukturu tla, na različitim udaljenostima od izvora zagađenja prikazani su na slici 38.

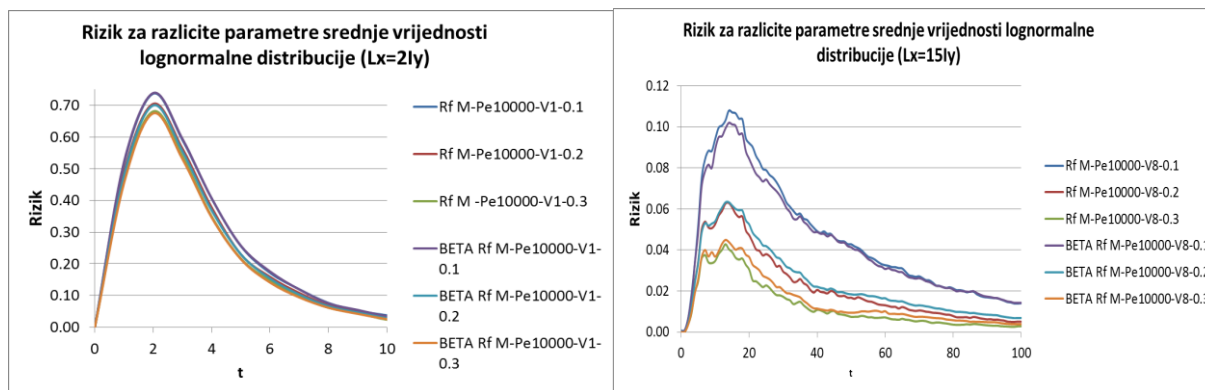


Slika 38. Prikaz rizika Monte Carlo i Beta distribucije za različite varijance konduktiviteta

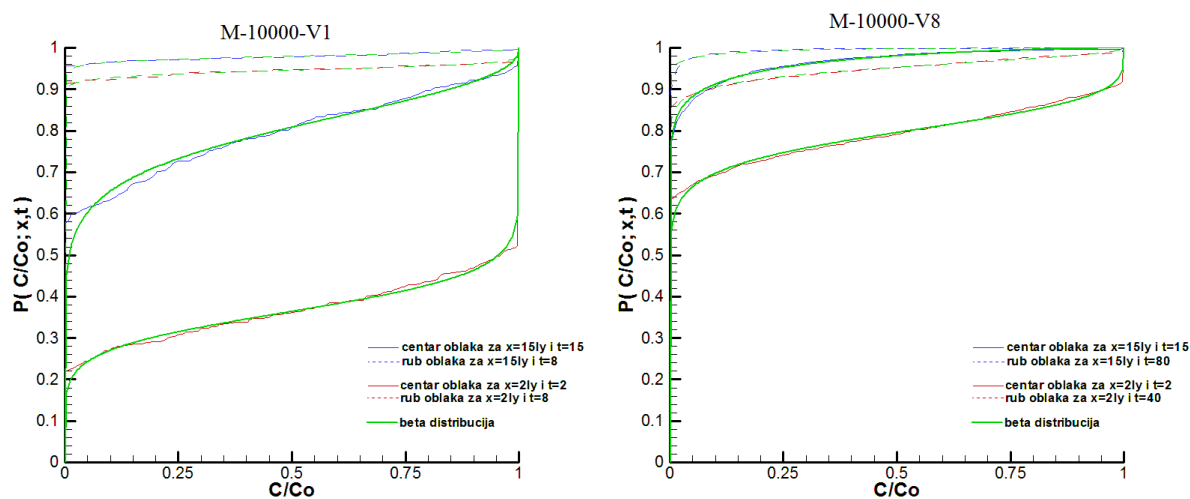
Beta rizik je izvršno opisao sve krivulje osim one za Pe=10000 i V8, tu su vrijednosti bile nešto niže. Linija koja prikazuje rizik za varijancu 1 ima veće vrijednosti na užem rasponu. Promatrajući CDF-ove udaljenije točke iz slike 25 u trenutku t=15 vidi se da je veća učestalost pojave Co za varijancu konduktiviteta V1. Ukoliko se promatra rub oblaka za trenutak t=80, vidi se da je učestalost nula manja za varijancu V8. Stoga je rizik za varijancu V1 u trenutku t=15 veći, a u trenutku t=80 manji.

## 8.4. Usporedba rizika Beta distribucije i Monte Carla za različite parametare srednje vrijednosti lognormalne distribucije

Na temelju Beta i Monte Carlo CDF-ova, računa se rizik za različite parametre log-normalne distribucije. Dobiveni rezultati rizika za MG strukturu tla i  $Pe=10000$ , na različitim udaljenostima od izvora zagađenja prikazani su na slici 39.



Slika 39. Prikaz rizika Monte Carlo i Beta distribucije za različite parametre srednje vrijednosti lognormalne distribucije



Slika 40. Prikaz CDF-a Monte Carla i Beta distribucije za multi Gaussovu strukturu tla,  $Pe$  broj 10000 te varijancu konduktiviteta: a)  $V=1$  i b)  $V=8$

Rezultati Beta rizika za manje udaljenosti od izvora zagađenja savršeno se preklapaju s rezultatima Monte Carla. Kod udaljenije točke javljaju se manja odstupanja.

## 9. Zaključak

Cilj ovog diplomskog rada bio je ispitati kako struktura hidrauličkog konduktiviteta, disperzija i varijanca konduktiviteta utječu na varijabilnost koncentracije, te koliko dobro Beta distribucija može opisati varijacije koncentracije.

Utjecaj analiziranih parametara interpretira se kroz nekoliko pokazatelja vidljivih u kumulativnoj funkciji distribucije (CDF) koncentracije; učestalost maksimalne koncentracije, učestalost nultih vrijednosti koncentracije te maksimalna vrijednost koncentracije koja ima nenultu učestalost pojavljivanja.

Promatrajući strukture vodonosnika uočeno je da će pojava koncentracije  $C_0$  biti manja kod strukture gdje su kanali dobre vodljivosti značajno korelirani.. Kako je vidljivo iz rezultata, CN struktura uzrokuje veću nepravilnost oblaka, stanjujući ga i kreirajući jako tanke fronte koje u vjerojatnosnom smislu lakše zaobilaze lokacije na kojima se koncentracija mjeri/računa te stoga povećavaju učestalost pojave nultih vrijednosti koncentracije. Zbog izraženijeg širenja oblaka kod ove strukture, učestalosti većih koncentracija, a samim time i veći rizik na rubovima, karakteristika su ove strukture. Ukoliko se promatra centar oblaka, rizik će biti najmanji u takvim strukturama. Razlog tome je obostran doprinos manje zastupljenosti maksimalnih koncentracija i veća zastupljenost nultih vrijednosti koncentracije.

Drugi promatrani parametar je varijanca konduktiviteta. Manja vrijednost ovog parametra karakterizirana je većim učestalostima maksimalne koncentracije. Znači manja je prostorna varijabilnost brzina što oblak drži na okupu. Rizik će biti veći za manju varijancu u centru oblaka, dok će na rubu oblaka biti veći za veću varijancu. Utjecaj srednje vrijednosti log-normalne distribucije, koja predstavlja graničnu vrijednost koncentracije koju ljudski organizam može konzumirati bez štetnog utjecaja po ljudsko zdravlje, također utječe na rizik, povećavajući srednju vrijednost rizik se smanjuje.

Intenzivnije razrjeđenje opaža se za manje Peclet-ove brojeve zbog toga što je tada utjecaj disperzije intenzivniji. Iz rezultata se može vidjeti da za bližu točku utjecaj disperzije izostaje. Potrebno je vrijeme da se razvije i da bude vidljiva u rezultatima. Disperzija djeluje kroz smanjenje učestalosti nula i iščezavanje učestalosti maksimalnih koncentracija  $C_0$ . Za veće Peclet-ove brojeve disperzija slabo djeluje i bilježi se učestalost  $C_0$ .



		STRUKTURA TLA		PECLET-OV BROJ		VARIJANCA KONDUKTIVITETA	
		CN	DN	100	10000	1	8
CDF	0-centar X3 i X19	↑	↓	↓	↑	↓	↑
	0-rub X3 i X19	↓	↑	↑	↓	↑	↓
	Co-centar X3 i X19	↓	↑	↑	↓	↑	↓
	Co-rub X3 i X19	↑	↓	↓	↑	↑	↓
RIZIK	Centar X3 i X19	↓	↑	↑	↓	↑	↓
	Rub X3 i X19	↑	↓	↓	↑	↓	↑

Tablica 1. Učestalost nultih i maksimalnih vrijednosti koncentracija za pojedine parametre i utjecaj parametara na vrijednosti rizika

Promatrajući Tablicu 1. može se zaključiti da su vrijednosti učestalosti pojave nula i maksimalne koncentracije obrnuto proporcionalne. Npr. ukoliko se uspoređuje utjecaj strukture, za centar oblaka bliže točke pojava nula najveća je u CN strukturi dok je pojava maksimalne koncentracije najmanja. Iz ovoga proizlazi da je rizik u centru oblaka najmanji za tu strukturu.

Za dobivanje kumulativnih funkcija distribucije, a kasnije i rizika korištene su dvije metode. Monte Carlo je jedna od metoda s najmanje potrebnih pretpostavki, no zahtijeva znatno procesorsko vrijeme računala. Kad se radi u tri dimenzije kod Monte Carlo metode nailazimo na tehničke poteškoće jer je potrebno generirati veliki broj realizacija trodimenzionalnog polja ulazne varijable. [2] Ukoliko se koristi manji broj realizacija javlja se pogreška uzorka u statističkom osrednjavanju. Uzimajući u obzir sve prednosti i mane Monte Carlo metode u odnosu na Beta distribuciju. Sasvim je sigurno da Beta vrlo dobro i precizno aproksimira rezultate Monte Carlo metode. Rezultati se lijepo podudaraju i bez ikakvog straha može se olakšati posao u budućnosti koristeći Beta metodu.

## **10. Literatura**

- [1] USEPA: Risk assessment guidance for superfund: Volume I - Part A. Human Health Evaluation Manual, Washington DC (1989)
- [2] Roko Andričević, Hrvoje Gotovac, Igor Ljubenković: GEOSTATIKA umijeće prostorne analize (2007)
- [3] [https://en.wikipedia.org/wiki/Beta\\_distribution](https://en.wikipedia.org/wiki/Beta_distribution)
- [4] William P. Cunningham, Mary Ann Cunningham: Principles of Environmental Science (2006)
- [5] [https://en.wikipedia.org/wiki/Log-normal\\_distribution](https://en.wikipedia.org/wiki/Log-normal_distribution)
- [6] Andrea Bačani, Tatjana Vlahović: HIDROGEOLOGIJA Primjena u graditeljstvu FGAG (2012)
- [7] Hrvoje Gotovac, Veljko Srzić: Pronos zagađenja i trasera u zasićenim poroznim formacijama; Kolegij-Modeliranje toka i pronosa u podzemlju FGAG (2013)
- [8] Građevinski fakultet u Zagrebu: Hidraulika/Pronos tvari ([https://www.grad.unizg.hr/\\_download/repository/PREDAVANJA\\_1/PREDAVANJA/h07pronos.pdf](https://www.grad.unizg.hr/_download/repository/PREDAVANJA_1/PREDAVANJA/h07pronos.pdf))
- [9] Veljko Srzić: Stohastičko modeliranje polja koncentracije u vodonosnicima; Kolegij-Modeliranje toka i pronosa u podzemlju FGAG (2015)