

Analiza širenja nitratnog onečišćenja u tlu

Ivančić, Ivana

Master's thesis / Diplomski rad

2022

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Rijeka, Faculty of Engineering / Sveučilište u Rijeci, Tehnički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:190:250861>

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

Download date / Datum preuzimanja: **2024-11-30**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the University of Rijeka, Faculty of Engineering](#)



SVEUČILIŠTE U RIJECI
TEHNIČKI FAKULTET
Diplomski studij strojarstva

Diplomski rad

Analiza širenja nitratnog onečišćenja u tlu

Rijeka, rujan 2022.

Ivana Ivančić
0035191785

SVEUČILIŠTE U RIJECI
TEHNIČKI FAKULTET
Diplomski studij strojarstva

Graduation thesis

**Nitrate Ground Pollution Dispersion
Analysis**

Mentor: prof.dr.sc. Lado Kranjčević

Rijeka, September 2022.

Ivana Ivančić
0035191785

Umjesto ove stranice umetnuti zadatak
za završni ili diplomski rad

Izjava o samostalnoj izradi rada

Izjavljujem da sam diplomski rad izradila samostalno.

Rijeka, rujan 2022.

Ime Prezime

Sadržaj

Popis slika	ix
Popis tablica	xi
1 Uvod	1
1.1 Motivacija i problematika rada	2
2 Kakvoća vode i promjene kakvoće vode	3
2.1 Kakvoća vode	3
2.1.1 Fizikalni pokazatelji kakvoće vode	4
2.1.2 Kemijski pokazatelji kakvoće vode	5
2.1.3 Biološki pokazatelji kakvoće vode	9
2.2 Promjena kakvoće vode	10
2.3 Zagađenje nitratima	11
2.3.1 Osnovne fizikalne značajke amonijaka	12
2.4 Vodocrpilište Varaždin	12

3	Matematički model	15
3.1	Hipoteza kontinuuma	15
3.2	Darcyev zakon	16
3.3	Hidraulička vodljivost	17
3.4	Širenje onečišćenja	19
3.4.1	Difuzija	19
3.5	Domena i rubni i početni uvjeti	20
3.5.1	Laplaceova jednačba	22
4	Lokalizacija onečišćenja strojnim učenjem	25
4.1	Prikupljanje podataka	25
4.2	Monte Carlo metoda	27
4.2.1	Struktura MC programa	27
4.3	Neuronske mreža	28
4.3.1	Struktura ANN programa	28
4.4	Random Forest	30
4.4.1	Struktura RF programa	30
5	Rezultati	32
5.1	Rezultati Monte Carlo simulacije	32
5.1.1	Rezultati za 5% odstupanja od izmjerene vrijednosti	32
5.1.2	Rezultati za 3% odstupanja od izmjerene vrijednosti	34
5.2	Rezultati za neuronsku mrežu	36
5.2.1	Rezultati neuronske mreže za drugi set podataka	37

Sadržaj

5.3	Rezultati za <i>Random forest</i>	38
5.3.1	Rezultati za novi set podataka	39
6	Zaključak	40
7	Sažetak	44
A	Kodovi	47
A.1	Kod za pokretanje simulacija	47
A.2	Kodovi za obradu podataka	48

Popis slika

2.1	Kruženje dušikovih spojeva [2]	8
2.2	Izmjena vode između čovjekovih djelatnosti i prirodnih voda [1]	11
2.3	Raspored bunara i piezometara na vodocrpilištu Varaždin, <i>B3 - B10</i> - bunara iz gornjeg vodonosnog sloja <i>B11</i> - bunar iz donjeg vodonosnog sloja; <i>P23-P30</i> - piezometri koji se nalaze na granicama [5]	14
4.1	Pozicije promjrnjivih izvora	26
4.2	Struktura neuralne mreže	29
4.3	Struktura random forest algoritma	31
5.1	Jačine nitrata za svaki bunar s odsupanjem od 5 posto	33
5.2	Jačina svih izvora za odstupanje od 5%	34
5.3	Jačina svih izvora za odstupanje od 3%	35
5.4	Točnost modela za 472392 podatka	36
5.5	Točnost modela	38
A.1	kod za pokretanje (a)	47
A.2	kod za pokretanje (b)	48

Popis slika

A.3	Monte Carlo	49
A.4	Monte Carlo - vizualizacija	50
A.5	ANN (a)	50
A.6	ANN (b) - nastavak koda	51
A.7	RF	51

Popis tablica

2.1	Uobičajeni ioni u prirodnim vodama (Srebrenović D: Hidrologija, 1979., Zagreb -str. 396)	6
2.2	Ioni koji čine alkalitet [1]	7
2.3	Osnovne fizikalne značajke amonijaka [3]	12
4.1	Rezultati za Monte Carlo	29
5.1	Rezultati za Monte Carlo	33
5.2	Rezultati za Monte Carlo	35
5.3	pozicije izvora za Random forest	37
5.4	Rezultati za Random forest	38
5.5	Rezultati za Random forest	39

Poglavlje 1

Uvod

Voda, izvor života, jedna je od najrasprostranjenijih tvari na Zemlji. Jedna od karakteristika vode je otapanje tvari svih agregatnih stanja, Iako ta karakteristika znatno obogaćuje vodu mineralima korisnima za ljudski rod, s druge strane može ju onečistiti do mjere kada više nije prikladna za konzumaciju.

Ujedinjeni narodi su 1977. godine usvojili rezoluciju kojom definiraju da svi ljudi, bez obzira na razinu razvoja, socijalni ili ekonomski status moraju imati pravo na pitku vodu odgovarajuće kvalitete barem u onoj mjeri da zadovolje svoje osnovne potrebe (UN, 1977.). Porastom ljudske populacije sve više raste potreba za kvalitetnom pitkom vodom koja je dostupna svakom kućanstvu. Sve veća potreba za vodom stvara potrebu za novim vodocrpilištima na ruralnim područjima.

Glavna prepreka kvalitetnoj vodi u svakom kućanstvu je onečišćenje podzemnih voda. Poljoprivredna proizvodnja prepoznata je kao jedan od primarnih onečišćivača podzemnih voda, prvenstveno nitratima. Nitrati uneseni u tlo gnojivima lako su topivi, te mogu biti akumulirani u vodi dugi vremenski period i transportirani na velike udaljenosti.

1.1 Motivacija i problematika rada

U prethodnim istraživanjima nitrati su definirani kao glavni onečišćivač podzemnih voda. Ovim radom pokušava se pronaći izvor onečišćenja podzemnih voda na istražnom području. Kao lokacija istražnog područja određeno je vodocrpilište na području grada Varaždina. Vodocrpilište Varaždin dugi niz godina imalo je glavnu ulogu u vodoopskrbnom sustavu na području grada Varaždina i okolice. Međutim, kvaliteta vode crpljena na tom vodocrpilištu dugi niz godina nije zadovoljavala kriterije propisane Pravilnikom o zdravstvenoj ispravnosti vode za piće.

Cilj rada je na temelju numeričkog modela strujanja podzemnih voda dobiti izvor onečišćenja promatranog područja. Ideja rada je da se pomoću velike količine podataka za različite jačine izvora onečišćenja izraditi matematički model koji bi na temelju vrijednosti nitrata na mjernim točkama (bunarima) dao najvjerojatniji izvor onečišćenja. Numerički model je pojednostavljeni model strujanja nitrata koji koristi samo difuzijsku jednadžbu strujanja. Velika količina vrijednosti nitrata na mjernim točkama je dobivena pokretanjem numeričkog modela strujanja za različite vrijednosti nitrata na tri potencijalna izvora, koji se mijenjaju prilikom svakog pokretanja. Pomoću strojnog učenja, Monte Carlo metode, neuronske mreže i *Random forest* algoritma će se pokušati dobiti najvjerojatniji izvor onečišćenja podzemnih voda s ciljem ispitivanja metoda i pristupa svakom od korištenih algoritama.

Poglavlje 2

Kakvoća vode i promjene kakvoće vode

2.1 Kakvoća vode

U prirodnim se vodama nalaze raspršene i otopljene tvari koje su posljedica sukcesija ekosustava. Pojam "kakvoća vode" se uvodi kako bi se definirala upotrebljivost vode za pojedine namjene. Kakvoća vode se određuje veličinom pojedinih pokazatelja određenih tvari i energije vode. Kakvoća se određuje prema sljedećim pokazateljima:

- fizikalnim
- kemijskim
- biološkim.

kako je definirano u knjizi Zaštita voda Stanislava Tedeschia ([1]) Sve otopljene i raspršene tvari u vodi su ili organskog ili anorganskog porijekla. Otopljene tvari se definiraju kao tvari koje se nalaze u vodi u obliku iona i molekula, a po dimenziji su istog reda veličine ili manje od molekule vode. Koloidi su sitne čestice koje su

Poglavlje 2. Kakvoća vode i promjene kakvoće vode

dimenzijski između otopljenih i raspršenih čestica, dok se raspršene čestice definiraju kao čestice koje se zadrže na cjediljki.

Poznavanje pojedinih pokazatelja kakvoće vode bitno je za nadzor i upravljanje vodoopskrbnih područja.

2.1.1 Fizikalni pokazatelji kakvoće vode

Fizikalni pokazatelji ne određuju u potpunosti kakvoću vode, ali nam na temelju mirisa, okusa, boje, izgleda i temperature mogu na prvi pogled indicirati kakve je kvalitete određena voda. Fizikalne pokazatelji su:

- **RASPRŠENE TVARI** - Raspršene tvari mogu biti organskog i anorganskog porijekla. Raspršene tvari svojstvene su za površinske vode, a koncentracija i sastav ovise o biološkim prilikama u vodnom sustavu, o vučnoj sili vode te o geološkim i morfološkim prilikama sliva.
- **MUTNOĆA** - Mutnoća vode nastaje od raspršenih tvari, mikroorganizama i mjehurića plinova. Ona utječe na mogućnost prodiranja svjetlosti u stupcu vode, te može biti izazvana strujanjem, valovima ili uslijed vanjskih utjecaja (naročito ispuštanjem otpadnih voda).
- **BOJA** - Boja u vodi nastaje od otopljenih i raspršenih tvari.
- **MIRIS I OKUS** - Miris i okus su često međusobno povezani, te mogu biti posljedica nekoliko uzroka kao što su : raspadanje organskih tvari, prisutnost živih organizama, industrijske otpadne tvari, otopljeni plinovi i soli. Miris i okus vodu čine neprikladnom za piće.
- **TEMPERATURA** - Temperatura prirodnih voda povezana je s temperaturom okoliša, te je promjenjiva tijekom godine.

2.1.2 Kemijski pokazatelji kakvoće vode

Kemijski pokazatelji uvelike određuju upotrebljivost vode. U vodi se mogu nalaziti otopljene tvari od kojih se neke mogu bitno utjecati na povećanje biološke proizvodnje u ekosustavu, a neke mogu biti štetne ili opasne za organizme. Kemijske primjese mogu se podijeliti na tri skupine:

1. tvari koje se nalaze u prirodnim vodama
2. tvari koje po koncentraciji i sastavu bitno ne pogoršavaju mogućnost upotrebe vode, ali su nepoželjne u većim količinama
3. tvari koje po svom sastavu i koncentraciji čine vodu neupotrebljivom za određene namjene.

Zbog konstantnih promjena kemijskih spojeva koji se mogu nalaziti u vodi kao posljedica čovjekovih djelatnosti, nije moguće navesti sve pokazatelje koji bi se mogli ispitivati da bi se utvrdila kakvoća vode. U sanitarnom inženjerstvu najčešće se koriste:

- UKUPNO OTOPLJENE TVARI - Ukupno otopljene tvari se definiraju kao tvari koje ostaju nakon cijeđenja, a utvrđuju se isparavanjem na temperaturi od $105\text{ }^{\circ}\text{C}$, pa se taj pokazatelj često naziva i "suhi ostatak procijeđene vode". Kao i kod raspršenih tvari, u vodi se nalaze otopljene anorganske i organske tvari. Otopljene tvari u vodi nalaze se u obliku iona, molekula i spojeva koji nisu ionizirani. Najčešći ioni u vodama predloženi su tablicom 2.1. Otopljene tvari u vodi nalaze se kao posljedica prolaza vode kroz atmosferu, otjecanjem po površini tla ili u podzemlju.

Poglavlje 2. Kakvoća vode i promjene kakvoće vode

Tablica 2.1 Uobičajeni ioni u prirodnim vodama (Srebrenović D: Hidrologija, 1979., Zagreb -str. 396)

Glavni sastojci 1,0 - 1000 mg/l	Ostali sastojci 0,01 - 10,0 mg/l
Natrij	Željezo
Kalcij	Stroncij
Magnezij	Kalij
Hidrogenkarbonati	Karbonati
Sulfati	Fluoridi
Kloridi	Nitrati
	Bor
	Silicij

- KONCENTRACIJA VODIKOVIH IONA - Koncentracija vodikovih iona pokazuje lužnatost ili kiselost vode. Ona je značajan pokazatelj kakvoće vode jer mnogi postupci čišćenja vode ovise o pH vrijednosti. U prirodnim nezagađenim vodama pH vrijednost je u međuovisnosti o slobodnim karbonatima i hidrokarbonatima, te ugljikovom dioksidu. Vode zagađene industrijskim otpadom mogu imati nisku pH vrijednost.
- ALKALITET - Alkalitet određuje količina iona koji neutraliziraju vodikove ione. U tablici 2.2 prikazano su ioni koji čine alkalitet u prirodnim vodama. Navedeni ioni nastaju otapanjem mineralnih tvari u tlu i atmosferi. Nepoželjni utjecaj alkaliteta vode su mogućnost pojave taloga u cijevima i mogućnost djelovanja s određenim kationima.

Poglavlje 2. Kakvoća vode i promjene kakvoće vode

Tablica 2.2 Ioni koji čine alkalitet [1]

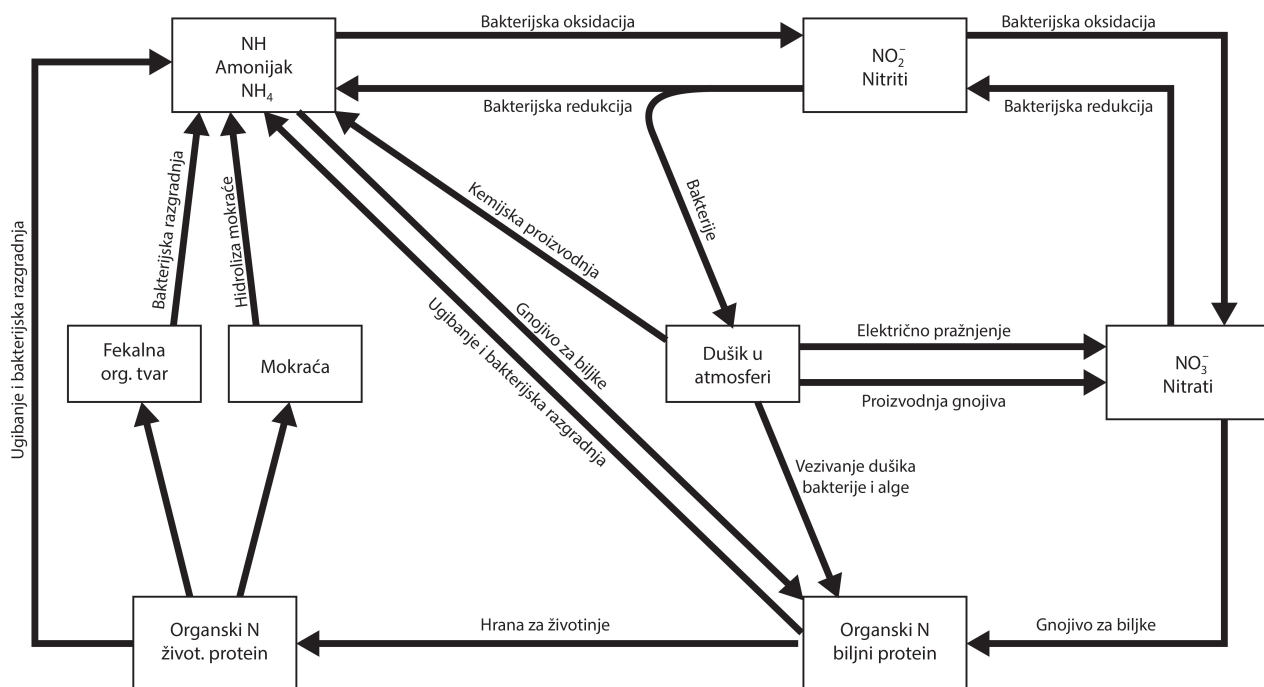
Naziv iona	Oznaka iona
Karbonati	CO_3^-
Hidrogenkarbonati	HCO_3^-
Hidroksidi	OH^-
Silikati	$HSiO_3^-$
Borati	$H_2BO_3^-$
Fosfati	HPO_4^{2-} , $H_2PO_4^{2-}$
Hidrogensulfati	HS^-

- **TVRDOĆA VODE** - Tvrdoća vode određena je koncentracijom polivalentnih metalnih kationa u otopini. U prirodnim vodama to su najčešće kalcij i magnezij. Utjecaj ostalih metalnih kationa znatno je manji s obzirom na njihovu količinu u vodi. Ukupna tvrdoća vode može biti karbonatna ili prolazna, koju čine karbonati i hidrogenkarbonati, te nekarbonatna ili stalna ako se u vodi nalaze kloridi i sulfati.
- **OTOPLJENI PLINOVI** - Od otopljenih plinova najčešće se ispituje količina kisika, vodikova sulfata i ugljikova dioksida. Kisik dolazi u vodu otapanjem iz zraka te fotosintezom, dok se ugljikov dioksid u vodi nalazi kao vezan ili kao slobodan. Vodikov sulfat se nalazi u vodi kao posljedica razgradnje organskih tvari ili kao posljedica vulkanskih aktivnosti.
- **ORGANSKE TVARI** - Organske tvari u vodi, koje se u prirodnim vodama mogu nalaziti kao raspršene i otopljene, porijeklom su najčešće : proizvodi biokemijskih procesa u vodi, posljedica ispiranja zemljišta oborinskom vodom te sastojci ispuštenih gradskih i industrijskih otpadnih voda.
- **HRANJIVE TVARI** - Pod hranjivim tvarima podrazumijevaju se tvari koje su potrebne za proizvodnju algi i zelenih biljki. Dušik i fosfor obično čine

Poglavlje 2. Kakvoća vode i promjene kakvoće vode

ograničavajuće činitelje rasta algi i zelenih biljaka.

Određene vrste algi i biljaka mogu uzimati dušik iz atmosfere, no najveći dio dušikovih spojeva u vodi posljedica je razgradnje organskih tvari. Ispiranjem poljoprivrednih zemljišta u vodne sustave unosi se dodatna količina nitrata.



Slika 2.1 Kruženje dušikovih spojeva [2]

Do postupka nitrifikacije dolazi zbog razgradnje amonijaka, nitrata i nitrita u vodnim sustavima u kojima ne postoji dovoljna količina kisika.

U prirodnim vodama dušikovi spojevi pokazuju na organsko zagađenje te vrijeme kad je nastalo onečišćenje vode. Amonijak je indikator svježeg onečišćenja, nitriti razmjerno bliskog onečišćenja, a nitrati davnog zagađenja vode organskim tvarima.

Poglavlje 2. Kakvoća vode i promjene kakvoće vode

Fosfati se z vodi nalaze kao posljedica ispiranja zemljišta, naročito poljoprivrednih zemljišta na kojima se koriste umjetna gnojiva. Fosfati nisu otrovni i opasni za ljudsko zdravlje.

- KOVINE - U vodama se nalazi određena količina metala (kovina). Povećanje količine kovina u vodi može biti posljedica ispuštanja otpadnih voda . Iako je veća koncentracija kovina u podzemnim vodama nepoželjna, one se najčešće dijele na otrovne i neotrovne kovine.

Neotrovne kovine su željezo, mangan, aluminij, bakar i cink, koje su u malim količinama nužne za život organizama. Otrovnost kovine koje mogu biti otopljene u prirodnim vodama su : arsen, barij, kadmij, krom, živa, srebro, a posebno otrovne su arsen, kadmij i živa. Pojava veće koncentracije otrovnih kovina u vodama ukazuje na opasnost onečišćenja vode otpadnim tvarima, najčešće iz industrijskih otpadnih voda.

- OSTALI KEMIJSKI POKAZATELJI - Od brojnih pokazatelja kakvoće vode navest će se samo neki, koji su najčešći u vodama.

1. Fluoridi
2. Kloridi
3. Sulfati
4. Cijanidi

2.1.3 Biološki pokazatelji kakvoće vode

Biološke prosudbe o stanju vodnih sustava temelje se na promjenama u ekosustavu. Biološke prosudbe postaju sve važnije u vodnim sustavima zbog ispuštanja otpadnih tvari. Kako se koncentracija otpadnih tvari u prirodnim vodama konstantno mijenja, stanje kakvoće vode ovisi o vremenu i načinu uzimanja uzorka.

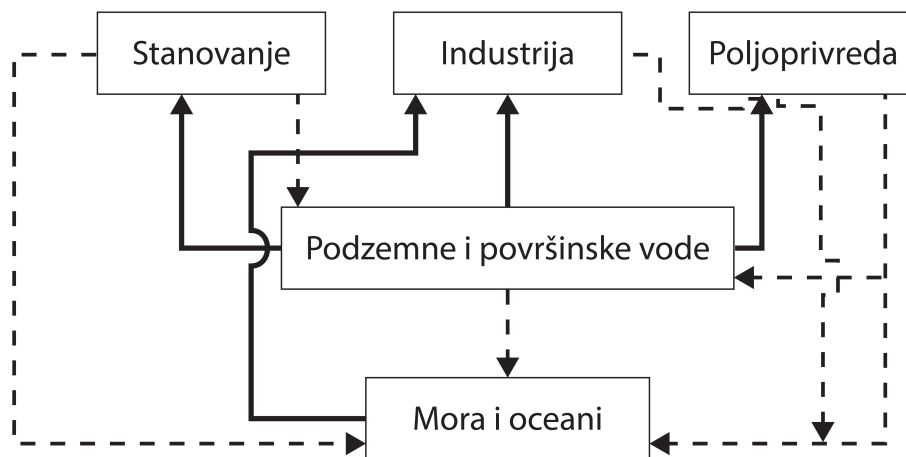
Poglavlje 2. Kakvoća vode i promjene kakvoće vode

Međutim, promjena staništa utjecat će na floru i faunu, te će sama promjena staništa organizama indicirati promjenu kakvoće vode, odnosno zagađenja.

2.2 Promjena kakvoće vode

Zaštita postojećih vodnih zaliha i poboljšanje postojećih , već onečišćenih voda je bitan uvjet za razvoj, ali i za opstanak ljudske rase.

Voda u prirodi je u stalnom kruženju. Nakon kondenzacije vodene pare u atmosferi, voda dolazi na Zemlji u obliku padalina. Dio padalina se procjeđuje u podzemlje, dio dospijeva u more, a dio teče površinom. Voda se na Zemlji u najčešćem obliku nalazi kao vodena para. Već prilikom isparavanja, vodena para dolazi u doticaj sa česticama, što znači zagađivanje atmosfere. Prolaskom kroz atmosferu, u vodi se otapaju i raspršuju plinovi, dim i čestice prašine, koji se u atmosferi nalaze uslijed ispuštanja štetnih tvari kroz dimnjake. Daljnje promjene sastava vode nastaju ispiranjem površine tla, a nastavlja se tečenjem po površini i procjeđivanjem u tlo.



Slika 2.2 Izmjena vode između čovjekovih djelatnosti i prirodnih voda [1]

Podzemne vode služe kao vodoopskrba, ali istovremeno i kao prijammnici otpadne vode, pa je moguća promjena kakvoće vode sve veća. Čovjekova djelatnost predstavlja bitan čimbenik u promjeni sastava i koncentracije onečišćenja voda (slika 2.2). U vodne sustave svakodnevno se ispuštaju velike količine organskih i anorganskih otpadnih tvari, topline i radioaktivnih tvari.

2.3 Zagađenje nitratima

Nitratni ioni, u malim se količinama nalaze u vodi. Povećanje koncentracije nitratnih iona je posljedica amonijskih procesa i raspadanja organskih spojeva (vidi 2.1.2 *Kemijski pokazatelji kakvoće vode*). Kao što je već napomenuto, do zagađenja nitratima dolazi ispuštanjem otpadnih voda iz kućanstva ili poljoprivrede.

2.3.1 Osnovne fizikalne značajke amonijaka

Amonijak je i u plinovitom i u tekućem stanju bezbojan. Za industrijsku uporabu amonijak se može proizvesti u više različitih proizvoda koji sadrže vodik i dušik.

Amonijak je kvalificiran kao korozivni plin. Kemijski gledano, amonijak je stabilan kemijski spoj koji je kemijski reaktivan samo pod specifičnim uvjetima ili s određenim kemikalijama. U prisutnosti s vlagom ili rastopljen u vodi amonijak je reaktivniji. Reagirat će s bakrom, cinkom i slitinama tih metala. Fizikalne značajke prikazane su u tablici 2.3

Tablica 2.3 Osnovne fizikalne značajke amonijaka [3]

Svojstvo	Veličina
Molekularna masa	17,03
Točka vrelišta	$-33,4^{\circ}C$ pri 1 atm
Točka smrzavanja	$-77,7^{\circ}C$
Gustoća (plin)	$0,8899kg/m^3$ u $-33,2^{\circ}C$
Gustoća (tekućina)	$681,9kg/m^3$ u $-33,2^{\circ}C$

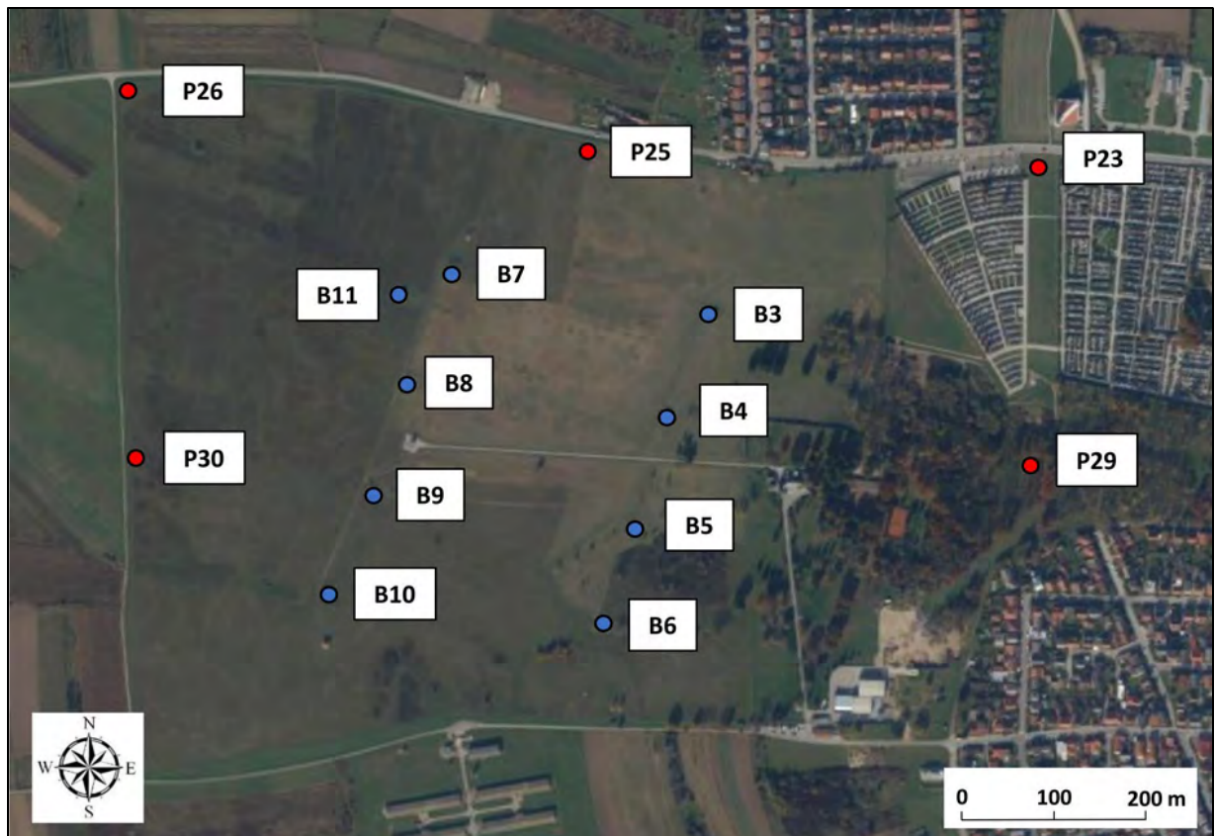
2.4 Vodocrpilište Varaždin

Vodocrpilište Varaždin, koje je službeno pušteno u rad 1963. godine, dugo je vremena imalo ulogu vodećeg vodoopskrbnog sustava na lokaciji Varaždinske županije. Iako je vodocrpilište imalo značajnu ulogu u dovođenju vode u kućanstva grada Varaždina i okolice, kvaliteta vode na tom području je bila zabrinjavajuća. Naime, vrijednost količine nitrata je često puta premašila dozvoljenu koncentraciju. Zatvaranjem bunara B1 i B2 (slika 2.3) 1986. godine najavljeno je ograničenje rada vodocrpilišta. A od 1997. godine crpljenje vode je smanjeno, te je 2004. godine Vodocrpilište zatvoreno. Razlog zatvaranja je visoka koncentracija nitrata u podzemnoj vodi.

Poglavlje 2. Kakvoća vode i promjene kakvoće vode

Na vodocrpilištu danas postoji 8 bunara iz gornjeg vodonosnog sloja (*B3 - B10*) i jedan bunar iz donjeg vodonosnog sloja (*B11*) koji je izbušen 2004. godine. Vodocrpilište je omeđeno piezometrima (*P23-P30*) koji se nalaze na granicama i služe za kontrole podzemne vode. Iako je danas u Varaždinu dovoljna količina vode za trenutne potrebe stanovništva, neaktivno vodocrpilište u koje su uložena značajna sredstva velik je gubitak za zajednicu [4].

Poglavlje 2. Kakvoća vode i promjene kakvoće vode



Slika 2.3 Raspored bunara i piezometara na vodocrpilištu Varaždin, *B3 - B10* - bunara iz gornjeg vodonosnog sloja *B11* - bunar iz donjeg vodonosnog sloja; *P23-P30*- piezometri koji se nalaze na granicama [5]

Poglavlje 3

Matematički model

3.1 Hipoteza kontinuuma

Hidrogeološki sustav je višefazni sustav koji se sastoji od čvrste faze odnosno krutih čestica i pora koje su ispunjene zrakom ili podzemnim vodama (fluid). Veličina prostora u kojem se promatra širenje onečišćenja u podzemnim vodama često varira u mjerilu, pa se razlikuju dva osnovna tipa mjerila: mikroskopsko i makroskopsko. Pošto se u ovom radu radi o dvodimenzionalnoj domeni sa prijenosom onečišćenja difuzijom, nama je potrebno samo mikroskopsko mjerilo.

U mikroskopskom mjerilu se promatra točka unutar promatrane faze, ili na granici dviju faza. U tom mjerilu se pretpostavlja da se diskontinuiteti mogu jasno razabrati i opisati. U osnovnom konceptu mehanike kontinuuma to je osrednjivanje na molekularnoj razini.

3.2 Darcyev zakon

Za potrebe proračuna toka podzemnih voda u shemi kontinuuma uvodi se pojam Darcyjeva brzina, koja je definirana kao omjer protoka kroz neko područje i površine proticajnog presjeka:

$$q = \frac{Q}{P} \quad (3.1)$$

gdje je:

- q - Darcyeva brzina ($\frac{L}{T}$)
- Q - Protok ($\frac{L^3}{T}$)
- P - Poprečni presjek (L^2)

Kako voda teče samo kroz pore, stvarna brzina strujanja vode se dobiva omjerom Darcyjeve brzine i poroznosti:

$$v = \frac{q}{n} \quad (3.2)$$

Gdje

- v - predstavlja stvarnu brzinu toka podzemnih voda ($\frac{L}{T}$)
- n - predstavlja poroznost tla.

Poroznost tla se definira kao omjer volumnog udjela šupljina i ukupnog volumena tla:

$$n = \frac{V - V_s}{V} = \frac{V_p}{V} \quad (3.3)$$

gdje je:

- V - ukupni volumen tla uključujući pore (L^3)
- V_s - volumen čvrstih dijelova tla (L^3)
- V_p - volumen pora (L^3)

Poglavlje 3. Matematički model

Darcyjev zakon je zakon protoka vode kroz porozni medij a laminarnim gravitacijskim tokom, a brzina strujanja vode glasi:

$$q = Ki \quad (3.4)$$

gdje je:

- K - hidraulička vodljivost ($\frac{L}{T}$)
- i - hidraulički gradijent

Hidraulički gradijent je fizikalna vrličina koja predstavlja promjenu potencijala na promatranom putu, a definira se:

$$i = \frac{\Delta h}{\Delta L} \quad (3.5)$$

gdje je:

- Δh - razlika potencijala dviju točaka (L)
- ΔL - udaljenost mjernih točaka (L)

Uvrštavanjem 3.5 u 3.4 dobivamo:

$$q = K \frac{\Delta h}{\Delta L} \quad (3.6)$$

Općenito je prihvaćeno da Darcyjev zakon vrijedi u slučajevima $Re < 10$, jer su tada brzine male, režim strujanja je laminaran i viskozne sile su dominantne.

3.3 Hidraulička vodljivost

U jednanžbi 3.4 se pojavljuje parametar K koji se naziva hidraulička vodljivost. Hidraulička vodljivost opisuje otpor tečenju fluida kroz poroznu sredinu i ovisi o

Poglavlje 3. Matematički model

karakteristikama porozne sredine i o karakteristikama fluida:

$$K = \frac{\rho g}{\eta} * p \quad (3.7)$$

gdje je:

- ρ - gustoća fluida ($\frac{M}{L^3}$)
- g . gravitacijsko ubrzanje ($\frac{L}{T^2}$)
- η - dinamička viskoznost tekućine (PT)
- p - propusnos porozne sredine koja ovisi o obliku i rasporedu zrna.

Kako je hidraulička vodljivost definirana veličinom, i oblikom pora tla, tla sitnije granulacije poput gline i mulja imaju manje vrijednosti od tla krupnije granulacije poput šljunka.

Vrijednost hidrauličke vodljivosti razlikuje se s obzirom na stupanj saturiranosti, pa su tako vrijednosti za nesaturirana područja manja u odnosu na saturirana. Iz tog se razloga hidraulička vodljivost za nesaturirana područja definira kao umnožak hidrauličke vodljivosti za saturiranu sredinu i relativne hidrauzličke vodljivosti :

$$K_n = K * K_r \quad (3.8)$$

gdje je:

- K_n - hidraulička vodljivost za nesaturirane sredine ($\frac{L}{T}$)
- K_r - relativna hidraulička vodljivost ($\frac{L}{T}$) koja je funkcija zasićenosti tla i ovisi o tlaku u porama te se može izraziti pomoću Van Genuchtenova izraza.

3.4 Širenje onečišćenja

Kako bi se matematički opisao model širenja onečišćenja u podzemnim vodama, potrebno je poznavati matematički model prijenosa onečišćenja koje se sastoji od difuzije, advekcije i disperzije. U ovom radu se numerički model bazira na širenju onečišćenja difuzijom.

3.4.1 Difuzija

U slučaju kada nema konvekcije ili toka podzemnih voda glavni mehanizam širenja čestica onečišćenja se odvija difuzijom.

Molekularna difuzija nastaje kao posljedica razlike koncentracije otopljene tvari u otopini, gdje zbog razlike u potencijalu dolazi do premještanja tvari. Difuzijom se tvari gibaju s mjesta veće, prema mjestu manje koncentracije, a takav protok unutar otopine zbog razlike u gradijentu koncentracije definiran je prvim Fickovim zakonom (3.9).

$$q_m = -D_m \nabla C \quad (3.9)$$

gdje je:

- q_m - Protok uzrokovan difuzijom ($\frac{M}{L^2T}$)
- D_m - Koeficijent difuzije promatrane tvari u otapalu ($\frac{L^2}{T}$)
- ∇ - Hamiltonov operator ($\frac{1}{L}$)
- C - Koncentracija promatrane tvari ($\frac{M}{L^3}$)

Kada imamo tok koji se odvija kroz porozni materijal difuzija je znatno sporija nego u otopinama zbog manje površine na kojoj se prijenos odvija, te zbog putanje strujanja koja nije ravna, put koje čestice moraju prijeći se produljuje. Osim navedenih faktora

Poglavlje 3. Matematički model

na smanjenje efektivnosti difuzije utječe i međudjelovanje čestica i porozne sredine. Zbog neidealnosti prijenosa difuzijom uvodi se pojam efektivnog koeficijenta difuzije (3.10) kojim se korigira koeficijent difuzije (D_m) ovisno o poroznosti površine.

$$D_m^F = D_m f(n) \quad (3.10)$$

gdje je:

- D_m^F - Efektivni koeficijent difuzije ($\frac{L^2}{T}$)
- $f(n)$ - Funkcija koja ovisi o poroznosti sredine

Promjena koncentracije promatrane tvari difuzijom ovisno o vremenu može se prikazati drugim Fickovim zakonom:

$$\frac{\delta C}{\delta t} = D \Delta^2 C \quad (3.11)$$

3.5 Domena i rubni i početni uvjeti

Da bi matematički model imao smisleno traženo rješenje potrebno je odabrati onakav slučaj koji nam zadovoljava rubne i početne uvjete.

Ako označimo fizikalnu domenu s Ω , njenu granicu s Γ , vektor normale na granicu, koji je najčešće usmjeren iz domene prema van, \mathbf{n} , te smjer tangencionalno na granicu označimo sa vektorom \mathbf{s} , rubne i početne uvjete možemo kategorizirati na sljedeći način:

1. Dirichletovi rubni uvjeti - vrijednosti varijabli postavljenih na granici

$$\phi = f \text{ na granici } \Gamma \quad (3.12)$$

Poglavlje 3. Matematički model

2. Neumanovi rubni uvjeti - derivacije varijabli postavljene na granici u normalnom ili tangencijalnom smjeru

$$\frac{\delta\phi}{\delta n} = f \text{ ili } \frac{\delta\phi}{\delta s} = g \text{ na granici } \Gamma \quad (3.13)$$

3. Miješani ili Robinov rubni uvjet - zadaje se kombinacijom Dirichletovih i Neumannovih uvjeta na granici obično u nekom omjeru

$$a\frac{\delta\phi}{\delta n} + b\phi = f, \text{ uz } a > 0, b > 0, \text{ na granici } \Gamma \quad (3.14)$$

4. Cauchyjev rubni uvjet - zadaju se Dirichletov i Neumanov uvjet- po pojedinim dijelovima granice npr.

$$\phi = f_1, \text{ na granici } \Gamma_1, \frac{\delta\phi}{\delta n} = f_2, \text{ na granici } \Gamma_2, \text{ gdje su } \Gamma_1 \text{ i } \Gamma_2 \text{ dijelovi granice } \Gamma \quad (3.15)$$

5. Početni uvjeti

$$\phi(x, 0) = f \text{ na cijeloj domeni } \Omega \quad (3.16)$$

Broj dodatnih uvjeta, početnih i rubnih pri rješavanju parcijalnih diferencijalnih jednadžbi određen je derivacijom najvišeg reda po svakoj neovisnoj varijabli koja se javlja u jednadžbi. Na primjer kod jednadžbe difuzije, ako jednadžbu 3.11 napišemo na način:

$$\frac{\delta c}{\delta t} = D \frac{\delta^2 C}{\delta x^2} \quad (3.17a)$$

$$\frac{\delta c}{\delta t} - D \frac{\delta^2 C}{\delta x^2} = 0 \quad (3.17b)$$

Iz 3.17 slijedi da je difuzijska jednadžba prvog reda po vremenu t i drugog reda po x te ona zahtjeva jedan dodatni uvjet u vremenu \rightarrow jedan početni uvjet, i dva uvjeta

po x -u \rightarrow dva rubna uvijeta, odnosno ukupno tri dodatna uvijeta.

3.5.1 Laplaceova jednadžba

Neviskozna područja dovoljno udaljena od stijenke koja ne rotira i područja van vrtložnih zona, mogu se smatrati bezvrtložnim.

Aproksimacija bezvrtložnosti može se izraziti:

$$\mathbf{rot} \mathbf{v} = 0 \quad (3.18)$$

ili

$$\nabla \times \mathbf{v} = 0 \quad (3.19)$$

Ako za neku skalarnu funkciju Φ koja je ovisna o varijablama x, y, z pretpostavimo da je glatka, tada vrijedi:

$$\nabla \times \nabla \phi = 0 \quad (3.20)$$

te uočimo identitet za bezvrtložnost [3.19](#) tada vrijedi:

$$\mathbf{v} = \nabla \Phi \quad (3.21)$$

Odnosno u kartazijskom koordinatnom sustavu, komponente vektora brzine su:

$$u = \frac{\delta \Phi}{\delta x}; v = \frac{\delta \Phi}{\delta y}; w = \frac{\delta \Phi}{\delta z} \quad (3.22)$$

Iz prethodnog izraza slijedi da se strujno polje vektora brzine može izraziti kao gradijent neke skalarne funkcije, a ta skalarna funkcija se tada naziva potencijal brzine Φ .

Poglavlje 3. Matematički model

- ZOM - Primjenom Reynoldsovog transparentnog teorema, formulacije zakona očuvanja mase za kontrolni volumen vezane su za Eulerov opis strujanja. Općenito veličina ϕ zamjenjuje se gustoćom ($\phi = \rho$)

$$\int_{CV} \frac{\delta \rho}{\delta t} dV + \int_{CS} \rho \vec{v} * \vec{n} dS = 0 \quad (3.23)$$

- Jednadžba 3.23 se može fizikalno interpretirati tvrdnjom da se tijekom vremena masa unutar kontrolnog volumena povećava neto utokom mase u kontrolni volumen. Pod neto utokom podrazumijeva se razlika mase koja je ušla i one koja je izašla iz kontrolnog volumena.

Primjenom divergencije na drugi član izraza 3.23, plošni integral se prevodi u volumni te možemo pisati:

$$\int_{CV} \left(\frac{\delta \rho}{\delta t} + \text{div}(\rho \mathbf{v}) \right) dV = 0 \quad (3.24)$$

- Pošto je u gornjem izrazu proizvoljan volumen integracije slijedi da je izraz u zagradi 0, odnosno dobivamo zakon očuvanja mase u diferencijalnom obliku:

$$\frac{\delta \rho}{\delta t} + \nabla(\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (3.25a)$$

$$\text{pojednostavljeno : } \nabla \mathbf{v} = 0 \quad (3.25b)$$

Ako izraz 3.21 uvrstimo u izraz za zakon očuvanja mase 3.25b slijedi :

$$\nabla * \nabla \Phi = 0 \quad (3.26)$$

odnosno

$$\delta \Phi = 0 \quad (3.27)$$

Poglavlje 3. Matematički model

što je Laplaceova jednažba koja je pojednostavljene Navier-Stokesovih jednažbi.

Poglavlje 4

Lokalizacija onečišćenja strojnim učenjem

4.1 Prikupljanje podataka

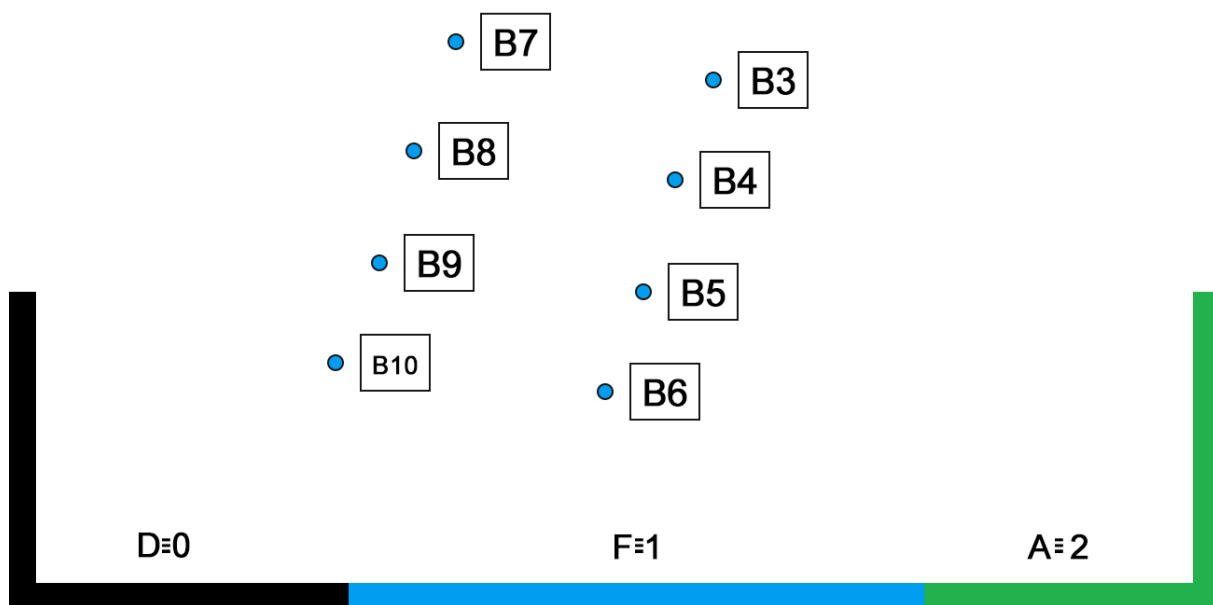
Za strojno učenje prvo je potrebno skupiti podatke za slučaj onečišćenja podzemnih voda na promatranom području. Pomoću koda prikazanog na slikama [A.1](#) i [A.2](#) prikupljeno je šest milijuna podataka, koji su kasnije u obradi podataka bili podijeljeni na šest milijuna, milijun, četrsto tisuća, četrdeset tisuća i šest tisuća da bi se kasnije mogli testirati algoritmi strojnog učenja objašnjeni u sljedećem poglavlju. Na slici [2.3](#) prikazan je raspored bunara. U bunarima je izmjerena koncentracija onečišćenja nitratima. Pretpostavka je da postoji deset potencijalnih izvora onečišćenja, od kojih se prilikom simulacija mijenjala količina na tri izvora (slika [4.1](#)).

Simulacije strujanja nitrata radile su se u programu *Fortran*, proceduralni, imperativni programski jezik koji je bio razvijen tijekom 50-ih godina dvadesetog stoljeća, a prvi *kompilet* je razvila tvrtka IBM. Model je dvodimenzionalni te korištenjem metode konačnih razlika rješava difuzijsku jednadžbu. Broj točaka u mreži je 82×78 ,

Poglavlje 4. Lokalizacija onečišćenja strojnim učenjem

odnosno dvije točke u smjeru x -osi i 78 točaka u smjeru y -osi.

Pokretanje problema i promjena izvora se odvijala pomoću *Python* koda, Unutar



Slika 4.1 Pozicije promjrnjivih izvora

for petlje se mijenjala količina onečišćenja na tri izvora prikazana na slici 4.1 te se još mijenjala vrijednost koncentracije nitrata na polju unutar domene (početni uvjet - *area field*). Važno je još napomenuti da su izvorima dodjeljene pozicije u kodu i to $D \rightarrow 0$, $F \rightarrow 1$ i $A \rightarrow 2$. Količina nitrata na izvoru se iterirala po koraku jedan, od 50 do 110, dok se *area* iterirao korakom od 0 do 100 korakom od 20. Izračunati podaci su se spremali u tekstualne datoteke.

Nakon što su proračuni bili gotovi, podaci su se pomoću *Pythona* pospremili u matrice koje su se dalje koristile za strojno učenje. Matrica koja sadrži vrijednosti količine nitrata na izvorima bila je definirana kao *output* matrica, a matrica u koju su se spremali podaci dobiveni simulacijom, odnosno podaci vrijednosti na mjernim točkama (bunarima), se koristila kao *input* matrica.

4.2 Monte Carlo metoda

Monte Carlo simulacije se koriste za izračunavanje vjerojatnosti različitih ishoda, za slučajeve kada se vjerojatnost ne može lako izračunati zbog pojavljivanja slučajnih brojeva. Najjednostavniji primjer upotrebe Monte Carlo simulacija je računanje broja π pomoću slučajnih brojeva. Monte Carlo simulacija slučajnih veličina, jedno-dimenzionalnih ili višedimenzionalnih, najčešće je jednostavan numerički postupak. Temeljni zadatak je ispitati kvalitetu numeričkih rezultata.

Monte Carlo simulacije baziraju se na jednostavnom konceptu odabira slučajnih veličina koje se najčešće prema standardnoj devijaciji, nalaze oko očekivane veličine. U ovom radu će se gledati izmjerene vrijednosti nitrata na bunarima i tražiti sve vrijednosti koje su dobivene simulacijama s odstupanjem od maksimalno $\pm 5\%$ u odnosu na točne vrijednosti, te će se gledati srednja vrijednost jačine tri promjenjiva izvora.

4.2.1 Struktura MC programa

Monte Carlo metoda ima vrlo jednostavan princip. S obzirom da su vrijednosti nitrata na svakom bunaru poznate, spremaju se u matricu. Svaki bunar u matrici uspoređuje se s izmjenom vrijednošću specifičnog bunara, odnosno bunar B3 na poziciji 1 u matrici se uspoređuje sa izmjenom vrijednošću s odstupanjem od 5% i tako dalje (kod prikazan na slici [A.3](#) u Prilogu). Nakon što se nađe određeno mjesto u matrici gdje se sve vrijednosti nitrata u bunaru poklapaju sa stvarnim vrijednostima u dozvoljenog odstupanja, podaci o jačini svakog izvora se spremaju u zasebnu matricu. Nakon što su matrice u kojima se spremaju vrijednosti onečišćenja bunara i jačine izvora definirane, može se naći srednju vrijednost svakog od promjenjivih izvora.

Na slici [A.4](#) je prikazan kod za vizualizaciju slike [5.1](#) , [5.2](#) i [5.3](#).

4.3 Neuronske mreža

Umjetne neuronske mreže (eng. *Artificial neural network*, ANN) su jedan od popularnijih područja unutar istraživanja umjetne inteligencije (AI). Neuronske mreže su apstraktni kompjuterski model koji je baziran na strukturi ljudskog mozga.

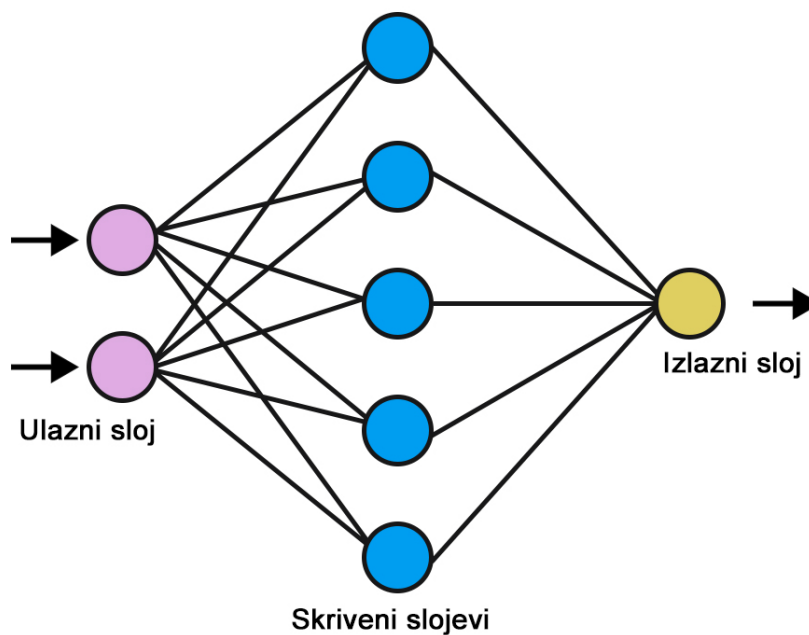
ANN je alat za manipulaciju podataka koji se najčešće koristi za modeliranje podataka u slučajevima kada je na temelju istreniranog modela potrebno predvidjeti ishod testnih podataka.

Neuronske mreže su organizirane u slojeve (eng. *layers*) koji su međusobno povezani čvorovima (eng. *nodes*). Neuronske mreža obrađuje podatke kroz čvorove paralelno da bi se riješio određeni problem.

Strukturni uzorak podataka se u mrežu unosi preko ulaznog sloja (*Input layer*), podaci se obrađuju u jednom ili više skrivenih slojeva (*Hidden layers*) koji su povezani s izlaznim slojem (*Output layer*), te se preko njega dobiva rezultat (slika 4.2) U ovom radu će se pomoću neuronske mreže, koja se nalazi unutar *keras* modula u *Pythonu*, pokušati predvidjeti najvjerojatniji dominantni izvor onečišćenja. Keras modul softverska knjižnica otvorenog koda koja pruža Python sučelje za umjetne neuronske mreže. Keras djeluje kao sučelje za biblioteku TensorFlow [10].

4.3.1 Struktura ANN programa

Neuronska mreža je izrađena pomoću *keras* modula, koji je modul unutar *Pythona* [10]. Prvo se podaci sortiraju u matrice, gdje je input količina nitrata na svakom bunaru, a output je pozicija izvora s maksimalnom količinom nitrata. Gdje su pozicije s obzirom na sliku 4.1 definirane kao: Nakon toga se podaci razdvajaju na testne i na podatke za treniranje mreže u omjeru 20% naprema 80%. Podaci se razdvajau pomoću funkcije *test_train_split* koja osigurava nasumičnu podjelu podataka. Nakon što su podaci sortirani slaže se kod za ANN. Koristi se *keras Model()* i to tako da



Slika 4.2 Struktura neuralne mreže

Tablica 4.1 Rezultati za Monte Carlo

pozicija	kratica prema slici 4.1
0	D
1	F
2	A

je *forward pass* odnosno da se treniranje odvija od *inputa* prema *outputu*. Sljedeće se model kompajlira, te se određuje točnost modela.

Prije predviđanja potrebna je provjera odnosa točnosti modela i testnih podataka, jer ako graf nema smisla, odnosno ako je došlo do *overfittinga* takav model ne daje točne rezultate.

Cijeli kod je prikazan na slikama [A.5](#) i [A.6](#).

4.4 Random Forest

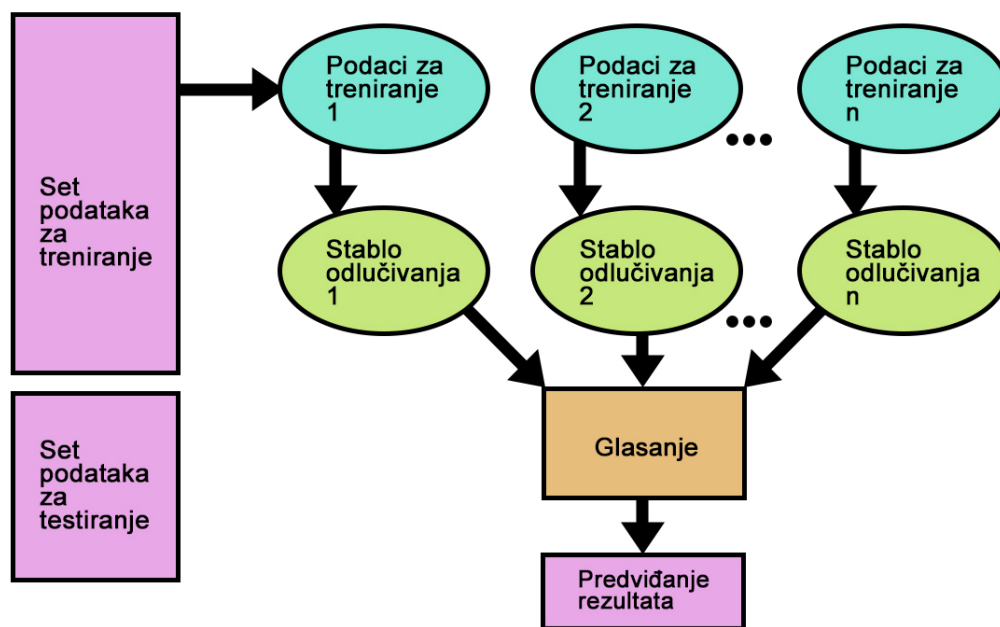
Random forest (RF) je popularni algoritam strojnog učenja te se temelji na konceptu skupnog učenja, što je proces kombiniranja više klasifikatora za rješavanje složenog problema i poboljšanje izvedbe modela. RF se bazira na nasumičnom odabiru podataka i značajki za svako 'stablo'. Prednost ovakve podjele podataka i značajki je da izbjegnemo *overfitting*, što je problem koji bi nam se mogao pojaviti kod neuralne mreže koju izražujemo za ovaj rad.

Koncept na kojem se ovaj algoritam bazira je vrlo jednostavan. Da bi razumjeli algoritam, prvo treba znati što je *decision tree* (DT). DT je koncept sortiranja podataka na temelju određenih karakteristika. Ako se na primjer uzme boja kuglica (crvena i plava) kao karakteristika, prvi čvor na kojem dolazi do odvajanja podataka je dali je kuglica plava ili ne. Nakon toga se može dalje sortirati po drugim karakteristikama, na primjer veličina kuglice što daje drugi čvor na kojem se odvija sortiranje i tako dalje. Ako se sada uzme velika količina takvih DT-a i raspodjele se karakteristike nasumično dobije se RF. Svako DT sortira karakteristike koje su mu dane zasebno i krajnji rezultat se dobiva 'glasanjem'. Takav pristup sortiranju podataka daje prednost jer nema pristranost određenom *outputu* (*overfitting*). Na slici 4.3 je prikazan jednostavan diagram kako *random forest* algoritam funkcionira. U ovom radu će se *random forest* algoritam također koristiti iz *python* knjižnice *sklearn.ensemble* [11].

4.4.1 Struktura RF programa

U kodu za RF prikazanom na slici A.7 vidi se da se podacima pristupa na isti način kao i kod neuronske mreže. Preporučena podjela podataka je 30% naprema 70% te su podaci tako podijeljeni. Sljedeći korak je pozivanje *Random forest* algoritma koji se u *pythonu* poziva sa : `from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier` te se određuje koliko će se 'stabala' napraviti. Vrijednosti `max_features = "auto"` i

Poglavlje 4. Lokalizacija onečišćenja strojnim učenjem



Slika 4.3 Struktura random forest algoritma

$random_state = 44$ se u literaturi preporučuju da budu takve kakve su u kodu [A.7](#) [11]. Nakon toga se model trenira i dobije se predikcija izvora onečišćenja.

Poglavlje 5

Rezultati

5.1 Rezultati Monte Carlo simulacije

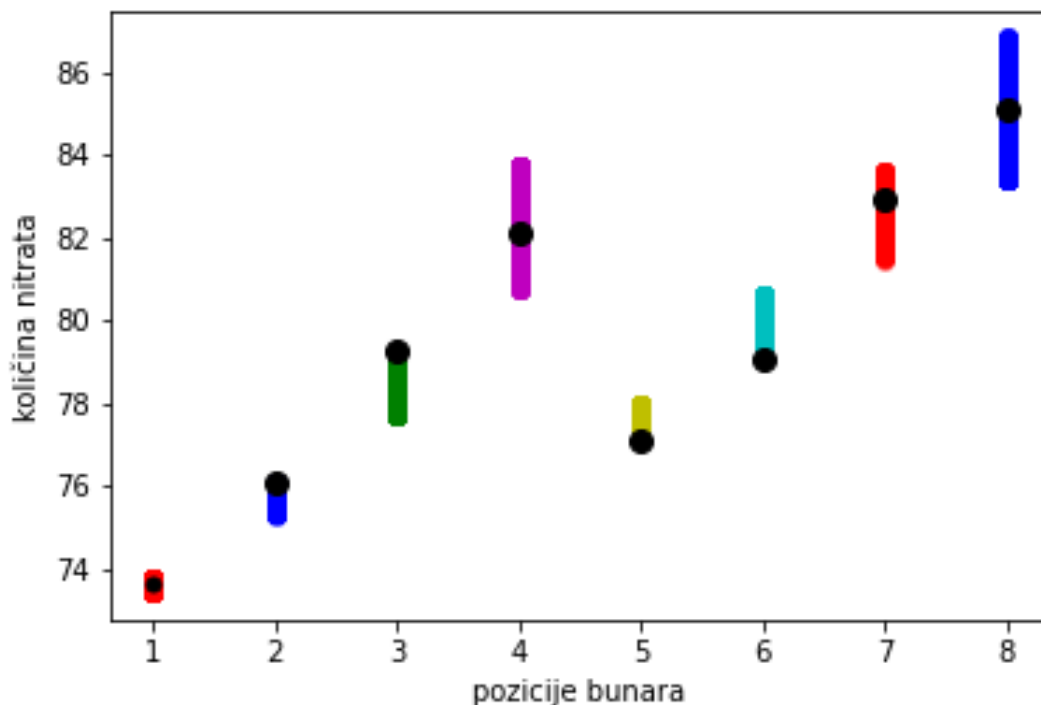
5.1.1 Rezultati za 5% odstupanja od izmjerene vrijednosti

Gdje je pozicija bunara na x -osi a jačina na y -osi i to prema slici [2.3](#):

- 1 - bunar B3
- 2 - bunar B4
- 3 - bunar B5
- 4 - bunar B6
- 5 - bunar B7
- 6 - bunar B8
- 7 - bunar B9
- 8 - bunar B10

Na slici je prikazano crnom točkom izmjerena vrijednost nitrata na svakom bunaru,

Poglavlje 5. Rezultati



Slika 5.1 Jačine nitrata za svaki bunar s odsupanjem od 5 posto

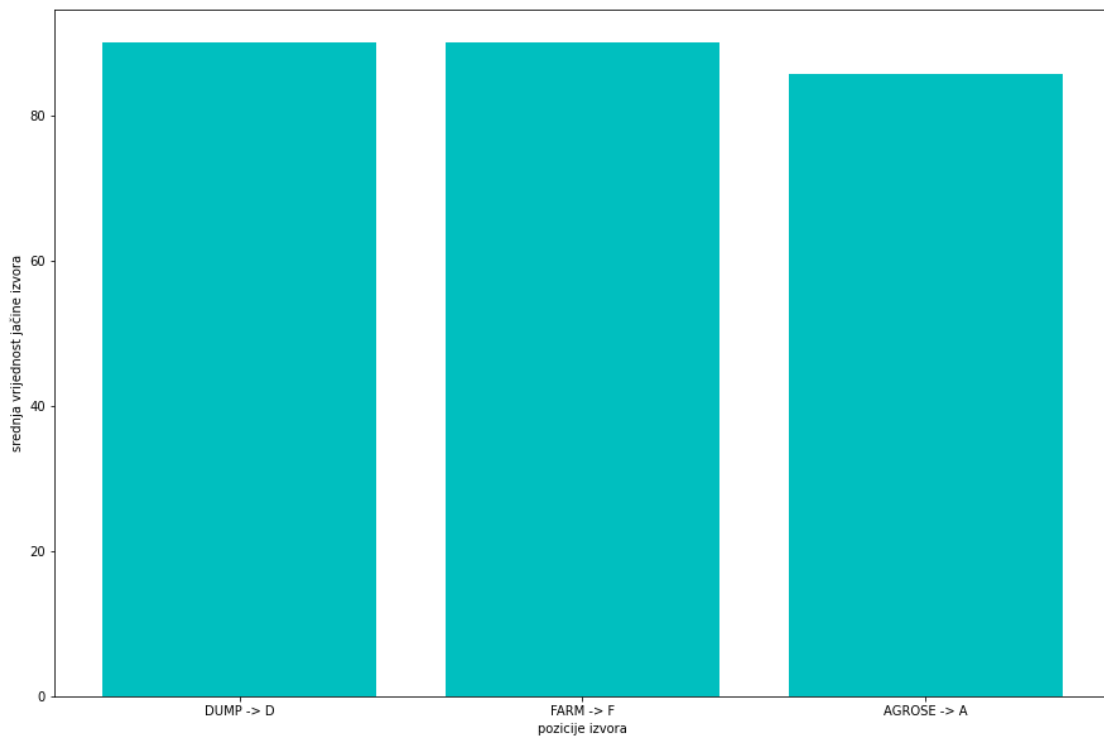
dok su obojenim vrijednostima prikazane vrijednosti dobivene simulacijom, i to samo one koje se nalaze unutar dozvoljenih odstupanja. Kao što se može vidjeti na slici

Tablica 5.1 Rezultati za Monte Carlo

Izvor	Jačina izvora	kratica prema slici 4.1
DUMP	90.0426	D
FARM	90.042	F
AGRoSE	85.764	A

5.2 i u tablici 5.1 u ovom slučaju su nam 2 izvora dominantna i to izvor pod nazivom Farm (F) i izvor pod nazivom Dump (D), što je u skladu s prethodnim istraživanjima provedenim na tom području. Potrebno je smanjiti dozvoljeno odstupanje i vidjeti

Poglavlje 5. Rezultati

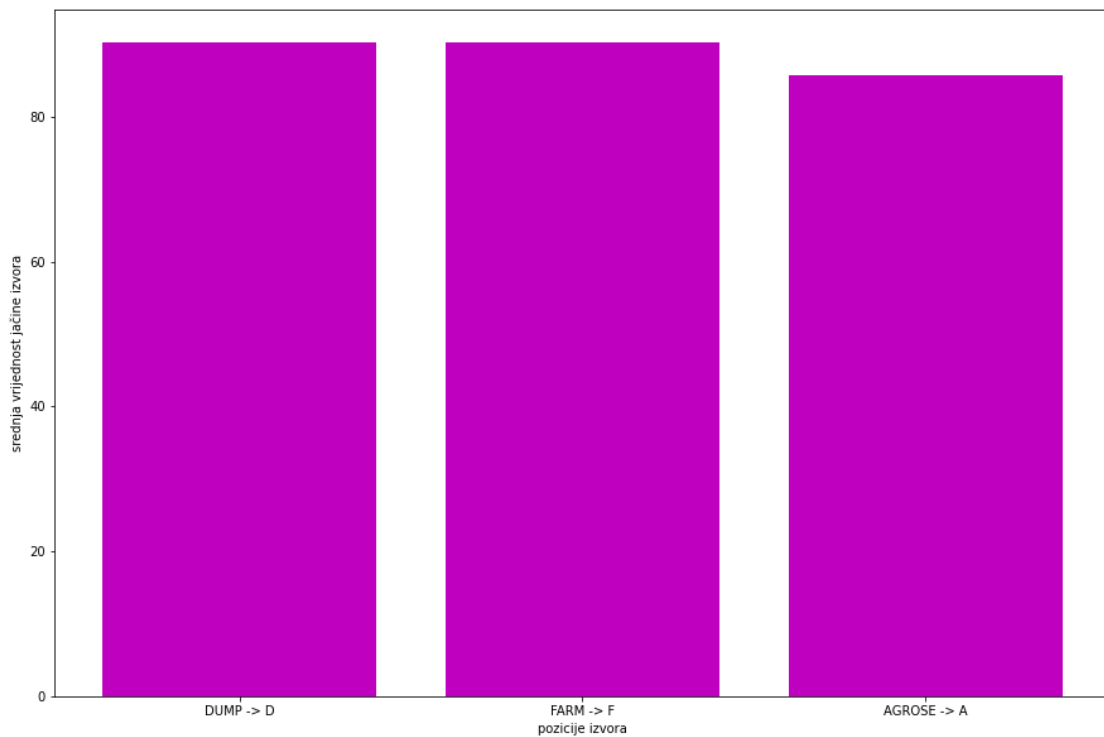


Slika 5.2 Jačina svih izvora za odstupanje od 5%

dali će jedan od ta dva izvora izdominirati.

5.1.2 Rezultati za 3% odstupanja od izmjerene vrijednosti

Poglavlje 5. Rezultati



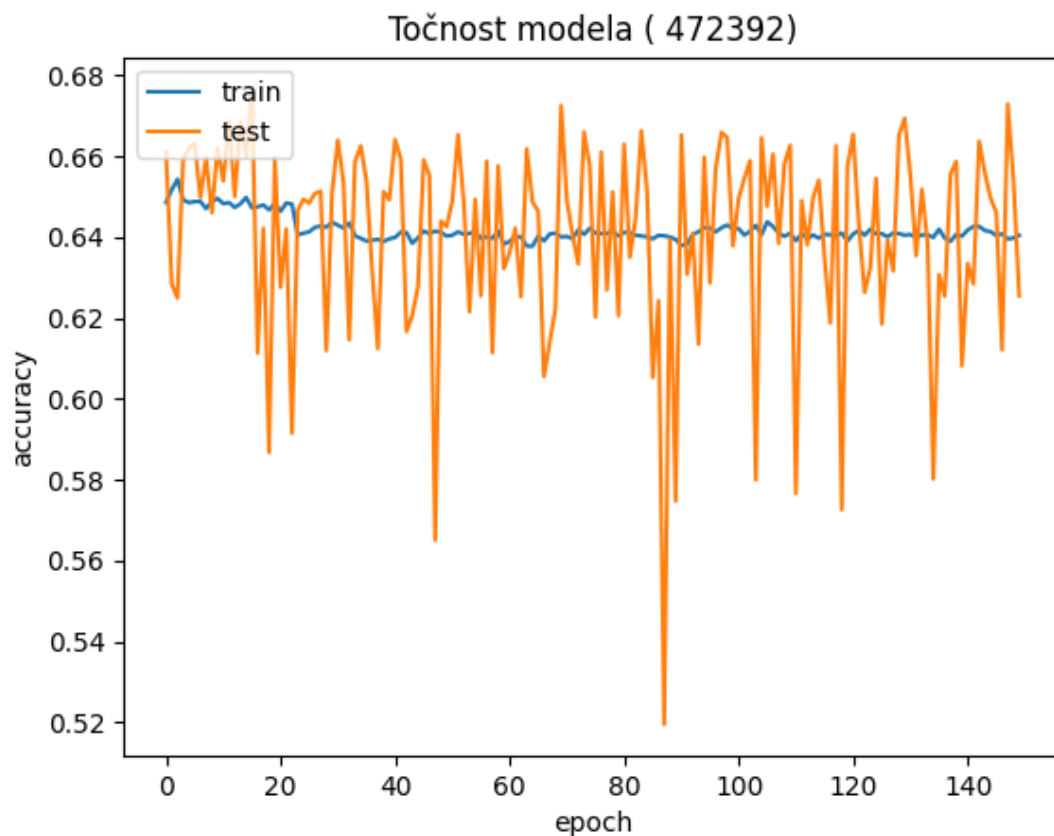
Slika 5.3 Jačina svih izvora za odstupanje od 3%

Tablica 5.2 Rezultati za Monte Carlo

Izvor	Jačina izvora	kratica prema slici 4.1
DUMP	90.18	D
FARM	90.17	F
AGROSE	85.77	A

U tablici 5.2 i na slici 5.3 su pokazane vrijednosti za Monte Carlo simulaciju s odstupanjem podataka od 3% i 6632255 podataka. Sada su opet izvori D i F dominantni, što se podudara sa prethodnim istraživanjima.

5.2 Rezultati za neuronsku mrežu



Slika 5.4 Točnost modela za 472392 podatka

Kao što je vidljivo na slici 5.4 točnost testnih podataka strahovito skaće. Jedno od mogućih objašnjenja za takvo ponašanje je taj da nije uzeto u obzir da se unutar for petlje pojavljuju jednake vrijednosti izvora, *np.max*, koji u *Pythonu* traži maksimalnu vrijednost unutar svakog stupca matrice izvora. odabire poziciju jedne od njih i vrijednosti su u nekim slučajevima manje od konstantnih vrijednosti ostalih izvora (postoje 3 promjenjiva izvora i 7 konstantnih izvora). Da bi se ta teorija provjerila potrebno je naći maksimum u svakom stupcu matrice izvora, te spremiti

Poglavlje 5. Rezultati

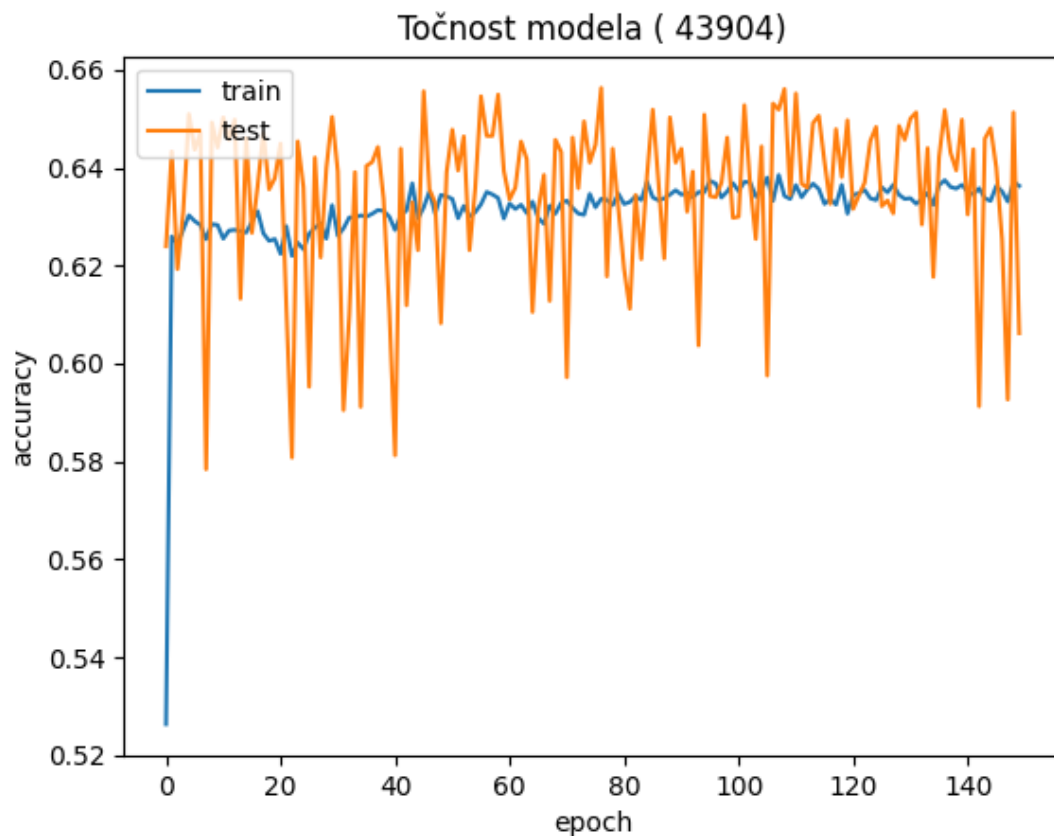
poziciju svih vrijednosti i promjenjivih i nepromjenjivih te vidjeti rezultat. Iako se u tom slučaju neće uzeti u obzir podaci kada su vrijednosti sva tri izvora veća od konstantnog izvora, a međusobno su jednakih vrijednosti, ipak će se dio podataka srediti tako da možda dođe do manjih oscilacija u točnosti podataka za testiranje i podataka za treniranje.

5.2.1 Rezultati neuronske mreže za drugi set podataka

Nakon što se u neuronsku mrežu stavi novi set podatke sa novim vrijednostima, odnosno podatke koje su se skupili kada u obzir dolaze i konstantni izvori nailazi se na isti problem oscilacije podataka to jest točnosti (slike 5.5).

Tablica 5.3 pozicije izvora za Random forest

Izvor	Pozicija izvora
DUMP	0
FARM	1
AGROSE	2



Slika 5.5 Točnost modela

5.3 Rezultati za *Random forest*

Tablica 5.4 Rezultati za Random forest

Broj podataka	Pozicija (broj)	Pozicija na slici 4.1
6 000	2	A
43 904	2	A
473 292	2	A

Kao što je vidljivo u tablici 5.4 za različitu količinu podataka se dobije isti rezultat. Iako se rezultati poklapaju, isto je tako potrebno provjeriti rezultate za podatke koji

Poglavlje 5. Rezultati

su opisani u odlomku Neuralna mreža.

5.3.1 Rezultati za novi set podataka

Kada se radi RF za nove podatke, koji uzimaju u obzir konstantne izvore kod traženja maksimuma dobivam:

Tablica 5.5 Rezultati za Random forest

Broj podataka	Pozicija (broj)	Pozicija na slici 4.1
6 000	2	A
43 904	2	A
473 292	2	A

Te je vidljivo da se rezultati u tablici [5.5](#) i rezultati u tablici [5.4](#) poklapaju, te u ovom slučaju konstantni izvori nemaju neko značenje kod sortiranja podataka.

Poglavlje 6

Zaključak

Voda, kao jedno od najvrijednijih prirodnih bogatstva na našem planetu, zbog sve veće industrijalizacije postaje sve zagađenija. Nitrati, jedan od glavnih zagađivača vode, predstavljaju sve veći problem zagađenja vodocrpilišta.

Ovim radom se korištenjem metoda strojnog učenja, Monte Carlo simulacije, neuronske mreže i *Random forest* (RF) algoritma, ispituje pozicija dominantnog izvora. Cilj rada je ispitati algoritme strojnog učenja i vidjeti koji od njih nam daje očekivani rezultat, odnosno rezultat dobiven prethodnim istraživanjima na istom području, te kako se algoritmi ponašaju s podacima koji su dobiveni pojednostavljenim numeričkim modelom.

U ovom radu je vidljivo da pojednostavljeni problem ne funkcionira dobro sa neuronskom mrežom, RF algoritam daje rezultat koji nije očekivani, to jest ne poklapa se sa rezultatima dobivenim prethodnim istraživanjima [5], a Monte Carlo metoda daje rezultat koji se očekuje. Jedan od glavnih problema pojednostavljenog problema koji koristi samo difuzijsku jednadžbu je taj da postoji velika količina jednako dobrih rezultata, te neuronska mreža i RF imaju problem kod odlučivanja potencijalnog izvora, to jest točnost strahovito pada.

Da bi rezultati bili točniji, bilo bi potrebno uz difuzijsku jednadžbu koristiti i jed-

Poglavlje 6. Zaključak

nadžbe advekcije i disperzije.

Uzevši u obzir prethodna istraživanja [5], može se reći da je Monte Carlo metodom potvrđeno da je glavni zagađivač odlagalište otpada, no nesmije se zanemariti utjecaj preostala dva izvora koji također znatno doprinose zagađenju vodocrpilišta u Varaždinu.

Bibliografija

- [1] Tedeschi, Stanislav (1997) *Zaštita voda*, HDGI, Zagreb
- [2] Metcals and Edfdy (1991.) *Wastewater engineering: treatment, disposal, reuse*
New York
- [3] Margota, Jure (2010) *Vodoopskrba naselja: planiranje, projektiranje, upravljanje, obrada vode*, Građevinsko-arhitektonski fakultet Sveučilišta u Splitu, prvo izdanje, Split
- [4] Dadić, Željko (2001) *Priručnik o temeljnoj kakvoći vode u Hrvatskoj*, Hrvatski zavod za javno zdrastvo, Zepter international, Zagreb
- [5] Štrajbek, Marko (2021) *Modeliranje širenja onečišćenja nitratima u podzemnoj vodi i analiza utjecaja na vodocrpilišta*, doktorska disertacija, Rijeka
- [6] Kranjčević, Lado (2019.) *Mehanika fluida*, Skripta za studente Tehničkog fakulteta Sveučilišta u Rijeci, Rijeka
- [7] Ivić, Stefan; Crnković, Bojan; Škifić, Jerko; Čavrak, Marko (2014.) *Python u računarskom inženjerstvu: numeričke metode, priprema, obrada i vizualizacija podataka*, Skripta za studente Tehničkog fakulteta Sveučilišta u Rijeci, Rijeka
- [8] Limić, Nedžad (2002.) *Monte Carlo simulacije slučajnih veličina, nizova i procesa*, Element, Zagreb

BIBLIOGRAFIJA

- [9] Chakraverty, Snehashish; Mall, Susmita. *Artificial Neural Networks for Engineers and Scientists*, CRC Press, New York
- [10] [Keras modul](#)
- [11] [Random forest classifier](#)

Poglavlje 7

Sažetak

Nitrati u podzemnim vodama su sve veći problem u svijetu, te su prepoznati kao jedan od glavnih onečišćivača podzemnih voda. Zbog sve većeg utjecaja zagađivača na podzemne vode, što za posljedicu ima utjecaj na kvalitetu života ljudi, sve se više pažnje pridaje zaštiti podzemnih voda.

U ovom radu se s ciljem pronalaska najutjecajnijeg izvora, pokušava strojnim učenjem dobiti smisleni rezultat. Istražno područje je vodocrpilište u Varazdinu, ali metode primjenjene u ovom radu mogu se primijeniti i na druga područja.

Na temelju simulacija baziranih na jednadžbi difuzije pokušava se dobiti model koji bi nam ukazao na najutjecajniji izvor zagađenja.

Ključne riječi — podzemna voda, nitrati, strojno učenje, simulacije transporta nitrata

Abstract

Nitrates in groundwater are common in world and they are recognized as one of the main polluters. Because groundwater pollution is more influential on the quality of every day life, protecting water resources is quintessential. With numerical simulations of groundwater flow and machine learning, we are attempting to make a model which will show us the most probable source of pollution. Even though the research is conducted on a case study of nitrate groundwater pollution in Varaždin, Croatia, the methods used in this paper can be generally used.

Key words — groundwaters, nitrates, machine learning, nitrate transport simulation

Poglavlje 7. Sažetak

Dodatak A

Kodovi

A.1 Kod za pokretanje simulacija

```
12 Created on Tue Sep 13 17:39:48 2022
13
14 @author: Ivana
15 """
16
17 import numpy as np
18 import os
19 import shutil
20 import scipy.spatial.distance
21
22
23 cwd = os.getcwd()
24
25 input_2 = np.arange(50,111, step=2)
26 input_8 = np.arange(50,111, step=2)
27 input_10 = np.arange(50,111, step=2)
28 input_wall = np.arange(0,50, step = 40)
29 MC = np.empty(shape=(0, 10))
30
31
32
33
34 for w in input_wall:
35     for i in input_2:
36         for j in input_8:
37             for k in input_10:
38                 #f'{w}_{i}'
39                 #f'{w}'
40                 naziv = str(w) + '_' + str(i) + '_' + str(j) + '_' + str(k)
41                 try:
42                     locals()[str(w) + '_' + str(i) + '_' + str(j) + '_' + str(k)] = np.loadtxt(cwd + '/podaci/' + naziv + '.txt', delimiter=';', skiprows=1)
43                 except OSError:
44                     continue
45                 try:
46                     a = locals()[str(w) + '_' + str(i) + '_' + str(j) + '_' + str(k)]
47                     MC = np.append(MC, np.reshape( locals()[str(w) + '_' + str(i) + '_' + str(j) + '_' + str(k)], (1, 10)), axis = 0)
48                     #trazenjem maksimalne vrijednosti zagađivača i pozicije za NM
49                     locals()[ 'novo_' + str(w) + '_' + str(i) + '_' + str(j) + '_' + str(k) ] = np.array([locals()[str(w) + '_' + str(i) + '_' + str(j) + '_' + str(k)][1],
50                                                         locals()[str(w) + '_' + str(i) + '_' + str(j) + '_' + str(k)][7],
51                                                         locals()[str(w) + '_' + str(i) + '_' + str(j) + '_' + str(k)][9]])
52                     locals()[ 'max'+ str(i) + str(j) + str(k) + str(w) ] = [w, np.max(locals()[ 'novo_' + str(w) + '_' + str(i) + '_' + str(j) + '_' + str(k)]), np.argmax(locals()[ '
53
54                 except OSError:
55                     continue
56
57 try:
58     for w in input_wall:
59         for i in input_2:
60             for j in input_8:
61                 for k in input_10:
62                     naziv = str(w) + '_' + str(i) + '_' + str(j) + '_' + str(k)
63                     locals()[str(w) + '_' + str(i) + '_' + str(j) + '_' + str(k) + '_wall'] = np.loadtxt(cwd + '/podaci/' + naziv + '_walls.txt')
```

Slika A.1 kod za pokretanje (a)

Dodatak A. Kodovi

```
51
52
53         locals()['max'+str(i)+str(j)+str(k)+str(w)] = [w,
54         except OSError :
55             continue
56
57     try:
58         for w in input_wall:
59             for i in input_2:
60                 for j in input_8:
61                     for k in input_10:
62                         naziv = str(w) + '_' + str(i) + '_' + str(j) + '_' + str(k)
63                         locals()[str(w) + '_' + str(i) + '_' + str(j) + '_' + str(k) + 'weII'] = np.loadtxt(cwd + '/podaci/' + naziv + '_walls.txt')
64         except OSError :
65             pass
66
67
68
69
70 #slaganje podataka za NM
71 #Y -- podatak koji neuralna mreža izbacuje-- je pozicija a ne jačina izvora
72 Y = np.empty(shape = (0, 3))
73
74 for w in input_wall:
75
76     for i in input_2:
77         for j in input_8:
78             for k in input_10:
79                 try:
80                     Y = np.append(Y, np.reshape(locals()['max'+str(i)+str(j)+str(k)+str(w)],(1, 3)), axis = 0)
81                 except KeyError:
82                     continue
83
84 X = np.empty(shape = (0,8, 2))
85 for w in input_wall:
86
87     for i in input_2:
88         for j in input_8:
89             for k in input_10:
90                 try:
91                     X = np.append(X, np.reshape(locals()[str(w) + '_' + str(i) + '_' + str(j) + '_' + str(k) + 'weII'],(1, 8, 2)), axis = 0)
92                 except KeyError:
93                     continue
94
95
96 np.savetxt(cwd + '/outY2.txt', Y, fmt="%2.3f", delimiter=",")
97 np.savetxt(cwd + '/outMC2.txt', MC, fmt="%2.3f", delimiter=",")
98
99 np.save('outfile2.npy', X, allow_pickle=True)
100
101
```

Slika A.2 kod za pokretanje (b)

A.2 Kodovi za obradu podataka

Dodatak A. Kodovi

```
3 """
4 Created on Thu Sep 15 16:08:31 2022
5
6 @author: ivana
7 """
8
9 import numpy as np
10 import os
11 import shutil
12
13 Y_izv = np.genfromtxt(fname = 'outMC4.txt', delimiter=",")
14 X_bunar = np.load('outfile4.npy')
15
16 X_izmjereno=np.loadtxt('izmjereno.txt')
17
18 Z= np.empty(shape=(0, 10))
19 A = len(Y_izv)
20 X_var1 = np.empty(shape= (8, 2))
21 X_var2 = np.empty(shape=(8,2))
22 B = np.empty(shape =(8, 0))
23 varB = 0.08
24 #treba vidjeti dali da stavim da mi rjesenje može varirati +- 5 % pa ubaciti u kod s matricama npr
25
26 for i in range(len(X_izmjereno)):
27     locals()['a' + str(i)] = X_izmjereno[i, 1] + varB*X_izmjereno[i, 1]
28     X_var1[:, 0] = X_izmjereno[:, 0]
29     X_var1[i, 1] = locals()['a' + str(i)]
30     locals()['b' + str(i)] = X_izmjereno[i, 1] - varB*X_izmjereno[i, 1]
31     X_var2[:, 0] = X_izmjereno[:, 0]
32     X_var2[i, 1] = locals()['b' + str(i)]
33
34
35 for a in range(A):
36     locals()['X' + str(a) ] = X_bunar[a, :, :]
37     if ((X_var2[0,1]<= locals()['X' + str(a) ][0,1] <= X_var1[0,1]) &
38         (X_var2[1,1]<= locals()['X' + str(a) ][1,1] <= X_var1[1,1]) &
39         (X_var2[2,1]<= locals()['X' + str(a) ][2,1] <= X_var1[2,1]) &
40         (X_var2[3,1]<= locals()['X' + str(a) ][3,1] <= X_var1[3,1]) &
41         (X_var2[4,1]<= locals()['X' + str(a) ][4,1] <= X_var1[4,1]) &
42         (X_var2[5,1]<= locals()['X' + str(a) ][5,1] <= X_var1[5,1]) &
43         (X_var2[6,1]<= locals()['X' + str(a) ][6,1] <= X_var1[6,1]) &
44         (X_var2[7,1]<= locals()['X' + str(a) ][7,1] <= X_var1[7,1]) ):
45         Z = np.append(Z, Y_izv[a, :])
46         B = np.append(B, [locals()['X' + str(a) ][0,1] , locals()['X' + str(a) ][1,1], locals()['X' + str(a) ][2,1],
47             locals()['X' + str(a) ][3,1], locals()['X' + str(a) ][4,1], locals()['X' + str(a) ][5,1],
48             locals()['X' + str(a) ][6,1] , locals()['X' + str(a) ][7,1] ])
49
50
51 np.save('bunar.npy', B, allow_pickle=True)
52 np.save('izvor.npy', Z, allow_pickle=True)
```

Slika A.3 Monte Carlo

Dodatak A. Kodovi

```
8
9 import numpy as np
10 import os
11 import shutil
12 import matplotlib.pyplot as plt
13
14 Bunar = np.load('bunar.npy')
15 Izvor = np.load('izvor.npy')
16 Izmjereno = np.loadtxt('izmjereno.txt')
17 b = int(len(Bunar)/8)
18 B = np.reshape(Bunar, (b, 8))
19
20 i = int(len(Izvor)/10)
21 I = np.reshape(Izvor, (i, 10))
22
23 Y_kor = np.array([1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8])
24 Y = np.empty(shape=( 0))
25
26 for i in range(len(B)):
27     Y = np.append(Y, Y_kor)
28
29 Y1 = np.reshape(Y, (b, 8))
30 plt.figure()
31 plt.plot(Y1[:, 0], B[:, 0], 'ro', alpha=0.2)
32 plt.plot(Y_kor[0], Izmjereno[0,1], 'ko', markersize=10)
33
34 plt.plot(Y1[:, 1], B[:, 1], 'bo', alpha=0.2)
35 plt.plot(Y_kor[1], Izmjereno[1,1], 'ko', markersize=10)
36
37 plt.plot(Y1[:, 2], B[:, 2], 'go', alpha=0.2)
38 plt.plot(Y_kor[2], Izmjereno[2,1], 'ko', markersize=10)
39
40 plt.plot(Y1[:, 3], B[:, 3], 'ro', alpha=0.2)
41 plt.plot(Y_kor[3], Izmjereno[3,1], 'ko', markersize=10)
42
43
44 plt.plot(Y1[:, 4], B[:, 4], 'ro', alpha=0.2)
45 plt.plot(Y_kor[4], Izmjereno[4,1], 'ko', markersize=10)
46
47 plt.plot(Y1[:, 5], B[:, 5], 'bo', alpha=0.2)
48 plt.plot(Y_kor[5], Izmjereno[5,1], 'ko', markersize=10)
49
50 plt.plot(Y1[:, 6], B[:, 6], 'go', alpha=0.2)
51 plt.plot(Y_kor[6], Izmjereno[6,1], 'ko', markersize=10)
52
53 plt.plot(Y1[:, 7], B[:, 7], 'ro', alpha=0.2)
54 plt.plot(Y_kor[7], Izmjereno[7,1], 'ko', markersize=10)
55
```

Slika A.4 Monte Carlo - vizualizacija

```
6 @author: ivana
7 ***
8
9 import numpy as np
10 import os
11 import shutil
12 from keras.models import Sequential
13 from keras.layers import Input, Dense
14 from keras.models import load_model
15 from tensorflow import keras
16 from keras.utils.vis_utils import plot_model
17 from keras.layers import Dropout
18 from matplotlib import pyplot as plt
19
20
21
22 from sklearn.model_selection import train_test_split
23
24 Y_out = np.genfromtxt(fname = 'outY2.txt', delimiter=',')
25 X_in = np.load('outfile2.npy')
26
27 X_izmjereno=np.loadtxt('izmjereno.txt')
28
29 Y_poz = Y_out[:, 2]
30 B3 = X_in[:, 0, 1]
31 B4 = X_in[:, 1, 1]
32 B5 = X_in[:, 2, 1]
33 B6 = X_in[:, 3, 1]
34 B7 = X_in[:, 4, 1]
35 B8 = X_in[:, 5, 1]
36 B9 = X_in[:, 6, 1]
37 B10 = X_in[:, 7, 1]
38
39 Xul = np.array([B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10]).T
40
41 X,X_test,Y,Y_test=train_test_split(Xul,Y_poz,test_size=0.2)
42
43 from tensorflow.keras import layers
44 inputs = keras.Input(shape=(8,), name="digits")
45 x = layers.Dense(64, activation="relu", name="dense 1")(inputs)
46 x = layers.Dense(64, activation="relu", name="dense 2")(x)
47 outputs = layers.Dense(10, activation="softmax", name="predictions")(x)
48
49 model = keras.Model(inputs=inputs, outputs=outputs)
50 model.compile(
51     loss=keras.Losses.SparseCategoricalCrossentropy(from_logits=True),
52     optimizer=keras.optimizers.RMSprop(),
53     metrics=["accuracy"],
54 )
55
```

Slika A.5 ANN (a)

Dodatak A. Kodovi

```
56
57 model.compile(
58     optimizer=keras.optimizers.RMSprop(), # Optimizer
59     # Loss function to minimize
60     loss=keras.losses.SparseCategoricalCrossentropy(),
61     # list of metrics to monitor
62     metrics=[keras.metrics.SparseCategoricalAccuracy()],
63 )
64 history = model.fit(X, Y,
65     batch_size=12,
66     epochs=150,
67     verbose=0,
68     validation_data=(X_test, Y_test))
69
70
71 #history = model.fit(X, Y, epochs=150, batch_size=10, verbose=0, validation_data=(X_test, Y_test))
72 # list all data in history
73 print(history.history.keys())
74 # summarize history for accuracy
75 plt.plot(history.history['sparse_categorical_accuracy'])
76 plt.plot(history.history['val_sparse_categorical_accuracy'])
77 plt.title(f'Točnost modela ( {len(Y_out)})')
78 plt.ylabel('accuracy')
79 plt.xlabel('epoch')
80 plt.legend(['train', 'test'], loc='upper left')
81 plt.savefig('s11.png')
82 # summarize history for loss
83 plt.plot(history.history['loss'])
84 plt.plot(history.history['val_loss'])
85 plt.title(f'Gubitci modela ( {len(Y_out)})')
86 plt.ylabel('loss')
87 plt.xlabel('epoch')
88 plt.legend(['train', 'test'], loc='upper left')
89 plt.savefig('s12.png')
90
91 testscore = model.evaluate(X_test, Y_test)
92 print(f'Točnost modela: {testscore[1]:.0%}')
93 model.save('dipl2.h5')
94
```

Slika A.6 ANN (b) - nastavak koda

```
3 ***
4 Created on Thu Sep 15 16:11:46 2022
5
6 @author: ivana
7 ***
8
9 import pandas as pd
10 import numpy as np
11 import os
12 import shutil
13 from keras.models import Sequential
14 from keras.layers import Input, Dense
15 from keras.models import load_model
16 from tensorflow import keras
17 from keras.utils.vis_utils import plot_model
18 from keras.layers import Dropout
19 from matplotlib import pyplot as plt
20
21 from sklearn.model_selection import train_test_split
22
23 Y_out = np.genfromtxt(fname = 'outY.txt', delimiter=',')
24 X_in = np.load('outfile.npy')
25
26 Y_poz = Y_out[:, 2]
27 B3 = X_in[:, 0, 1]
28 B4 = X_in[:, 1, 1]
29 B5 = X_in[:, 2, 1]
30 B6 = X_in[:, 3, 1]
31 B7 = X_in[:, 4, 1]
32 B8 = X_in[:, 5, 1]
33 B9 = X_in[:, 6, 1]
34 B10 = X_in[:, 7, 1]
35
36 Xul = np.array([B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10]).T
37
38 X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(Xul, Y_poz, test_size=0.3, random_state=44)
39 from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
40 rf_model = RandomForestClassifier(n_estimators=70, max_features="auto", random_state=44)
41 rf_model.fit(X_train, y_train)
42
43 predictions = rf_model.predict(X_test)
44 predictions
45
46 rf_model.predict_proba(X_test)
47
48 X_izmjereni=np.loadtxt('izmjereno.txt')
49
50
51 TR = X_izmjereni[:, 1]
52 Tr = np.reshape(TR, (1, -1))
53
54
55 predictions2 = rf_model.predict(Tr)
56 np.savetxt('rj.txt', predictions2)
```

Slika A.7 RF