

Miskolci Egyetem  
Műszaki Földtudományi Kar  
Hidrogeológiai – Mérnökgeológiai Intézeti Tanszék

**Általános alakú adszorpciós izotermák hatása a szennyezőanyagok  
migrációjára**

**OTDK dolgozat**

Készítette: Ilyés Csaba  
Hidrogeológus mérnök MSc

Konzulensek:

Dr. Kovács Balázs  
intézetigazgató egyetemi docens  
Környezetgazdálkodási Intézet  
Hidrogeológiai – Mérnökgeológiai Intézet Tanszék

Fekete Zsombor  
doktorandusz  
Környezetgazdálkodási Intézet  
Hidrogeológiai – Mérnökgeológiai Intézeti Tanszék

2013. november 4.

## Eredetiségi nyilatkozat

Eredetiségi nyilatkozat

*"Alulírott Ilyés Csaba, a Miskolci Egyetem Műszaki Földtudományi Karának hallgatója büntetőjogi és fegyelmi felelősségem tudatában kijelentem és aláírással igazolom, hogy ezt a dolgozatot saját magam készítettem, a benne leírt vizsgálatokat – ha ezt külön nem jelzem – magam végeztem el, és az ismertetett eredményeket magam értem el. Adatokat, információkat csak az irodalomjegyzékben felsorolt forrásokból használtam fel. Minden olyan részt, melyet szó szerint, vagy azonos értelemben, de átfogalmazva más forrásból átvettem, egyértelműen, a forrás megadásával megjelöltem."*

Miskolc, 2013. november 4.

.....  
a hallgató aláírása

---

## A konzulens nyilatkozata

Konzulensi nyilatkozat

*„Alulírott Dr. Kovács Balázs, a Miskolci Egyetem Műszaki Földtudományi Kar Környezetgazdálkodási Intézetének intézetigazgatója, illetve Fekete Zsombor, a Miskolci Egyetem Műszaki Földtudományi Kar Környezetgazdálkodási Intézetének doktorandusza a TDK dolgozatot beadásra alkalmasnak ítélem.”*

Egyéb megjegyzések, ajánlás:

Miskolc, 2013. november 4.

.....  
konzulensek aláírása

.....  
konzulensek aláírása

## Tartalomjegyzék

|                                              |    |
|----------------------------------------------|----|
| 1. Bevezetés                                 | 3  |
| 2. Szennyezőanyagok terjedése                | 4  |
| 3. Adszorpció                                | 6  |
| 4. Általános alakú izotermák                 | 9  |
| 5. MT3DMS                                    | 12 |
| 6. Számítógépes modellvizsgálatok            | 15 |
| 6.1 Konstans kezdeti koncentráció            | 17 |
| 6.2 Lineárisan csökkenő kezdeti koncentráció | 19 |
| 6.3 Sinusgörbe alakú kezdeti koncentráció    | 21 |
| 6.4 Haranggörbe alakú kezdeti koncentráció   | 24 |
| 7. Eredmények összefoglalása                 | 27 |
| Irodalomjegyzék                              | 28 |
| Ábrák és táblázatok jegyzéke                 | 30 |
| 1. Függelék                                  | 32 |
| 2. Függelék                                  | 33 |

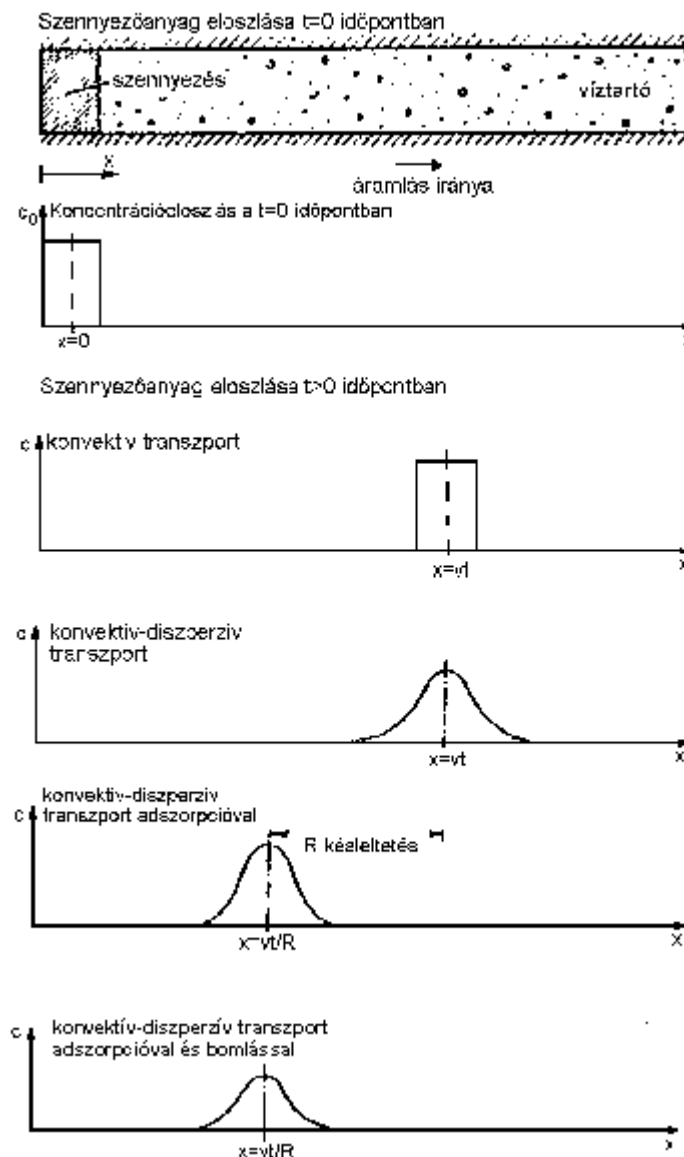
## 1. Bevezetés

Dolgozatomban az általános alakú adszorpciós izotermákkal foglalkozom, mivel a szennyezőanyagok talajokban történő terjedését a talajszemcsék felületén bekövetkező adszorpció erősen befolyásolja. Az oldott és megkötött anyagok/fázisok kölcsönhatásának jellegét szorpciós izotermákkal írjuk le. Az elmúlt időszak kutatásai, elsősorban a növényvédőszer transzportja tekintetében bebizonyították, hogy a szorpciós folyamatokat sok esetben nem egyszerű, azaz lineáris, exponenciális vagy logaritmikus szorpciós izotermák jellemzik, hanem azok ezeknél sokkal bonyolultabb függvényekkel írhatók le. A dolgozatban egy – a tanszéken kifejlesztett – új MT3DMS szoftverkiegészítéssel általános formájú szorpciós izotermák alkalmazásának lehetőségeit vizsgálom.

A dolgozat első részében bemutatom röviden a téma elméleti háttérét, a szennyezőanyagok terjedésének elméletét, különös tekintettel az adszorpció folyamatára, majd a második fejezetben az MT3DMS modell elméleti háttérét, alapegyenletét és alkalmazhatóságát mutatom be, ezek után különböző kezdeti koncentrációk viselkedését vizsgálom számítógépes modellek készítésével és futtatásával. Dolgozatomban az MS Excel, ModelMuse és OriginPro szoftvereket használom.

## 2. Szennyezőanyagok terjedése

A hidrológiai körfolyamatokon keresztül nemcsak a víz közvetítődik egyik rezervoárból a másik felé, hanem a vizes oldatban zajló anyagtranszport – beleértve a szennyezőanyagokat – is ezen a folyamaton keresztül történik. Tehát a felszíni és felszín alatti vizek mind a természetes mind a mesterséges források által kibocsátott és oldatba került anyagok fő szállítója. [Mádlné és Tóth, 2003]



1. sz. ábra: Transzportfolyamatok jellegzetes elemei [Kinzelbach, 1986]

Egy szennyező terjedésében az alábbi folyamatok játszhatnak szerepet:

#### *Advekcio*

A vízben oldható szennyezőanyagok mozgását két alapvető folyamat határozza meg, ezek közül az egyik az advekcio, amely a fizikailag vagy kémiailag oldott anyagok pórusokban való tömeges áramlását jelenti. Az advekcio egyszerű anyagtranszport, melynek során az anyag az őt szállító anyaggal együtt, annak áramlásával együtt mozog. A szállítás iránya és sebessége megegyezik a felszín alatti víz áramlásával.

#### *Hidrodinamikai diszperzio*

A diszperzio a szennyezőanyagok terjedésének másik alapvető folyamata, térbeli szóródást jelent, aminek két hajtóereje lehetséges. A szóródást kémiai illetve fizikai folyamatok okozhatják.

- Diffúzió: A keveredésnek azon folyamata, mely a pórustérben kialakult koncentráció különbségek hajtanak. Diffúzió akkor fordul elő, ha az áramlás hidraulikus gradiens által hajtott, és a pórusvíz statikus. A diffúzió a felszín alatti vizek rendszerében nagyon lassú folyamat.
- Diszperzio: Porózus közegben előforduló mechanikai keveredési folyamat, amit a pórustérben mozgó fluidumok idéznek elő, a szivárgási sebesség lokális eltérései vezérlik a folyamatot. [Kovács, 2004]

#### *Források és nyelők*

A szennyezőanyagok mozgásánál fontos figyelembe venni az adott anyag forrását, ami mind térben (pontoszerű vagy kiterjedt), mind időben (folyamatos, időszakos) többféle lehet. A koncentráció és a hozam jellemzi a forrásokat és nyelőket, ez lehet mind pozitív, mind negatív, attól függően, hogy elvétel vagy hozzáadás történik az adott ponton.

#### *Kémiai reakciók*

Szennyezőanyag mennyiségének időbeli csökkenése. Ezt kémiai és biológiai folyamatok befolyásolják. Ilyen folyamatok a kémiai bomlás, radioaktív bomlás, és felületi adszorpcio. Ezen folyamatok sebességét a szennyező fizikai-kémiai tulajdonságai, a pH, a hőmérséklet, és a talaj nedvességtartalma befolyásolja. [S. Tombor, 2013]

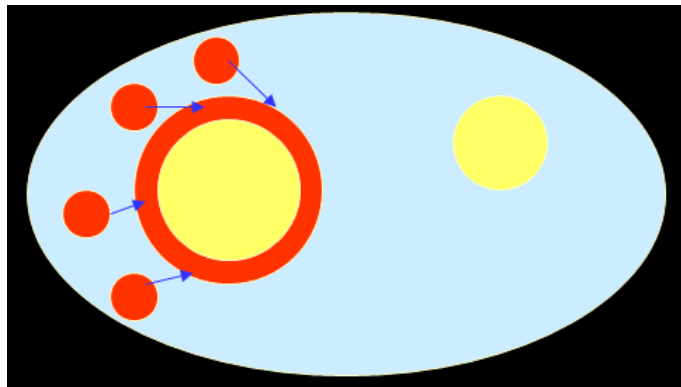
A dolgozat további részében az adszorpcio jelenségével foglalkozom részletesebben.

### 3. Adszorpció

Az adszorpció a szennyezőanyag porózus közeg felületén történő reverzibilis megkötődését jelenti. Ez a modellezés során úgy viselkedik, mint egy állandó forrás, vagy nyelő, attól függően, hogy adszorpció vagy deszorpció az uralkodó kémiai folyamat.

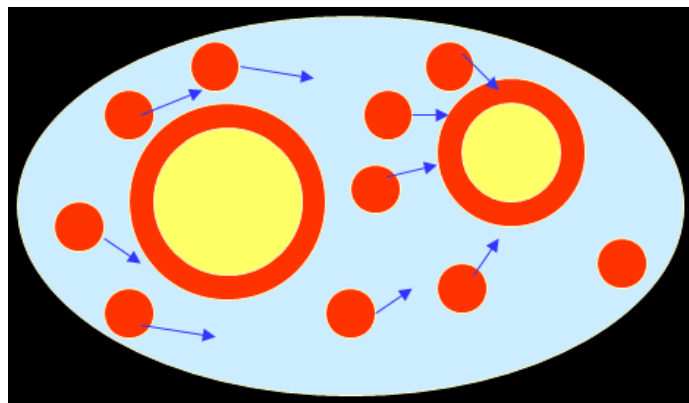
Az adszorpció folyamata:

1. lépés: Megkötődés a szilárd váz felületén. Amíg az egyensúly ki nem alakult, a szennyezőanyag nem terjed tovább.



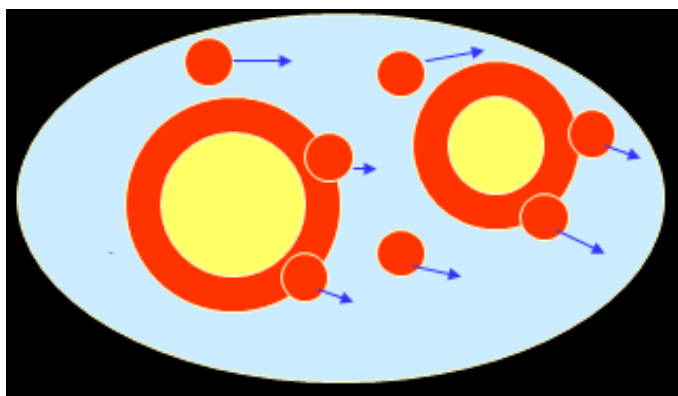
**2. sz. ábra:** Megkötődés a szilárd váz felületén [S. Tombor, 2013]

2. lépés: Ha az adszorpciós kapacitás feltöltődött, akkor a szennyezőanyag továbbterjed.



**3 sz. ábra:** A szennyezőanyag tovább terjedése [S. Tombor, 2013]

3. lépés: Miután újra telítette a szorpciós kapacitást, a szennyezőanyag továbbterjed.



**4. sz. ábra:** A szennyezőanyag terjedése, II [S. Tombor, 2013]

Amennyiben a pórusban lévő folyadék hígabb, mint az adszorbeált koncentráció, úgy deszorpció vagy beoldódás jön létre, amikor a már adszorbeált anyag újra mozgásba kerül. [S. Tombor, 2013]

Az adszorpció és deszorpció egyensúlyát az alábbi matematikai egyenlőség írja le:

$$\theta dV \frac{\partial C}{\partial t} = -\rho_b \cdot dV \frac{\partial \bar{C}}{\partial t}$$

ahol  $C$  a pórusfolyadék koncentrációja  $[M/L^3]$ ,  $c$  a szennyezőanyag koncentrációja a talajban  $[M/M_{\text{száraz talaj}}]$ ,  $\rho_b$  a porózus közeg testsűrűsége  $[M/L^3]$ ,  $\theta$  a térfogatszázalékban kifejezett víztartalom [-], és  $V$  a teljes vizsgált térfogat.

Ha a fenti kémiai egyensúly létrejött, akkor a megkötött koncentráció számítható:

$$\bar{C} = K_d C$$

ahol  $K_d$  az egyensúlyi folyamat megoszlási együtthatója. Ebből látható, hogy a pórusfolyadékbeli koncentráció és a talajbeli szennyezőanyag koncentráció között összefüggés van. Ezt az összefüggést leíró függvény azonban hőmérsékletfüggő, így annak érdekében, hogy ezt a függést kizárják, a pórusfolyadék és adszorptívum koncentrációja közötti összefüggést állandó hőmérsékleten veszik fel, ezért nevezik a függvényt szorpciós izotermának.

Többféle szorpciós izotermákat különböztethetünk meg. Ha lineárisnak feltételezzük a kapcsolatot az adszorbeált anyag mennyisége és a pórusfolyadék egyensúlyi koncentrációja között, akkor lineáris (*Henry-féle szorpció*s) izotermáról beszélünk. Ekkor a

$K_d$  együtthatót konstansnak vesszük. A gyakorlatban azonban az esetek túlnyomó részében ez a feltétel nem teljesül, a pórusfolyadék koncentrációja és a megkötött anyagmennyiség között nem lineáris a kapcsolat. A két leggyakrabban alkalmazott függvény, az Irving Langmuir által 1916-ban, illetve az empirikus úton 1909-ben meghatározott Freundlich izoterma.

A *Langmuir izoterma* esetében figyelembe vesszük, hogy a megkötő felület véges, és ezen meghatározott mennyiségű szorpcióra alkalmas belépési pont található, ezért a megkötődő anyagmennyiség egy  $C_{max}$  telítési határértékhez hiperbolikusan közelít:

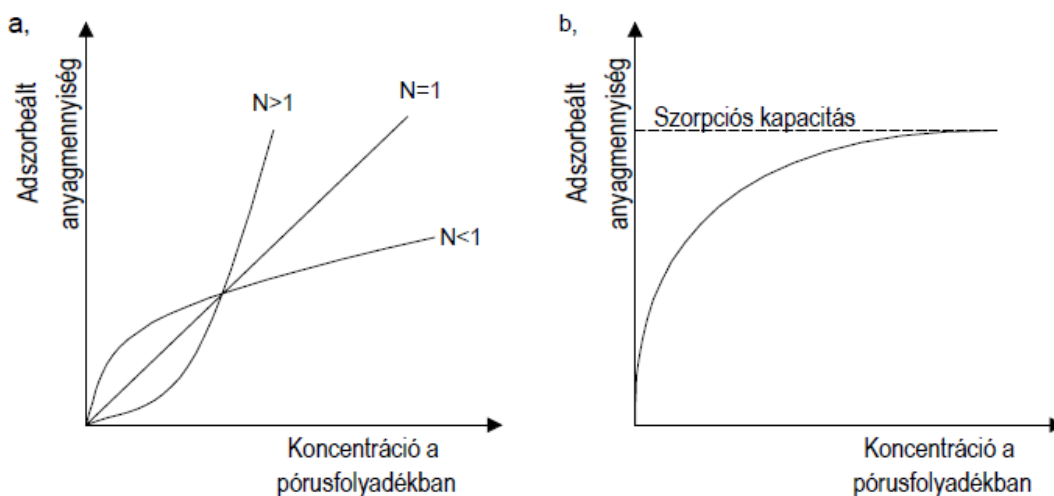
$$\bar{C} = \bar{C}_{max} \cdot \frac{KC}{1 + KC}$$

ahol  $K$  állandó. A Langmuir izoterma akkor alkalmazható jól, ha elhanyagoljuk a deszorbeált anyag koncentrációváltozását. Ekkor adott számú felületi megkötésre alkalmas hely létezik a rendszerben, ami a koncentráció növelésével exponenciálisan csökkenni fog.

A *Freundlich izoterma* esetén az emelkedő koncentrációval exponenciálisan növekszik a megkötődő anyagmennyiség:

$$\bar{C} = A + KC^N$$

ahol  $K$  a koncentrációtól függően változó megoszlási együttható, és  $A$  és  $N$  Freundlich állandók. Mivel az izoterma határértékhez nem tart és folyamatosan emelkedik, jól alkalmazható, ha uralkodóan ioncserélődési folyamatot akarunk leírni. [Kovács, 2004]

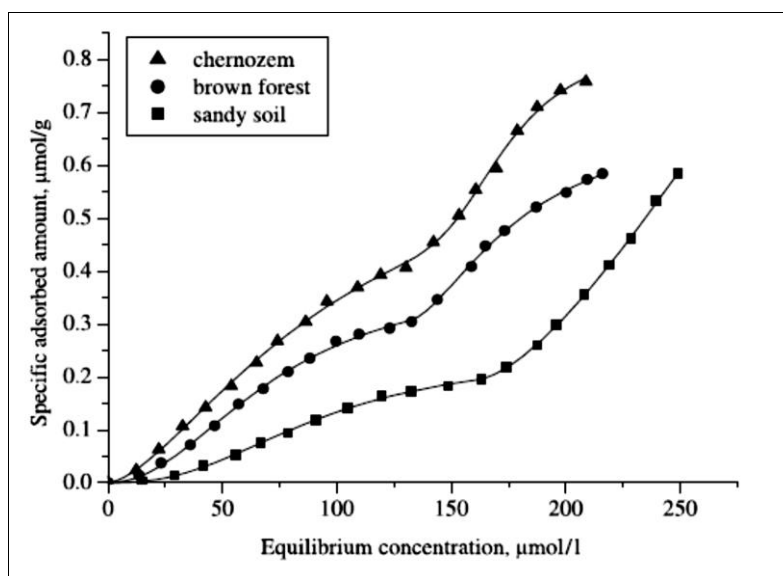


**5. sz. ábra:** Freundlich (a) és Langmuir (b) izoterma alakja [Kovács, 2004]

## 4. Általános alakú izotermák

A fentebb ismertetett izotermák általánosan alkalmazhatók, de mindegyik rendelkezik korlátokkal, így érdemes empirikus úton meghatározni általános alakú izotermákat. Az ezeket leíró függvények jobban illeszthetők az adott adatokra, így modellezésnél kevesebb hibával lehet az adszorpció jelenségét figyelembe venni a szennyezőanyag terjedésének vizsgálatakor.

Ilyen általános alakú izotermát hoztak létre kísérlet alapján, amikor a propizoklór viselkedését vizsgálták különféle talajokban (csernozjom, barna erdőtalaj, homokos talaj), és az alábbi adatokat kapták az adszorpció vizsgálatakor:



**6. sz. ábra:** Adszorpciós izotermák a propizoklór vizsgálatakor [Czinkota et al, 2002]

A fenti ábrán látszik, hogy az izotermák két lépcsőből állnak, tehát egyik korábban ismertetett izotermával sem lehet jól jellemezni. Az adatokra illesztett görbe alapján az alábbi matematikai összefüggést [Czinkota et al, 2002] kapták:

$$q = \sum_{i=1}^S \left\{ \frac{q_{Ti} K_i (c - b_i + |c - b_i|)^{n_i}}{2^{n_i} + K_i (c - b_i + |c - b_i|)^{n_i}} \right\}$$

ahol  $s$  a lépcsők száma,  $b$  a határkoncentráció,  $q_{Ti}$ : adszorpciós kapacitás,  $K_i$ : konstans.

A kapott empirikus képlet alkalmazhatóságának vizsgálatát is elvégezték. A modell paramétereit nemlineáris regresszió szekvenciális simplex optimalizálásával határozták

meg. A számításokat Excelben végezték Visual Basic programozással az alábbi Langmuir függvényvel:

$$q = \frac{Akc}{1 + kc}$$

A „c” (koncentráció)-, „q” (adszorbeált mennyiség) párokhoz tartozó „A” és „k” értékeket a legkisebb négyzetek módszerével határozták meg.

$$SS_r = \sum (q_{i,observed} - q_{i,calc})^2$$

A megfigyelt és a számított adatok közötti távolság négyzetét minimalizálták az adott intervallumon, azaz a legkisebb négyzetek módszerével becsülték a regressziót. [Tolner, 2008]

Egy másik kísérletben azt vizsgálták, hogy a szerves peszticidek hogyan viselkednek talajban, és esetükben milyen az adszorpció mechanizmusa.[Konda et al, 2002]

Laboratóriumi vizsgálatok alapján a mezőgazdaságban leggyakrabban előforduló vegyszerek (acetoklór, atrazin, diazinon, karbendazim, imidakloprid és izoproturon) viselkedését vizsgálták izoterm ( $20 \pm 1^\circ\text{C}$ ) környezetben.

Az eredmények értékelésekor az acetoklór és karbendazim adszorpciós izotermája jól illeszkedett a Langmuir által megadottra, míg a többi anyag esetében egy lépcsőzetesen emelkedő függvény illeszthető a kapott adatokra.

Így felírható a Langmuir izoterma azzal a feltételezéssel, hogy energetikailag heterogén adszorpciós helyek vannak a talajban, és potencionális kölcsönhatások az adszorbeált molekulák közt:

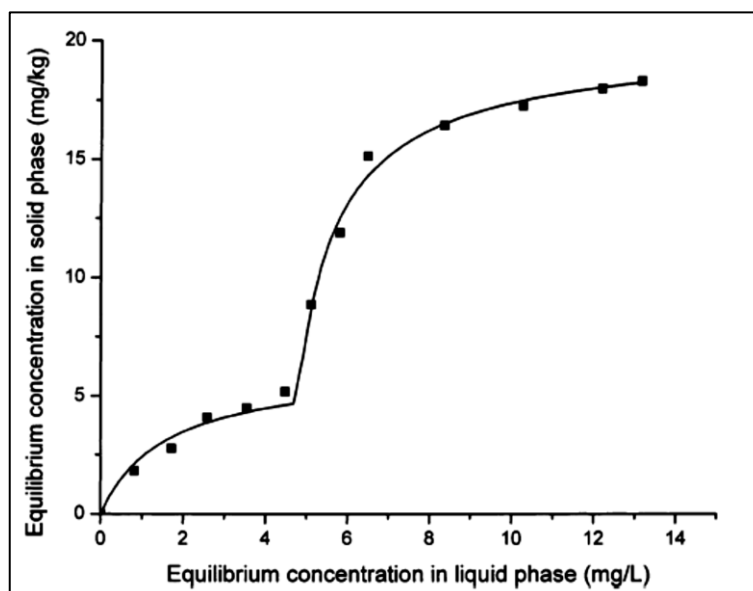
$$q = \frac{akc}{1 + kc}$$

ahol  $q$  az adszorbeált mennyiség (mg/kg),  $c$  a szennyezőanyag koncentráció az oldatban (mg/l),  $a$  jellemzi az adszorpciós kapacitást (mg/kg),  $k$  az adszorpciós konstans ( $\text{mg}^{-1}$ ). továbbá bevezethető egy határkoncentráció, amely felett új adszorpciós mechanizmus lép életbe. Határkoncentráció bevezetése esetén az egyenletet módosítani kell, amely az elvégzett átalakítások után így alakul bármelyik  $i$ -edik lépcsőre:

$$q_i = \frac{a_i k_i [(c - b_i) + abs(c - b_i)]}{2 + k_i [(c - b_i) + abs(c - b_i)]}$$

ahol  $b$  a határkoncentráció értéke (mg/l). A lépések kiszámításánál azt feltételezzük, hogy a teljes adszorpciós kapacitás az összege a különböző lépcsők adszorpciós kapacitásának. mivel a  $b_1$ -t, az első lépcső határkoncentrációját 0-nak vesszük, egy kétlépcsős izoterma az alábbi függvénnyel írható le [Konda et al, 2002]:

$$q = \frac{a_1 k_1 c}{1 + k_1 c} + \frac{a_2 k_2 [(c - b_2) + abs(c - b_2)]}{2 + k_2 [(c - b_2) + abs(c - b_2)]}$$



**7. sz. ábra:** Kétlépcsős izoterma az atrazin esetében [Konda et al, 2002]

A kutatás során az itt megadott képlet szerinti számítógépes modellezést vizsgálok különböző kezdeti koncentrációkat feltételezve.

## 5. MT3DMS

A szennyezőanyagok terjedésének modellezésére az USGS (United States Geological Survey) által kifejlesztett MT3DMS (Modular 3-Dimensional Transport Multi Species) transzport modell áll rendelkezésre, ami a korábbi MT3D modellhez képest többkomponensű transzportszámításokra is alkalmas [Wang-Zheng, 1999]. Az MT3DMS modellben lehetőség van a számítás módját is megválasztani, véges differencia, vagy a karakterisztika módszerének több változata áll rendelkezésre [Kovács-Szanyi, 2006].

A felépített modell az alábbi alapegyenlettel dolgozik:

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i C) + q_s C_s + \sum R_n$$

ahol:

|            |                                                |
|------------|------------------------------------------------|
| $\theta$   | = porozitás                                    |
| $C^k$      | = oldott koncentráció                          |
| $t$        | = idő                                          |
| $x_{ij}$   | = adott távolságok                             |
| $D_{ij}$   | = hidrodinamikus diszperziós együttható tenzor |
| $v_i$      | = Darcy-féle sebesség                          |
| $q_s$      | = fajlagos hozamok források és nyelők esetében |
| $C_s$      | = koncentráció forrás és nyelő esetében        |
| $\sum R_n$ | = kémiai reakciók                              |

Az MT3DMS modell az advekciót, diszperziót, kémiai reakciókat és forrásokat/nyelőket veszi figyelembe. A transzport egyenlet advekció-része a sebességet a talajvíz terjedésének sebességével teszi egyenlővé, továbbá az advekció mértékének a diszperzió mértékéhez hasonlított értékét, a Peclet-számot számítja ki. Amennyiben a szám nagy, úgy az advekció a domináns, míg ha a szám kicsi, akkor a diszperzió-diffúzió mértéke a nagyobb [Kovács, 1998]. A diszperzió mértékét az átlagos sebességvektorok, és a diszperzivitás felhasználásával számítja ki, mivel a diffúzió csak nagyon kicsi sebességeknél mérvadó, ez elhanyagolható nagyobb méretek esetén. A forrásokat és nyelőket a hozammal és

koncentrációval jellemzi, a kémiai reakcióknál a bomlást és a lineáris – nem lineáris adszorpciót képes modellezni. Az MT3DMS adszorpciós csomagjában a fentebb ismertetett három izoterma megtalálható [Wang-Zheng, 1999].

Processing Modflow környezetben a számítások elvégzéséhez szükséges a talaj száraz térfogatsúlyának megadása, lineáris esetben a  $K_d$  konstans értékét, Freundlich izoterma esetén a  $K_f$  és  $a$  értékeket, Langmuir esetben a  $C_{max}$  maximális szorpciós kapacitást és a  $K$  állandót [Kovács-Szanyi, 2005].

Ehhez az MT3DMS modellcsomaghoz fejlesztettek ki a tanszéken egy kiegészítést, hogy az általános alakú izotermát is tudja alkalmazni. A kifejlesztett kiegészítéshez, az általános alakú izoterma használatához az alábbi módosításokat kell elvégezni az MT3DMS és Modflow fájlok között:

1. Az MT3DMS name fájljában, ahol a program felsorolja a különböző csomagokat és adatokat tartalmazó fájlokat, be kell vezetni a .gsi fájlt.

GSI 80 (*gsi file neve*).gsi

2. A .rct kiterjesztésű fájlban, ahol a reakciókat kezeli a program, az alapbeállítás 1-6-ig tartalmazza az izotermákat. Itt ezt át kell írni, hogy a 7-es új, általános alakú izotermát használja, továbbá a gsi csak az SP1 és SP2 szorpciós paraméterek közül csak az elsőt használja.

3. Létre kell hozni a .gsi állományt, az alábbi paraméterekkel:

```
NGSITH, MXGSIP    <- GSI állomány fejléce: izotermák száma (db), az egy
izoterma megadásához szükséges adatsorok maximális száma
NGSIP , IGSIT      <- izoterma fejléce: izotermához tartozó adatsorok száma és
esetleg az izoterma típusa
adatsor1          <- NGSIP-szer ismételve
adatsor2
....
IGSISTH, NGSIP     <- újabb izoterma fejléce, ha szükséges
```

Ha IGSIT=3 (többlépcsős paraméteres Langmuir), akkor az **adatsor** értékei:

**K\_i, S\_i, b\_i, n\_i**

ahol

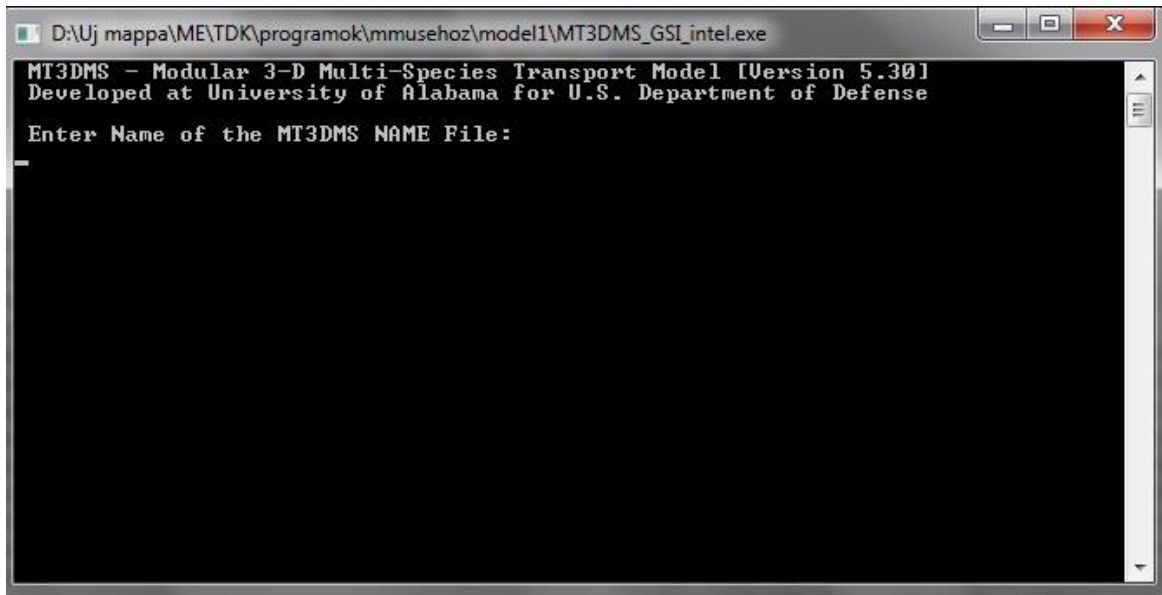
K -> kezdeti meredekség

S -> maximális szorpciós kapacitás

b -> határkoncentráció

n -> exponens

Ezen módosítások megadása után, a Fortran nyelven írt .exe állomány futtatása van hátra. A program felhasználja a Modflow és MT3DMS fájljait a felsorolt kiegészítésekkel, és futás közben, az MT3DMS alapbeállításában szereplő fájlokon kívül létrehoz további három log állományt (C: koncentráció, CS: adszorbeált koncentráció, R: retardáció). A fenti állományban megtalálhatók minden egyes időlépcső esetén az előző mennyiségek oszloponként cellába rendezve.



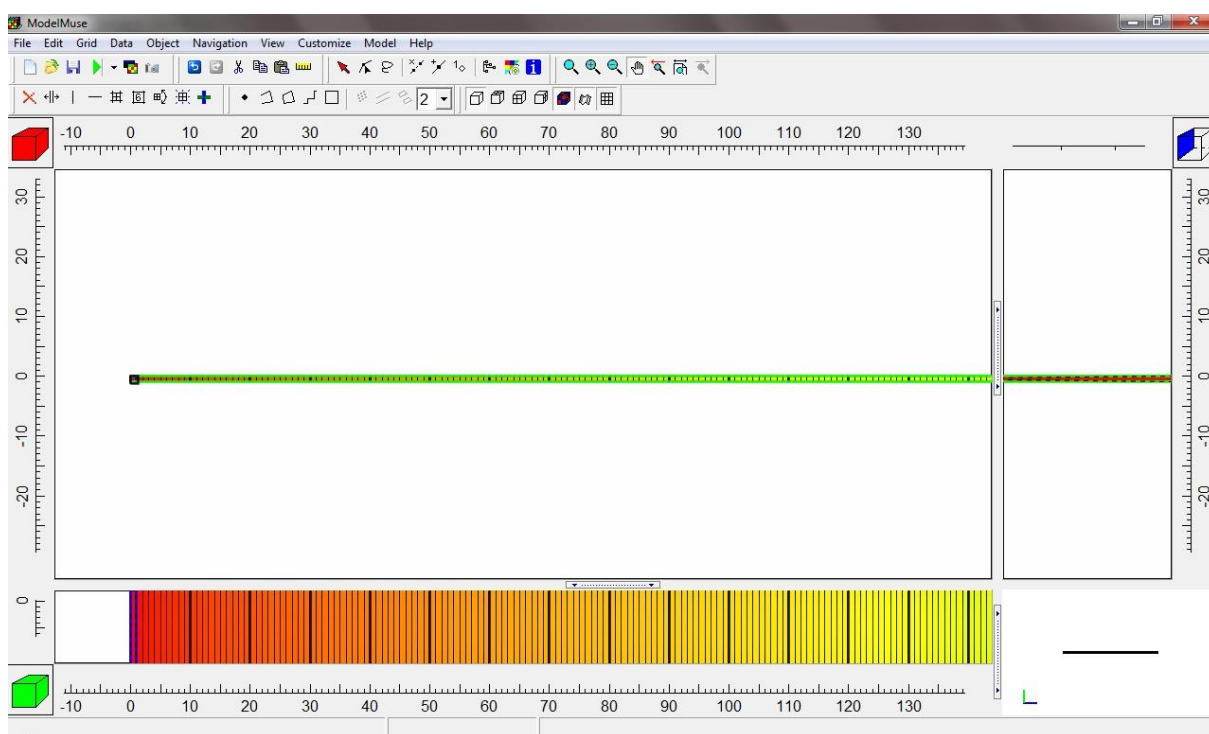
**8 sz. ábra:** A tanszéken kifejlesztett MT3DMS bővítmény parancsablaka

## 6. Számítógépes modellvizsgálatok

A dolgozat további részében azt vizsgálom, hogy a korábban ismertetett általános izoterma függvény K paramétere hogyan viselkedik, hogy a K paraméterek milyen hatással vannak a kialakuló koncentráció-eloszlásokra. Különböző kezdeti koncentrációk mellett vizsgáltam a K paraméter változtatásának hatását.

Ehhez a ModelMuse program segítségével egy általános 1 dimenziós Modflow modellt hoztam létre, amiben a koncentráció terjedését vizsgáltam. A modell felépítése az oszlopkísérletekhez hasonlítható. A felépített modell egységnyi méretű kockákból összeállított sort tartalmaz, 501 cellából és egy rétegből áll.

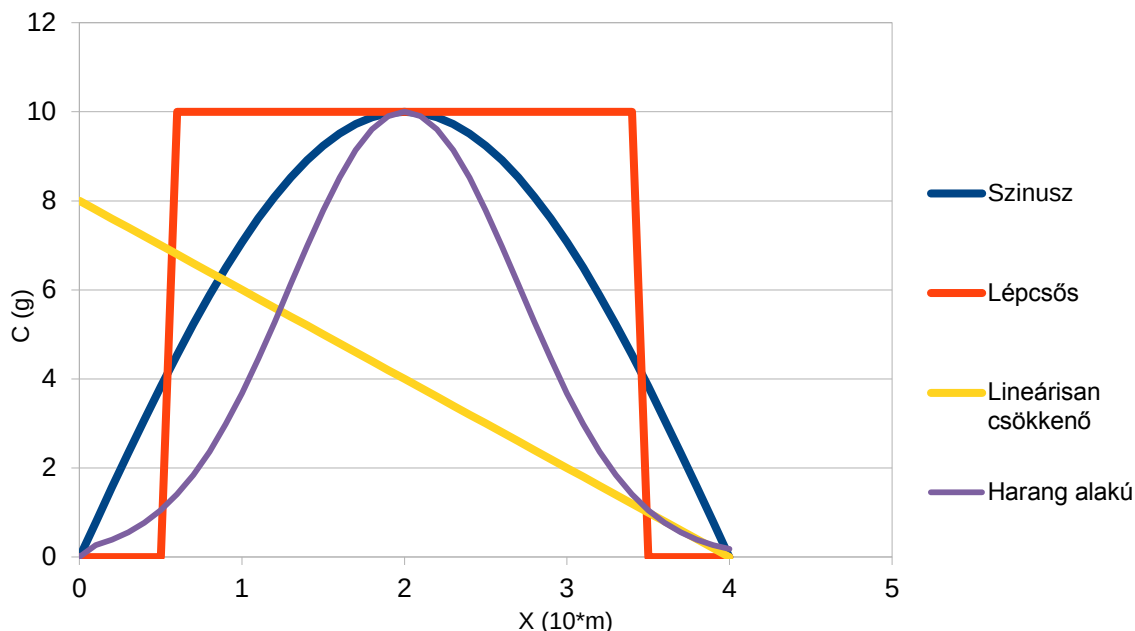
A modellben a víz áramlását a cellasor két végén található CHD cella biztosítja, a megadott szivárgási tényező  $10 \text{ m/nap}$ , a sűrűség  $2 \text{ g/cm}^3$ , a porozitás  $0,25$ .



**9. sz. ábra:** A ModelMuse kezelőfelülete a felépített modell

A fenti ábrán látható a program kezelőfelülete, megnyitva a vizsgálat alatt használt modellel, a színskála a hidraulikus potenciál változását mutatja a modell két végpontja között.

A vizsgálat során haranggörbe alakú, szinusz függvény alakú, lépcsős illetve lineárisan csökkenő kezdeti koncentráció értékeket vizsgáltam. A kezdeti koncentráció értékek és a görbék alakja a 10. sz. ábrán láthatók:



**10. sz. ábra:** A vizsgált különböző kezdeti koncentráció eloszlások

A modell futtatásakor a korábbi kísérletben [Konda et al, 2002] megadott képlet szerinti adszorpciót vizsgáltam. A modell kalibrálásához a kísérletben megadott imidakloprid vegyület vizsgálata során felírt változókkal végeztem a számításokat, a futtatások során ezen vizsgálat alapján meghatározott  $k$  értékek változtatásával hoztam létre a görbékét.

A vizsgálat elvégzéséhez az izoterma többi paraméterét az alábbiak szerint adtam meg:

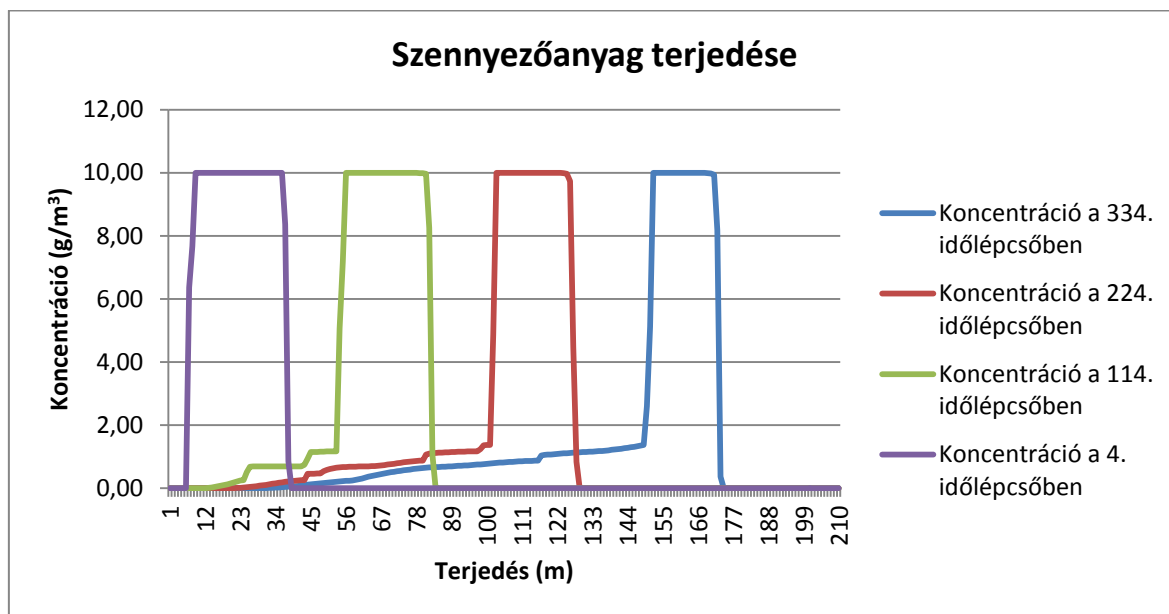
**1. sz. táblázat:** A vizsgálat során használt izoterma paraméterei

[Konda et al, 2002 alapján]

|                 | $b_i(\text{mg/l})$ | $a_i(\text{mg/kg})$ | $k_i(\text{m}^3/\text{g})$ |
|-----------------|--------------------|---------------------|----------------------------|
| Első lépcső     | 0                  | 5,64                | 0,87                       |
| Második lépcső  | 3,43               | 9,36                | 1,22                       |
| Harmadik lépcső | 6,7                | 7,79                | 0,73                       |

## 6.1 Konstans kezdeti koncentráció

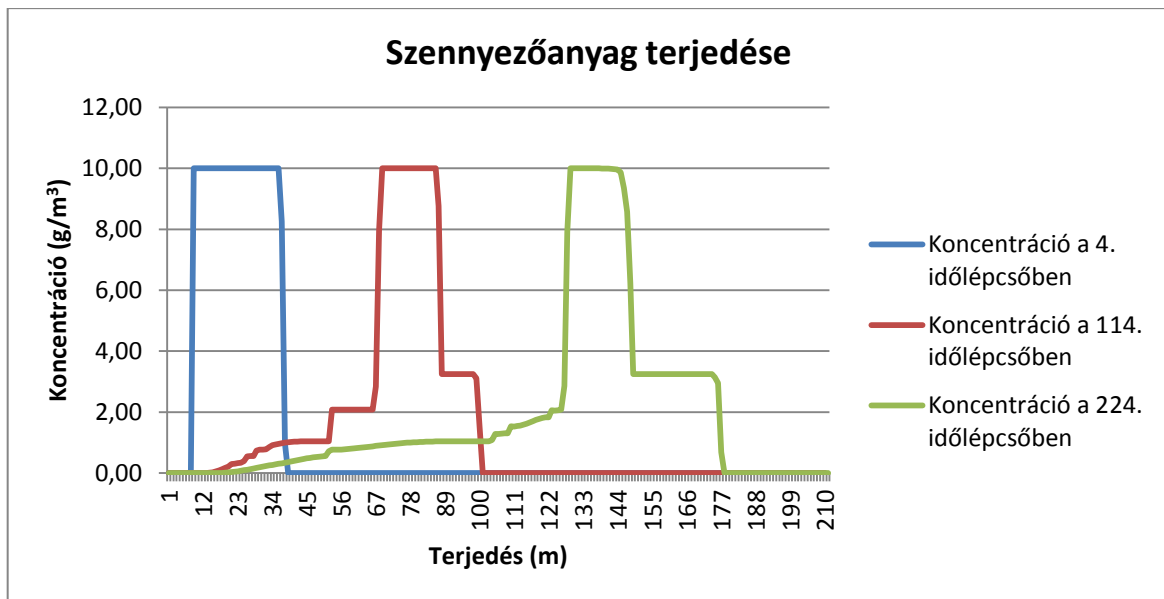
A modell futtatása során első esetben a kezdeti koncentrációt egy 0 és 10 g/m<sup>3</sup> lépcsőkkel jellemzett alakban adtam meg. A modellek futtatása során a képlet szerinti  $k_i$  értékeket a lépcsők kialakulásának megfelelően változtatva, az alábbi koncentrációk jöttek létre, a kezdeti  $k$  értékek:  $k_1 = 0,87 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_2 = 1,22 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_3 = 0,73 \text{ m}^3/\text{g}$ .



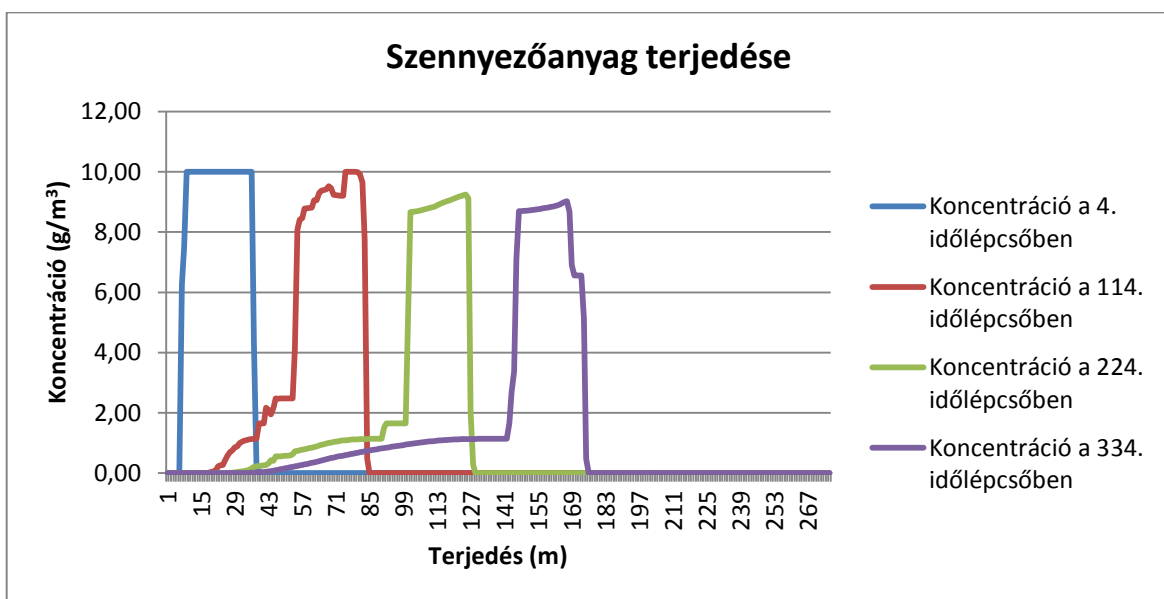
**11. sz. ábra:** Szennyezőanyag terjedése konstans kezdeti koncentráció esetén

Az ábrán látható, hogy a kezdetben megadott koncentrációk, a fent megadott  $k_i$  paraméterekkel az idő folyamán lényegesen nem változnak, a szennyezőanyag terjedésében koncentrációlépcsők nem alakulnak ki.

Amennyiben a  $k_1$  értékét megnöveljük ( $k_1 = 1,5 \text{ m}^3/\text{g}$ ) a többi meghagyása mellett, az első lépcső kialakul, az így kapott  $k_1 > k_2 > k_3$  adatsor esetén lépcsős kezdeti koncentráció megadásakor is kialakul egy lépcső (12. sz. ábra). Amennyiben a relációt megfordítjuk, a görbéken megfigyelhető az előresiető lépcső (13. sz. ábra). A lépcső csak egy bizonyos idő eltelte után jelenik meg. Ezt az okozza, hogy a legfelső „potenciális” lépcső frontjának magassága lecsökken és ezért ez a legfelső lépcső lassabban halad, mint az alacsonyabbak.



**12. sz. ábra:** Szennyezőanyag terjedése konstans kezdeti koncentrációt feltételezve

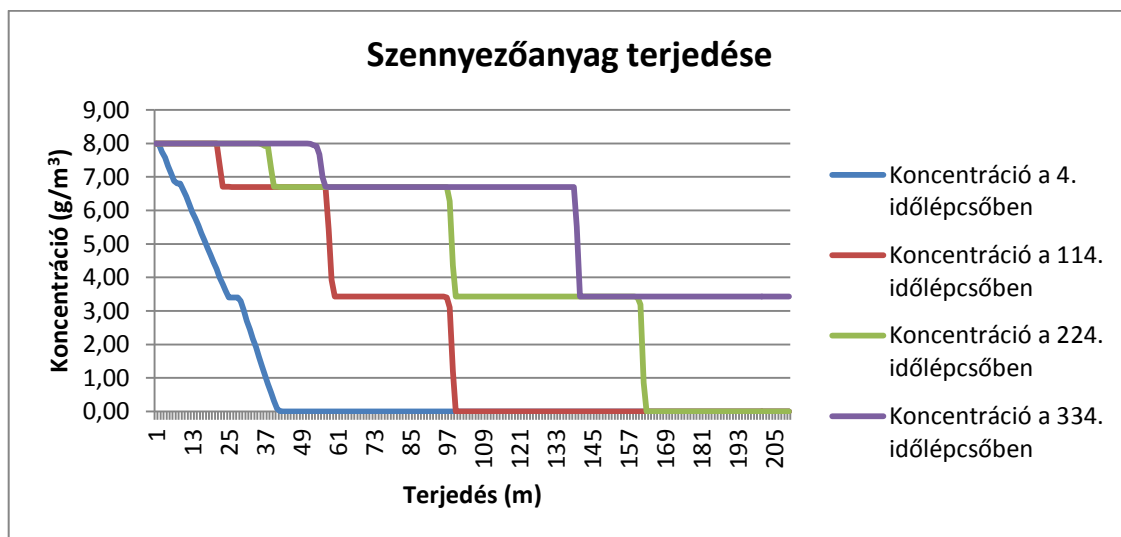


**13. sz. ábra:** Szennyezőanyag terjedése  $k_1 = 0,9 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_2 = 1,15 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_3 = 1,3 \text{ m}^3/\text{g}$  paraméterek esetén

A reláció megfordításakor hasonló, bár kismértékű lépcsőt akkor is elő lehet állítani, ha a  $k_1 = 0,9 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_2 = 1,15 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_3 = 1,3 \text{ m}^3/\text{g}$  értékeket adjuk meg a görbék előállításához. A konstans kezdeti koncentráció esetén háromlépcsős görbét nem sikerült előállítani.

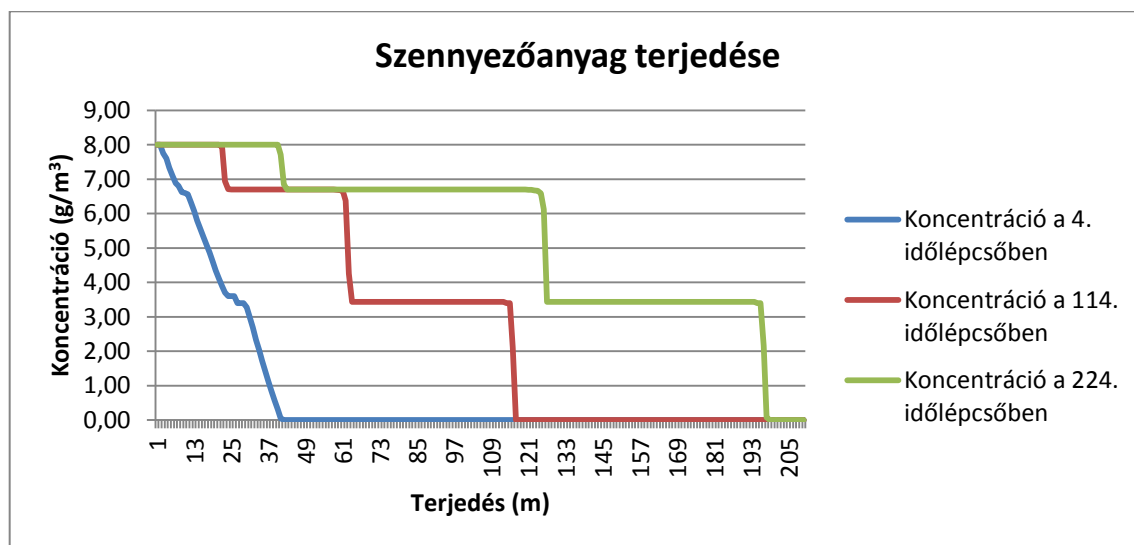
## 6.2 Lineárisan csökkenő kezdeti koncentráció

Amennyiben a kezdeti koncentrációt egy  $8 \text{ g/m}^3$  értékről folyamatosan, szigorúan monoton csökkenő egyenes mentén adjuk meg, a terjedés során a koncentráció frontján kialakulnak a vizsgált lépcsők, azonban a terjedés vizsgálatakor a kezdeti cellában a koncentráció nem csökken, csak elnyújtottabbá válik. A koncentráció időbeli változását a 14. sz. ábra mutatja be:



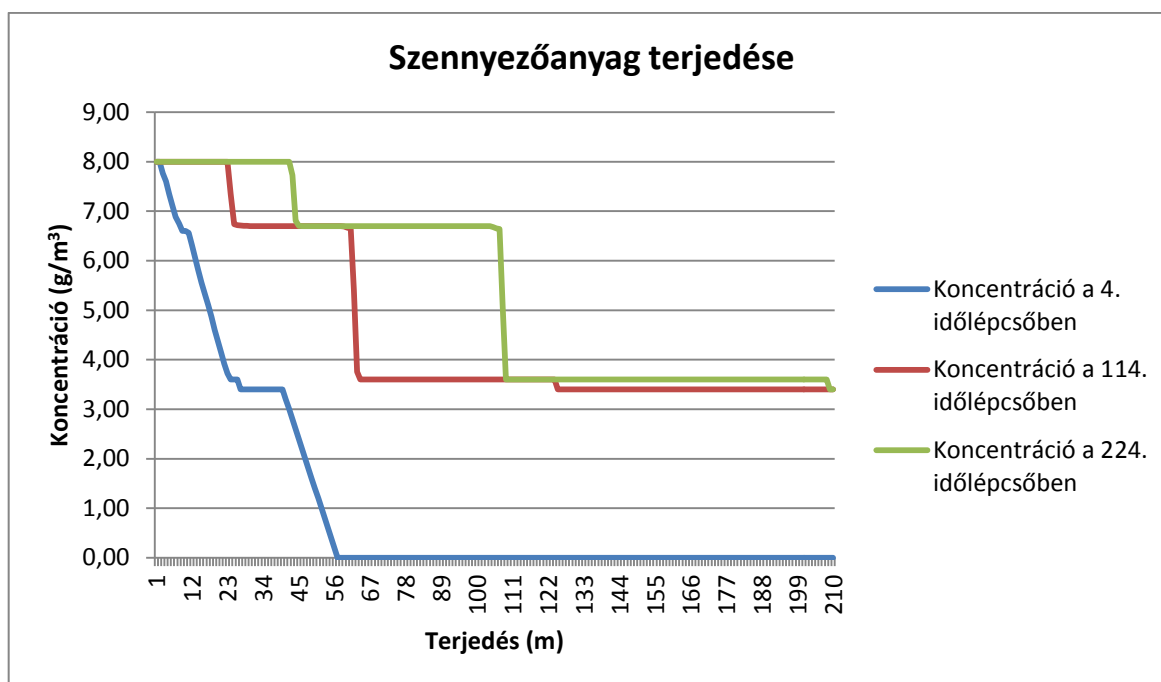
**14. sz. ábra:** Szennyezőanyag terjedés lineárisan csökkenő kezdeti koncentrációt feltételezve

A 14. sz. ábrán látható grafikonon a  $k$  értékek a kezdetben megadott paraméterek, a továbbiakban érdemes megvizsgálni, hogy milyen lépcsők alakulnak ki, ha a  $k_1 > k_2 > k_3$ .

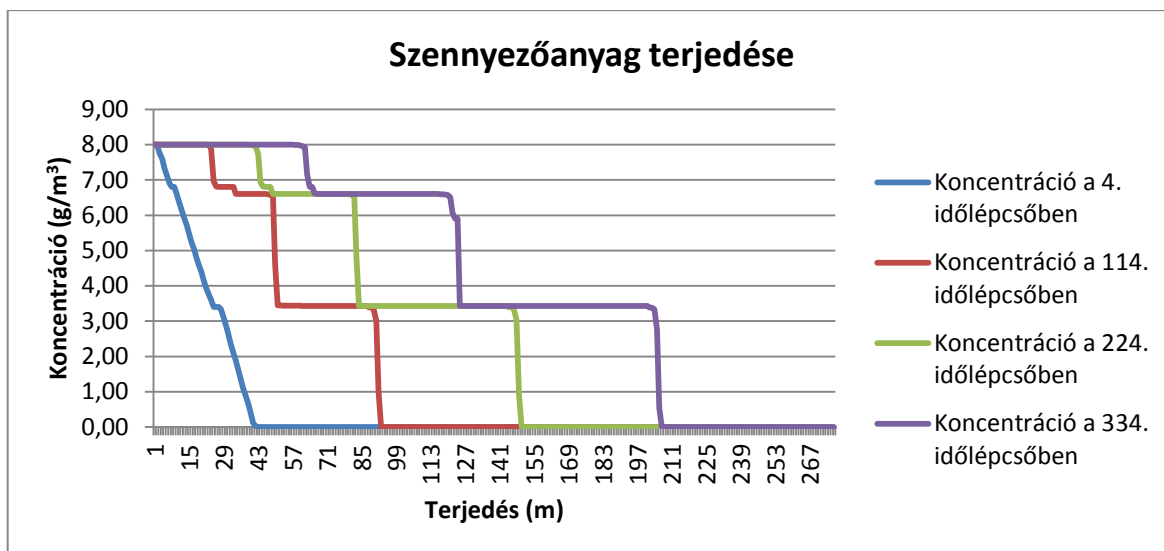


**15. sz. ábra:** Koncentráció terjedése  $k_1 > k_2 > k_3$  kezdeti feltétellel

A 15. sz. ábrán látható, hogy a lépcsők akkor is kialakulnak, ha a  $k$  értékét az alábbiak szerint változtatjuk meg:  $k_1 = 1,5 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_2 = 1,22 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_3 = 0,73 \text{ m}^3/\text{g}$ . Ebben az esetben a lépcsők hossza megnövekszik, a fenti 14. sz. ábrához képest a szennyezőanyag terjedése gyorsabb, a görbék hosszirányban elnyújtottak, azonos időpontokban a görbék távolsága megnőtt. Abban az esetben, ha a  $k$  paraméter értékét csökkenő sorrendben adjuk meg, a görbék lépcsői nem a megfelelő módon alakulnak ki, a vizsgált:  $k_1 = 0,87 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_2 = 1,22 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_3 = 1,73 \text{ m}^3/\text{g}$  esetben a görbék még jobban elnyúlnak, a terjedés gyorsabb, de a három számított lépcső helyett több kisebb is kialakul, ami a numerikus hibákból adódnak. Amennyiben a három  $k$  értékét egyaránt  $k = 0,87 \text{ m}^3/\text{g}$  értéknek vesszük az alábbi görbe áll elő:



**16. sz. ábra:** Szennyezőanyag terjedése  $k = 0,87 \text{ m}^3/\text{g}$  esetén

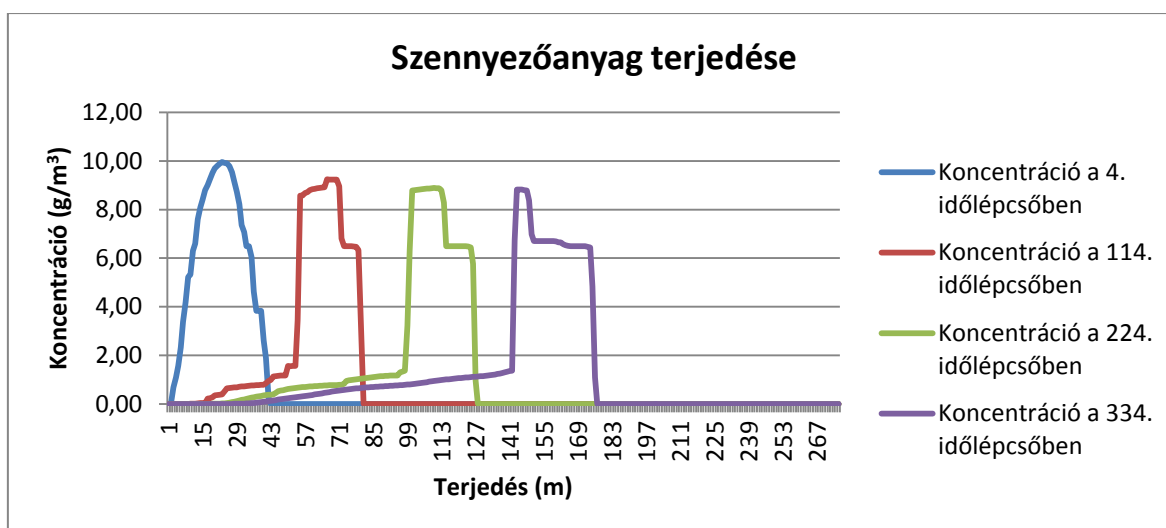


**17. sz. ábra:** Szennyezőanyag terjedése  $k = 0,5 \text{ m}^3/\text{g}$  esetén

$K = 0,5 \text{ m}^3/\text{g}$  érték esetén is megvizsgáltam, hogy egyenlő  $k$  paraméterek esetén hogyan viselkedik a görbe a terjedés során. Mindkét esetben elmondható, hogy a görbe nem adja meg pontosan a három lépcsőt, több kisebbet is tartalmaz, a  $k$  érték nagysága ez esetben is befolyásolja a terjedés számított sebességét, továbbá az anyagmegmaradás sem teljesül a szennyezőanyag koncentrációját tekintve, többféle advekciós modellt feltételezve.

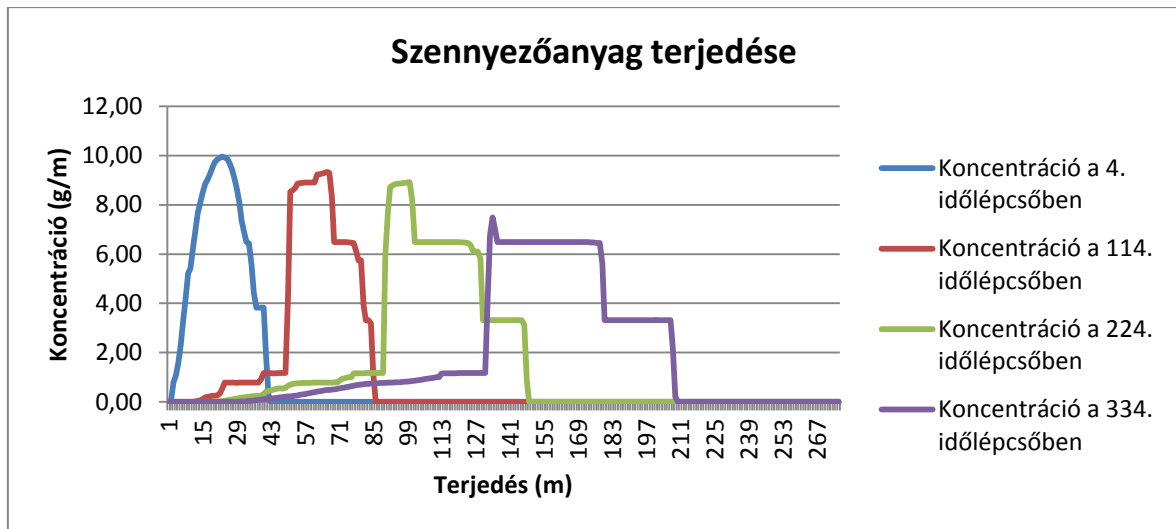
### 6.3 Sinusgörbe alakú kezdeti koncentráció

A harmadik esetben azt vizsgáltam meg, hogy egy 40 m hosszú, és 10 g maximumú szennyeződés esetén a  $k$  tényező hogyan viselkedik a modellezés során.



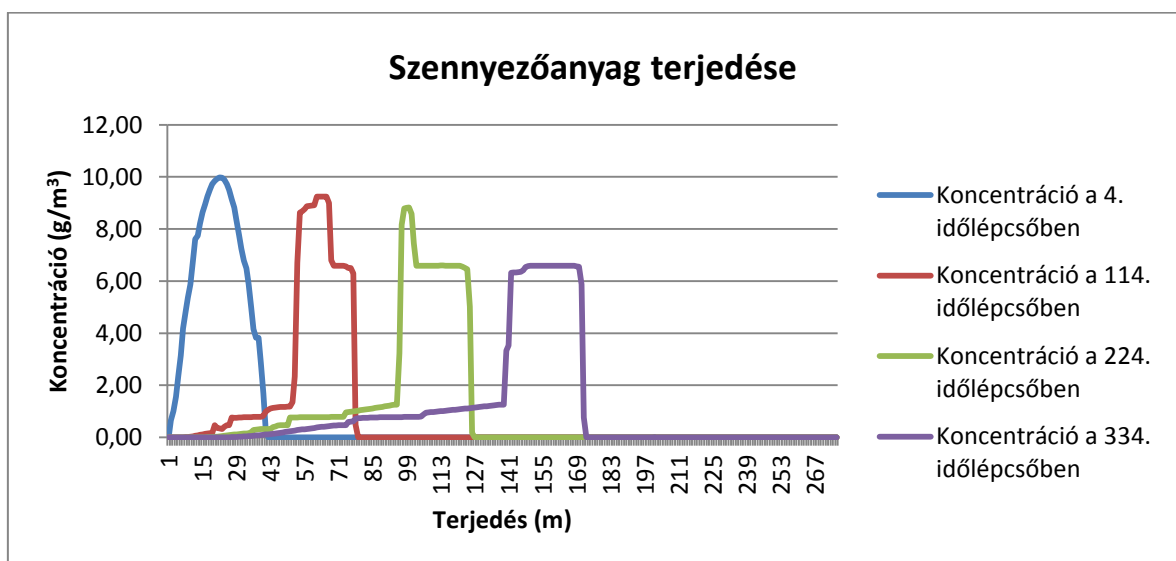
**18. sz. ábra:** Szennyezőanyag terjedése sinusgörbét feltételező kezdeti koncentrációnál

A 18. sz. ábrán látható, hogy a kiindulónak szánt  $k_1 = 0,87 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_2 = 1,22 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_3 = 0,73 \text{ m}^3/\text{g}$  esetén hogyan alakulnak ki az előresiető lépcsők. A sinusgörbe az első olyan koncentráció eloszlás, amely a terjedés során folyamatosan veszít maximumából, de megfigyelhető, ahogy folyamatosan alakulnak ki a lépcsők a terjedés során. Abban az esetben, ha megcseréljük a relációkat, és  $k_1 > k_3 > k_2$  rendűt választunk, a görbék az alábbi módon változnak meg:

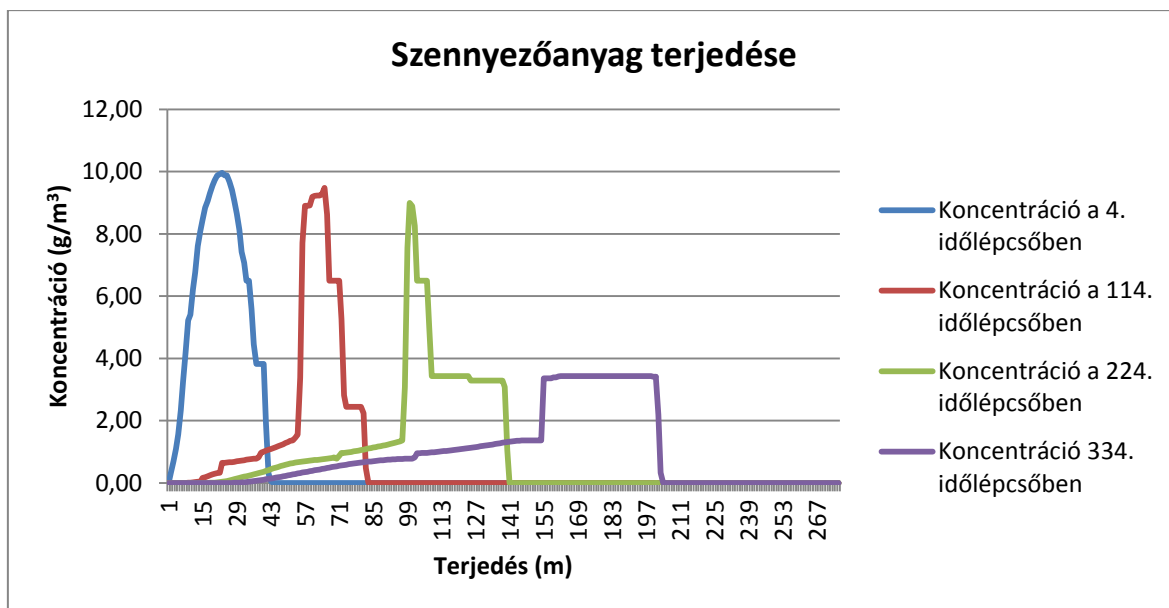


**19. sz. ábra:** Szennyezőanyag terjedése  $k_1 > k_3 > k_2$  és sinusgörbe esetén

A 19 sz. ábrán megfigyelhető, hogy a görbék hasonló alakot vesznek fel, de elnyújtottabbakká válnak, és nagy koncentráció különbségek alakulnak ki rövid távon, ha  $k_1 = 0,87 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_2 = 0,6 \text{ m}^3/\text{g}$  és  $k_3 = 0,73 \text{ m}^3/\text{g}$  értékkel számolunk.

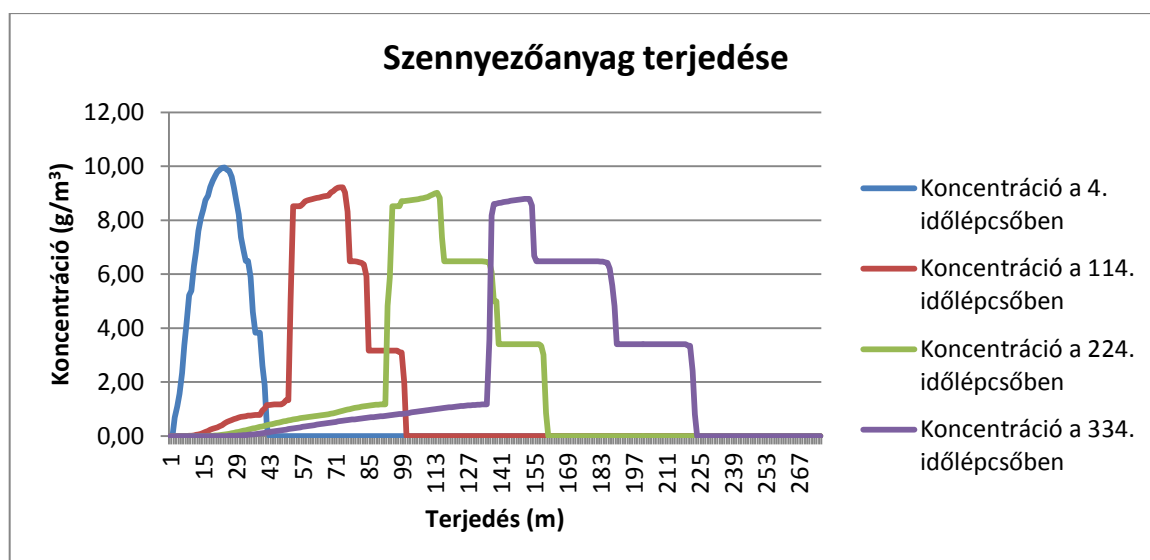


**20 sz. ábra:** Szennyezőanyag terjedése  $k_1 = 0,87 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_2 = 0,79 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_3 = 0,73 \text{ m}^3/\text{g}$  esetén



**21. sz. ábra:** Szennyezőanyag terjedése  $k_1 = 0,87 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_2 = 0,63 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_3 = 0,4 \text{ m}^3/\text{g}$  esetén

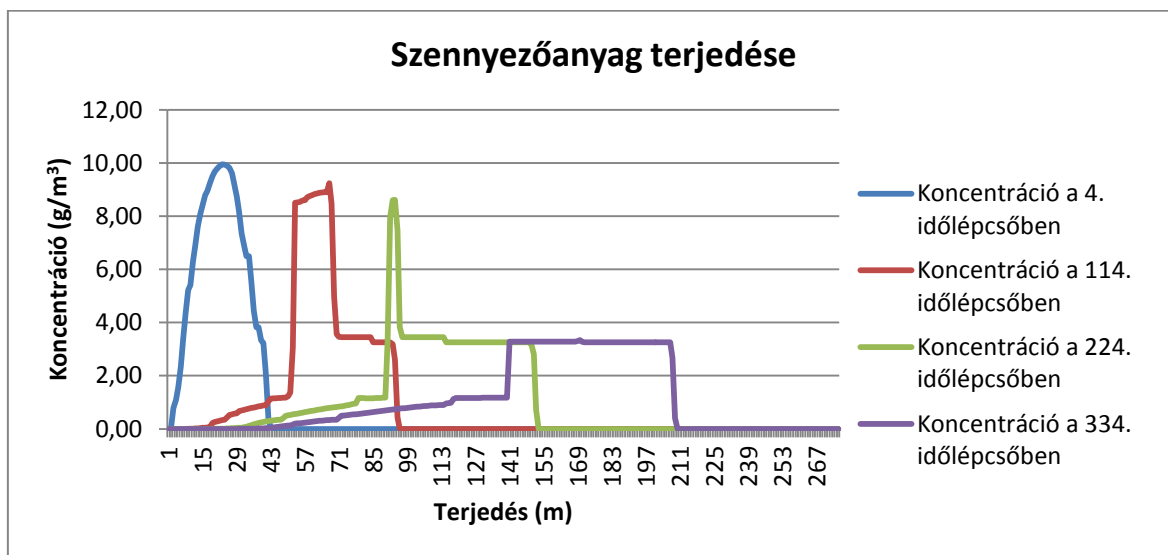
A 20. sz. és 21. sz. ábrán megfigyelhető, hogy a fokozatosan csökkenő  $k$  értékek hasonló alakú görbéket hoznak létre, a koncentrációmáximo ez esetben is folyamatosan csökken, ugyanakkor a terjedés során, ahogy az előresiető lépcsők kialakulnak, az egyes cellák között nagy mértékű koncentráció különbségek adódnak, ez okozza a görbén bekövetkező hirtelen törésszerű lépcsők kialakulását.



**22. sz. ábra:** Szennyezőanyag terjedése  $k_1 < k_2 < k_3$  kezdeti feltétellel

A fenti ábrán megfigyelhető, hogy a  $k_1 < k_2 < k_3$  feltétel esetén alakulnak ki olyan előresiető lépcsők, amelyeknél a tapasztalható törés a legkisebb mértékű, a koncentráció eloszlásában a cellák között nagy különbségek nem adódnak. A kezdeti maximum koncentráció itt is

folyamatosan csökken, mint a sinusgörbe korábbi vizsgálatai esetén. Olyan esetben, amikor a  $k$  értékek megadásánál az alábbi elvet veszem figyelembe:  $k_1=k_2<k_3$ , a lépcsők kialakulnak, de a törések élesek, egy bizonyos pont után a koncentráció konstansként halad a cellákban, a felső lépcső eltűnik, a 23. sz. ábra is mutatja:



**23. sz. ábra:** Szennyezőanyag terjedése  $k_1=k_2=0,7 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_3=1,2 \text{ m}^3/\text{g}$  feltétel esetén

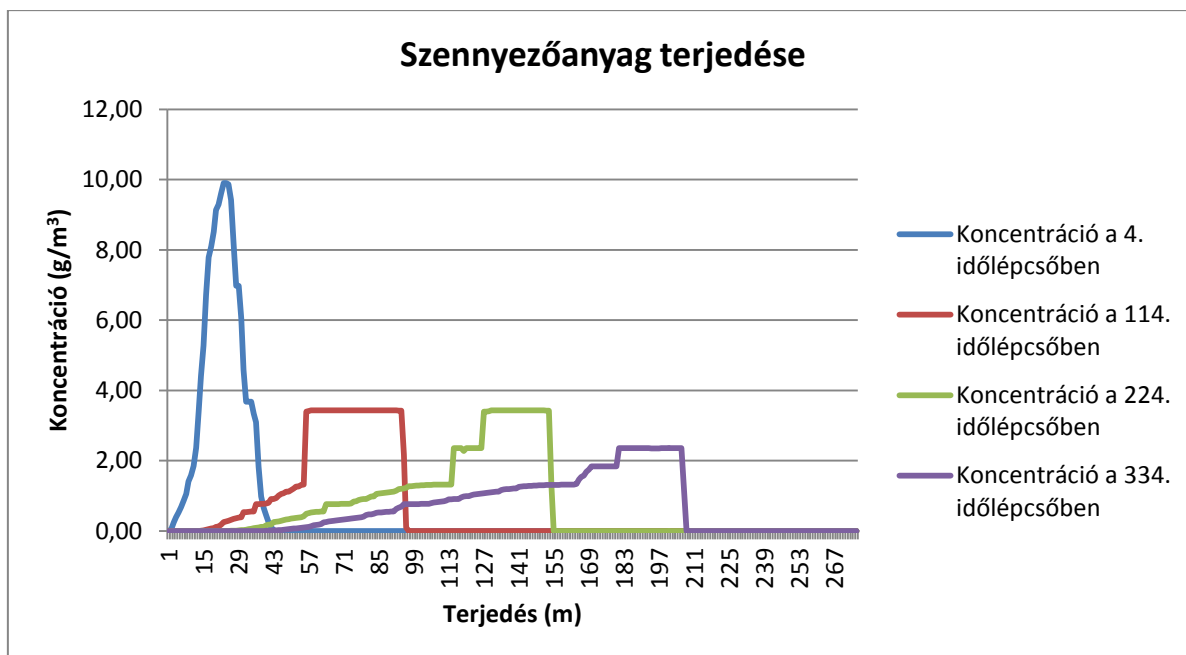
#### 6.4 Haranggörbe alakú kezdeti koncentráció

Az elemzés elvégzéséhez az alábbi képlet segítségével állítottam elő a harang vagy normáloszlás görbéjét:

$$f = a * \exp\left(\frac{-(x - m)^2}{s}\right)$$

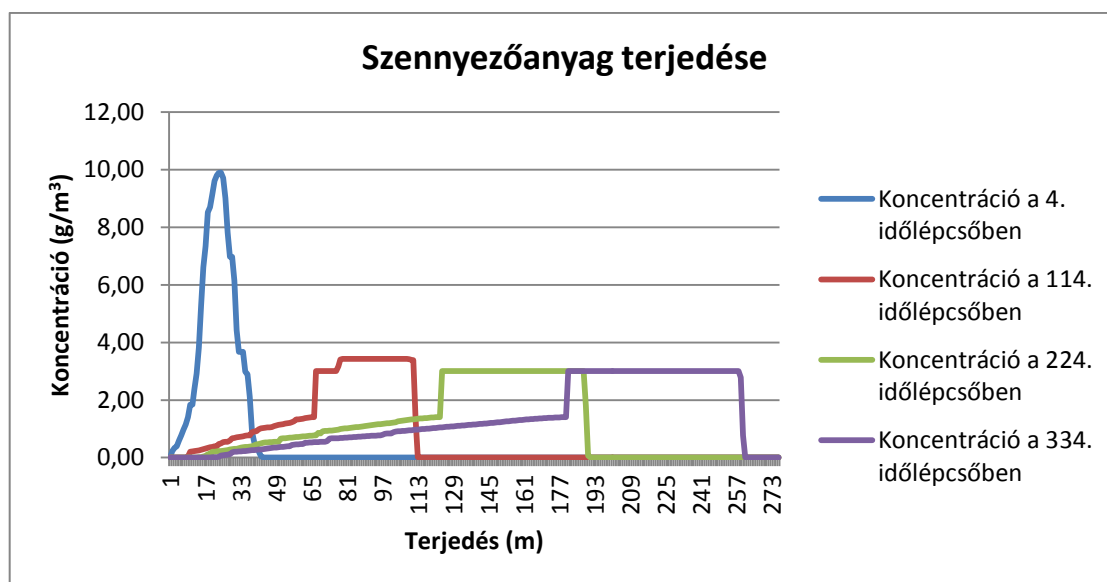
ahol  $a$  szintezi a görbét,  $m$  az eloszlás közepe,  $s$  pedig a szóródás alapján a lejtését adja meg a görbének. A feladatban vizsgált esetben:  $a=10$ ,  $s=1$ ,  $m=2$ .

Az eddigi vizsgálatok kezdetéhez használt  $k$  paraméterek ebben az esetben nem alakították ki a lépcsőket, mint az a 24. sz. ábrán is megfigyelhető, bár valószínűleg a lépcsők kialakulnának, de a maximum elég gyorsan a lépcsők koncentrációja alá csökken, és ezért nem látszik.



**24. sz. ábra:** Szennyezőanyag terjedése  $k_1 = 0,87 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_2 = 1,22 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_3 = 0,73 \text{ m}^3/\text{g}$  esetén

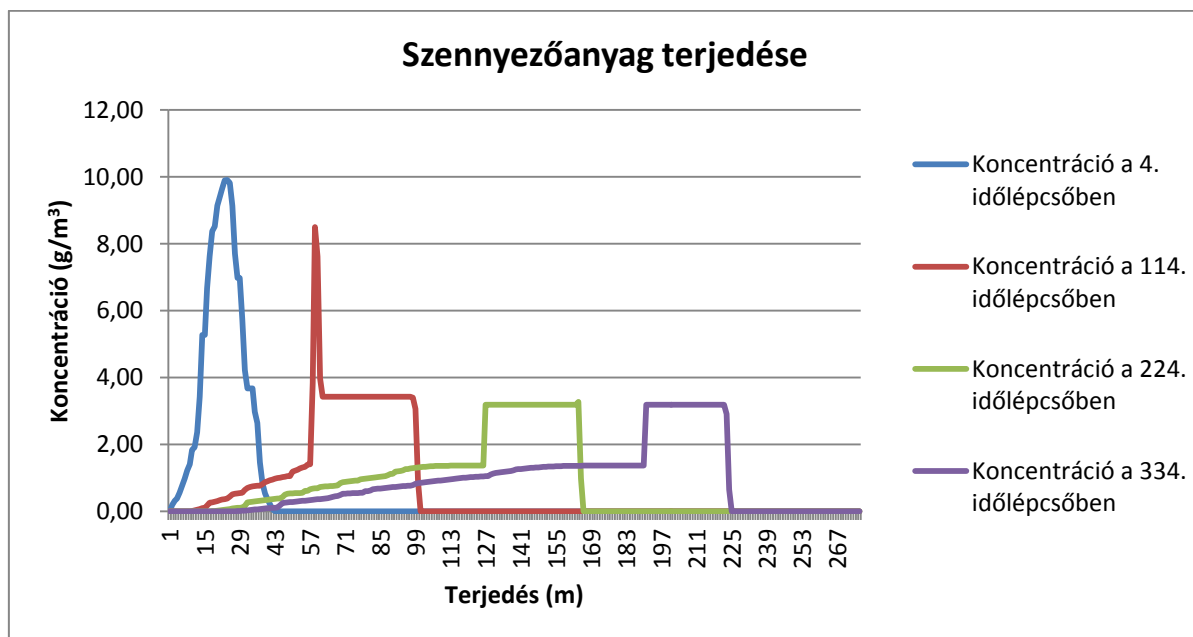
Az éles határok ebben az esetben is azt mutatják, hogy nagy koncentráció különbségek vannak az egymással szomszédos cellák között, ezért ez a megoldás gondot okozhat modellvizsgálatok esetén. Hasonlóan éles határokkal jellemezhető görbét rajzol ki, ha feltételnek a  $k_1 > k_2 > k_3$  paramétereket adom meg.



**25. sz. ábra:** Szennyezőanyag terjedése  $k_1 = 1,5 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_2 = 1,22 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_3 = 0,73 \text{ m}^3/\text{g}$  esetén

A 25. sz. ábrához hasonló görbéket lehet kapni a  $k_1 < k_2 < k_3$  feltétel megadásával, ugyanilyen görbéket adott a  $k_1 = 0,5 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_2 = 1,3 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_3 = 1,9 \text{ m}^3/\text{g}$ , és a  $k_1 = 0,6 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_2 = 1,3 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_3 = 1,6 \text{ m}^3/\text{g}$  paraméterekkel megadott modell is.

Az ilyen keskeny alakból adódóan, egymás melletti cellák esetén nagy lehet a koncentráció gradiense, vagy az is előfordulhat, hogy két cella között lenne egy maximum, amit a számítás során „lesimít” a modell.



**26. sz. ábra:** Szennyezőanyag terjedése  $k_1 = 0,9 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_2 = 1,15 \text{ m}^3/\text{g}$ ,  $k_3 = 1,3 \text{ m}^3/\text{g}$  esetén

A használt haranggörbe eloszlás elég „keskeny” és ez okozhatja, hogy mindegyik esetben gyorsan csökken a maximum értéke. Ezen a 26. ábrán jól látható, hogy a maximum koncentráció csökken mindaddig, amíg a  $C$  (koncentráció) =  $b_2 = 3,43$ -as értéket el nem éri. Ez az alsó lépcsőnek a koncentrációja. Ezután a maximum nem csökken, de a lépcső „szélessége” csökken. Ez addig folytatódna, amíg a lépcső szélessége teljesen lecsökken és eltűnik. Ezután ismét a 26. ábra, 114.-es időlépcsőhöz hasonlóan kialakul egy csúcs, aminek idővel csökken a maximuma.

## 7. Eredmények összefoglalása

Dolgozatomban azt vizsgáltam, hogy a tanszéken kifejlesztett MT3DMS alkalmazás használata során, a többlépcsős izoterma milyen hatással van a számolt koncentráció-eloszlásokra, és azok időbeni változására.

A kutatás során a több lépcsős izoterma K paramétereinek és azok arányának/viszonyának hatását vizsgáltam a kialakuló koncentráció-eloszlásra, többféle kezdeti koncentráció-eloszlás mellett.

A kezdeti koncentráció-eloszlás hatással lehet az előre siető koncentrációlépcsők kialakulására. Ezt egyértelműen jelzi, hogy a „négyzőghullám-szerű” kezdeti koncentráció-eloszlás esetében kevésbé valószínű a lépcsős eloszlás kialakulása. Azokban az esetekben viszont, ahol különböző koncentrációk már kezdetben jelen vannak, egyszerűbben kialakulnak a lépcsők. A szinuszos és haranggörbe szerű kezdeti koncentrációkülönbséget használó modellek között egyik különbség az volt, hogy a haranggörbe „keskenyebb” volt. Ez okozhatta, hogy a haranggörbe esetében gyorsabban csökkent a koncentráció maximuma. Még meg kell említeni, hogy a koncentráció frontok mentén nagy gradiensek alakulnak ki, ami problémát okoz a folyamat numerikus modellezésében. A K paraméterek mellett látszik, hogy az izoterma többi paramétere is hatással van, amit ezen dolgozat keretein belül nem vizsgáltam, ezért nehezebb következtetést levonni a K változásainak hatásával kapcsolatban.

Összegzésként azonban elmondható, hogy a nagyobb K érték azt okozza, hogy a front lassabban mozog, ezért a lépcsős kialakulást az segíti elő, ha  $K_1 < K_2 < K_3$ .

## Irodalomjegyzék

Czinkota Imre, Földényi Rita, Lengyel Zsófia, Marton Aurél (2002): Adsorption of propisochlor on soils and soil components equation for multi-step isotherms, Chemosphere, 48, pp 725-731

Kinzelbach, Wolfgang (1986): Groundwater Modelling – An Introduction with Sample Programs in BASIC (Elsevier, New York, 1986) pp. 207

Konda Livia, Czinkota Imre, Fülek György, Morovján György (2002): Modeling of Single-Step and Multistep Adsorption isotherms of Organic Pesticides on Soil, Journal of Agricultural and Food Chemistry, 50 (25), pp 7326–7331

Kovács Balázs (1998): Szennyezőanyag-terjedési számítások környezetvédelmi alkalmazásai (PhD értekezés, Miskolc, 1998) pp.10

Kovács Balázs (2004): Hidrodinamikai és Transzportmodellezés (Processing MODFLOW környezetben) I. (Miskolci Egyetem Műszaki Földtudományi Kar – Gama Geo Kft., Miskolc 2004) pp. 50-51, 57-59

Kovács Balázs – Szanyi János (2005): Hidrodinamikai és Transzportmodellezés (Processing MODFLOW és Surfer for Windows környezetben) II. (Miskolci Egyetem Műszaki Földtudományi Kar – Gama Geo Kft., Miskolc 2005) pp. 15.

Kovács Balázs – Szanyi János (2006): MT3D alapismeretek - Az MT3D(MT3D-MS) 1.5 DoD program használata, <http://www.gama-geo.hu/kb/okt/modellezes/ME6.pdf>, letöltve: 2013. 10. 12.

Mádlné Dr. Szőnyi Judit – Prof. Dr. Tóth József (2003): Bevezetés a hidrogeológiába jegyzet környezettan tanár és környezettudományi szakos hallgatók hidrológiatárgyához ELTE TTK Alkalmazott és Környezetföldtani Tanszék, Budapest 2003) pp.7-10.

S. Tombor Katalin (2013): Transzportfolyamatok felszín alatti vizekben, BME Vízi közmű és Környezetmérnöki Tanszék, [http://www.epito.bme.hu/vcst/oktatas/feltoltesek/BMEEOVKKM07/transzport2\\_hun.ppt](http://www.epito.bme.hu/vcst/oktatas/feltoltesek/BMEEOVKKM07/transzport2_hun.ppt), letöltve: 2013. 10. 10.

Tolner László (2008): The Determination of Parameters of Multi-Step Adsorption Isotherms by Sequential Simplex Optimization, *Applied Ecology and Environmental Research*, Budapest, 6(4) pp. 109-119

Wang, P. Patrick –Zheng, Chunmiao (1999): MT3DMS: A Modular Three-Dimensional Multispecies Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion, and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems; Documentation and User's Guide, (Department of Geological Sciences, University of Alabama, 1999) pp. 4-14

## Ábrák és táblázatok jegyzéke

(a külön nem jelölt ábrák és táblázatok a szerző saját munkái)

### Ábrák:

|     |                                                                                                                                                     |    |
|-----|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1.  | Transzportfolyamatok jellegzetes elemei [Kinzelbach, 1986]                                                                                          | 4  |
| 2.  | Megkötődés a szilárd váz felületén [S. Tombor, 2013]                                                                                                | 6  |
| 3.  | A szennyezőanyag tovább terjedése [S. Tombor, 2013]                                                                                                 | 6  |
| 4.  | A szennyezőanyag terjedése, II [S. Tombor, 2013]                                                                                                    | 7  |
| 5.  | Freundlich (a) és Langmuir (b) izoterma alakja [Kovács, 2004]                                                                                       | 8  |
| 6.  | Adszorpciós izotermák a propizoklór vizsgálatok [Czinkota et al, 2002]                                                                              | 9  |
| 7.  | Kétlépcsős izoterma az atrazin esetében [Konda et al, 2002]                                                                                         | 11 |
| 8.  | A tanszéken kifejlesztett MT3DMS bővítmény parancsablaka                                                                                            | 14 |
| 9.  | A ModelMuse kezelőfelülete a felépített modell                                                                                                      | 15 |
| 10. | A vizsgált különböző kezdeti koncentráció eloszlások                                                                                                | 16 |
| 11. | Szennyezőanyag terjedése konstans kezdeti koncentráció esetén                                                                                       | 17 |
| 12. | Szennyezőanyag terjedése konstans kezdeti koncentrációt feltételezve                                                                                | 18 |
| 13. | Szennyezőanyag terjedése $k_1 = 0,9 \text{ m}^3/\text{g}$ , $k_2 = 1,15 \text{ m}^3/\text{g}$ , $k_3 = 1,3 \text{ m}^3/\text{g}$ paraméterek esetén | 18 |
| 14. | Szennyezőanyag terjedése lineárisan csökkenő kezdeti koncentrációt feltételezve                                                                     | 19 |
| 15. | Szennyezőanyag terjedése $k_1 > k_2 > k_3$ kezdeti feltétellel                                                                                      | 19 |
| 16. | Szennyezőanyag terjedése $k = 0,87 \text{ m}^3/\text{g}$ esetén                                                                                     | 20 |
| 17. | Szennyezőanyag terjedése $k = 0,5 \text{ m}^3/\text{g}$ esetén                                                                                      | 21 |
| 18. | Szennyezőanyag terjedése sinusgörbét feltételező kezdeti koncentrációnál                                                                            | 21 |
| 19. | Szennyezőanyag terjedése $k_1 > k_3 > k_2$ és sinusgörbe esetén                                                                                     | 22 |
| 20. | Szennyezőanyag terjedése $k_1 = 0,87 \text{ m}^3/\text{g}$ , $k_2 = 0,79 \text{ m}^3/\text{g}$ , $k_3 = 0,73 \text{ m}^3/\text{g}$ esetén           | 22 |
| 21. | Szennyezőanyag terjedése $k_1 = 0,87 \text{ m}^3/\text{g}$ , $k_2 = 0,63 \text{ m}^3/\text{g}$ , $k_3 = 0,4 \text{ m}^3/\text{g}$ esetén            | 23 |

|     |                                                                                                                                        |    |
|-----|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 22. | Szennyezőanyag terjedése $k_1 < k_2 < k_3$ kezdeti feltétellel                                                                         | 23 |
| 23. | Szennyezőanyag terjedése $k_1=k_2=0,7 \text{ m}^3/\text{g}$ , $k_3=1,2 \text{ m}^3/\text{g}$ feltétel esetén                           | 24 |
| 24. | Szennyezőanyag terjedése $k_1= 0,87 \text{ m}^3/\text{g}$ , $k_2= 1,22 \text{ m}^3/\text{g}$ , $k_3= 0,73 \text{ m}^3/\text{g}$ esetén | 25 |
| 25. | Szennyezőanyag terjedése $k_1= 1,5 \text{ m}^3/\text{g}$ , $k_2= 1,22 \text{ m}^3/\text{g}$ , $k_3= 0,73 \text{ m}^3/\text{g}$ esetén  | 25 |
| 26. | Szennyezőanyag terjedése $k_1= 0,9 \text{ m}^3/\text{g}$ , $k_2= 1,15 \text{ m}^3/\text{g}$ , $k_3= 1,3 \text{ m}^3/\text{g}$ esetén   | 26 |

#### Táblázatok:

|    |                                                                              |    |
|----|------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1. | A vizsgálat során használt izoterma paramétereit [Konda et al, 2002 alapján] | 16 |
|----|------------------------------------------------------------------------------|----|

## 1. Függelék

A témavezetőimtől kapott kutatási feladat az általános alakú adszorpció izotermák viselkedésének vizsgálata Processing Modflow modellezési környezetben, mivel a szennyezőanyagok talajokban történő terjedését a talajszemcsék felületén bekövetkező adszorpció erősen befolyásolja. Az elmúlt időszak kutatásai, elsősorban a növényvédőszer transzportja tekintetében bebizonyították, hogy a szorpció folyamatokat sok esetben nem egyszerű, azaz lineáris, exponenciális vagy logaritmikus szorpció izotermák jellemzik, hanem azok ezeknél sokkal bonyolultabb függvényekkel írhatók le, ezért a kutatómunka során egy – a tanszéken kifejlesztett – új MT3DMS szoftver-kiegészítéssel általános formájú szorpció izotermák alkalmazásának lehetőségeit vizsgáltam.

A dolgozat első részében bemutatom röviden a téma elméleti hátterét, a szennyezőanyagok terjedésének elméletét, különös tekintettel az adszorpció folyamatára, majd a második fejezetben az MT3DMS modell elméleti hátterét, alapegyenletét és alkalmazhatóságát mutatom be, a harmadik részben megvizsgálom, hogy a kifejlesztett MT3DMS alkalmazás használata során, a többlepcsős izoterma milyen hatással van a számolt koncentráció-eloszlásokra, és azok időbeni változására.

A kutatás során a több lépcsős izoterma K paramétereinek és azok arányának/viszonyának hatását vizsgáltam a kialakuló koncentráció-eloszlásra, többféle kezdeti koncentráció-eloszlás mellett.

Dolgozatomban az MS Excel, ModelMuse és OriginPro szoftvereket használtam.

## 2. Függelék

A TDK dolgozatom és a beadás előtt álló diplomatervem alapvetően eltér egymástól.

TDK dolgozatom címe:

Általános alakú adszorpciós izotermák hatása a szennyezőanyagok migrációjára

Konzulensek:

Dr. Kovács Balázs, intézetigazgató egyetemi docens, Miskolci Egyetem, Műszaki Földtudományi Kar, Hidrogeológiai – Mérnökgeológiai Intézeti Tanszék,

Fekete Zsombor, doktorandusz, Miskolci Egyetem, Műszaki Földtudományi Kar, Hidrogeológiai – Mérnökgeológiai Intézeti Tanszék

Diplomatervem címe:

Recski bányameddők lefedését előkészítő laboratóriumi oszlopkísérletek a meddőanyagban végbemenő oxidációs folyamatok megismeréséhez

Konzulensek:

Dr. Kovács Balázs, intézetigazgató egyetemi docens, Miskolci Egyetem, Műszaki Földtudományi Kar, Hidrogeológiai – Mérnökgeológiai Intézeti Tanszék,

A TDK dolgozatban egy – a tanszéken kifejlesztett – új MT3DMS szoftver-kiegészítéssel általános formájú szorpciós izotermák alkalmazásának lehetőségeit vizsgáltam. A kutatás során az általános alakú több lépcsős izoterma K paramétereinek és azok arányának/viszonyának hatását vizsgáltam a kialakuló koncentráció-eloszlásra, többféle kezdeti koncentráció-eloszlás mellett.

Diplomatervemben a recski bányameddőben végbemenő oxidációs folyamatokat vizsgálom laboratóriumi oszlopkísérletekkel. A vizsgálatok során oszlopokban elhelyezett megadott mennyiségű meddőanyagra hetente adott időpontokban desztillált vizet öntök, és

az átmosás után a szűrlet elemzésre kerül. Az oxidáció végbemenetelének két feltétele közül (víz, oxigén) az utóbbi szabályozásával, a folyamat sebességének meghatározása a dolgozatomban célja.

Tehát a két dolgozat alapvetően eltér egymástól, a két kutatás során két különböző kémiai folyamat (adszorpció, oxidáció) viselkedését vizsgáltam.