

Dél-Somogy és Baranya talajvizeinek állapota A csapadék beszivárgása során végbemenő geokémiai reakciók modellezése

*Quality of shallow groundwater in South Somogy and Baranya.
Modelling of geochemical reactions during precipitation infiltration*

SZÓCS Teodóra¹

*Tárgyszavak: talajvíz, vízgeokémia, modellezés, NETPATH, PHREEQCI
Keywords: shallow groundwater, hydrogeochemistry, model, Netpath, Phreeqi*

Abstract

The study summarizes the knowledge gained from the Szigetvár 1:100 000 map area. The work was part of the "shallow groundwater state in South Somogy and Baranya" theme at the "geochemical inspection of groundwater" project of the Geological Institute of Hungary.

The aquifer of shallow groundwater is mainly loess and drift sand. The composition of shallow groundwater is typical of hilly areas, with a Ca-Mg-HCO₃ content. Locally, the concentration of pollution-denoting anions (NO₃⁻, SO₄²⁻, Cl⁻) is significant. High concentrations of NO₃⁻, SO₄²⁻ and Cl⁻ can be detected in shallow groundwater from the drift sand area. These are connected mainly to settlements.

The NETPATH and PHREEQCI softwares were used to study precipitation infiltration tracking and water-rock interaction investigations.

The infiltration is about 12–15% in the loess area, according to the hydrogeochemical modelling. These could be maximum-precipitation infiltration values. The approximately 22% infiltration in the drift sand area is certainly valid.

The water-rock interactions are similar during precipitation-infiltration in both territories. The remarkable CO₂ dissolution and calcite-dolomite dissolution, together with N₂ gas formation during denitrification, is typical on both sites.

The differences are the following:

- there is plagioclase dissolution in the loess area, while quartz dissolves in the drift sand area
- because of the higher precipitation-infiltration, the calcite dissolution is higher in the drift sand area than in the loess area
- the K-feldspar dissolution is nearly two times higher in the drift sand area than in the loess area
- in the drift sand area there is always ion exchange during infiltration, while in the loess area the water-rock interaction is also possible without ion exchange.

As the natural background contains some anthropogenic contamination, even after the precise sorting, the water-rock interaction models also bear these potential faults. The margin of error cannot be greater than 10 %. The reliability and accuracy of the results could be corrected with isotope data.

Összefoglalás

Jelen tanulmány a Magyar Állami Földtani Intézet, „A felszín alatti vizek geokémiai vizsgálata” projekt „Dél-Somogy és Baranya talajvizeinek állapotfelmérése” részműtájában a Szigetvár 803 1:100 000-es térképlap területéről gyűjtött ismereteket összegzi. A talajvíz kémiai összetétele tipikus dombvidéki, Ca-Mg-HCO₃-os. Helyenként jelentős a szennyeződést jelző anionok (NO₃⁻, SO₄²⁻, Cl⁻) koncentrációja. A magas nitrát-, szulfát- és klorid-koncentrációk elsősorban a futóhomokos területek talajvizeiben fordulnak elő. A csapadékvíz beszivárgásának nyomon követésére és a víz-kőzet kölcsönhatások vizsgálatára a NETPATH és a PHREEQCI programok kerültek felhasználásra.

¹Magyar Állami Földtani Intézet, H-1143 Budapest, Stefánia út 14.

Bevezetés

A Somogy-Baranya földtani térképezése projekt és a Dél-Somogy és Baranya talajvizeinek állapotfelmérése résztema keretében végzett munkák részeként a Szigetvár 803, 1: 100 000-es térképlap mintegy 1600 km²-es területéről talajvíz-mintákat gyűjtöttünk.

A talajvíz állapotának felmérése a földtani térképezéssel párhuzamosan illetve azt követően folyt. Ennek során 256, egyenként 10 m-es fúrás mélyült, körülbelül 2 km x 2 km-es sűrűséggel. Közülük 92-ből sikerült vízmintát venni. A többi fúrás vagy nem érte el a talajvíz szintjét, vagy a földtani felépítés akadályozta meg a mintavételt (beomlott a fúróluk). A terület többi részén rendszeresen használt ástott kutakat (149) illetve forrásokat (8 db) mintáztunk, így összesen 249 vízmintát gyűjtöttünk be.

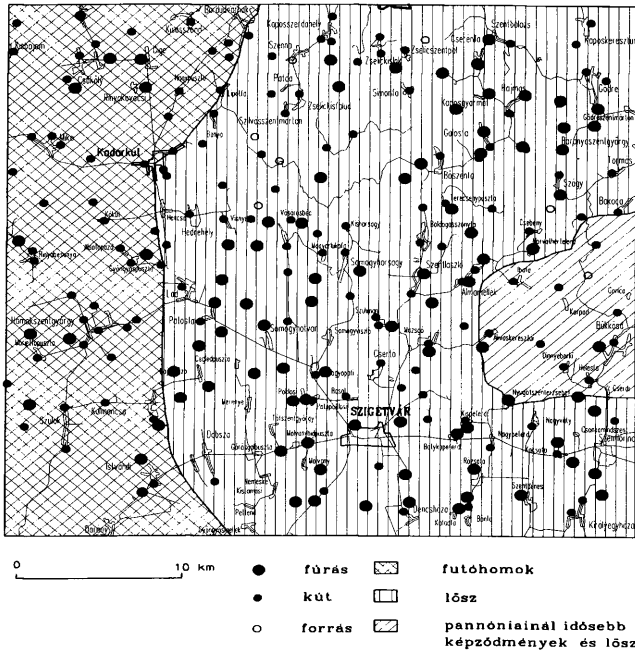
A fúrásokból a térképezési, a kutakból és forrásokból a vízgeokémiai projekt munkatársai gyűjtötték a mintákat. A fúrások mintáinál nem került sor szűrésre és tartósításra, a kutak és források mintáinál viszont igen. Utóbbi esetben három flakonba vettünk vízmintát: 1. rutin vizsgálatokra, 2. kation- kovasav- és nyomelem-vizsgálatokra (0,45 µm pórusú szűrőn átszűrtük a vizet, majd nagy tisztaságú salétomsavval biztosítottuk a pH < 2 értéket), 3. szűrt és kloroformmal tartósított, majd 4 °C-on tárolt mintákat a nitrát-tartalom meghatározására. A két mintavételi eljárás ugyan eltér egymástól, de a terület talajvizeire jellemző általános helyzetkép kialakítására alkalmas. Sikerült az eredeti terveknek megfelelő, közel egyenletes mintasűrűséget biztosítani.

Földtani viszonyok

Talajvíz szempontjából a területen elsősorban a pleisztocén-holocén képződmények játszanak szerepet (1. ábra), mivel a mintázott kutakban az átlagos talajvízmélység 7,8 m. A dombtetőkön a talajvíz mélysége eléri a 25–35 m-t, néhol még a 45–55 m-t is, míg a völgyekben 0,5–1 m.

Egy, Kadarkút környékén húzódó, É–D-i irányú vonal mentén a felszíni képződmények (felső-pleisztocén–holocén) két fő csoportja különíthető el: a Ny-i részen holocén futóhomok (elsősorban Marcali Homok Formáció), míg K-en lösz települ (döntően Paksi Lösz Formáció). A K-i részen egy nagyon kis területen, a Ny-i Mecsek különböző képződményei találhatóak: karbon gránit (Mórággyi Komplexum), permii homokkő és aleurolit (Cserdi és Korpádi Formáció), triász mészkő és dolomit (Lapisi, Zuhányai és Csukmai Formáció), valamint törmelékes kifejlődésű miocén képződmények (Szászvári Formáció). Utóbbiakra helyenként a nagy kavicsok jellemzőek, máshol a lemezes agyag. A miocén képződmények nagyon durva szeműek. Felfelé a szemcseméret csökken. (CHIKÁN G-né (szerk.) 1996)

A völgyekben holocén illetve középső-pleisztocén folyóvízi homok, vagy lejtőtörmelék található. Az alsó- és középső-pleisztocént Ny-on iszap, homok és kavics képviseli, K-en pedig lejtőlösz. A negyedidőszaki képződmények fekéje a K-i rész kivételével felső-pannoniai homok, agyagos homok és agyag.



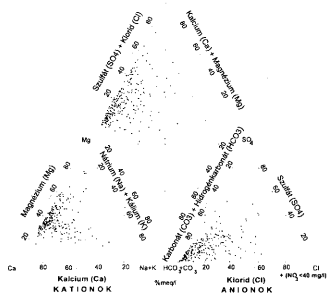
1.ábra. Vázlatos földtani térkép

Fig. 1 Schematic geological map

A talajvíz állapota

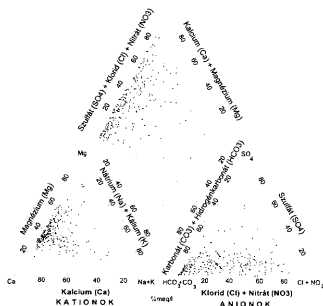
Az ionkoncentrációk eloszlásait Piper diagrammok (2–3. ábra) szemléltetik. A háromszög-diagramok a kationok illetve anionok relatív koncentrációit ábrázolják. A kationokat és az anionokat egyaránt 3 fő egységbe soroljuk. Ezek: Na+K, Ca, Mg illetve $\text{HCO}_3 + \text{CO}_3$, SO_4 és Cl a 2. ábrán, illetve Na+K, Ca, Mg valamint $\text{HCO}_3 + \text{CO}_3$, SO_4 és $\text{Cl} + \text{NO}_3$ a 3. ábrán.

A 2. ábrán a kationok a Ca-Mg-oldal mentén tömörülnek, ami azt jelenti, hogy a talajvizekben a Ca^{2+} és a Mg^{2+} dominál. Egy-két esetben kiugróan megnő a víz Mg-tartalma. Néhány mintában a Na^+ és K^+ magasabb relatív koncentrációi is megfigyelhetők, de ezek nem jellemzők.



2. ábra. Ion koncentrációk ($\text{NO}_3^- < 40 \text{ mg/l}$), Piper-diagram

Fig. 2 Ion concentrations ($\text{NO}_3^- < 40 \text{ mg/l}$); Piper-diagram



3. ábra. Ion koncentrációk, Piper-diagram

Fig. 3 Ion concentrations ($\text{NO}_3^- < 40 \text{ mg/l}$); Piper-diagram

Az anionokat nézve kiderül, hogy erősen hidrokarbonátosak a vizek, Cl^- és SO_4^{2-} -tartalmuk alárendelt.

A gyémánt-diagramon a kationok és anionok páronként szerepelnek a tengelyek mentén: $\text{Na}+\text{K}$, HCO_3+CO_3 , $\text{Ca}+\text{Mg}$ és $\text{Cl}+\text{SO}_4$ csoportosításban. A minták kb. a $> 85\%$ $\text{Ca}+\text{Mg}$ ($< 15\%$ $\text{Na}+\text{K}$), $> 65\%$ HCO_3+CO_3 ($< 35\%$ $\text{Cl}+\text{SO}_4$) tartományt fedik le.

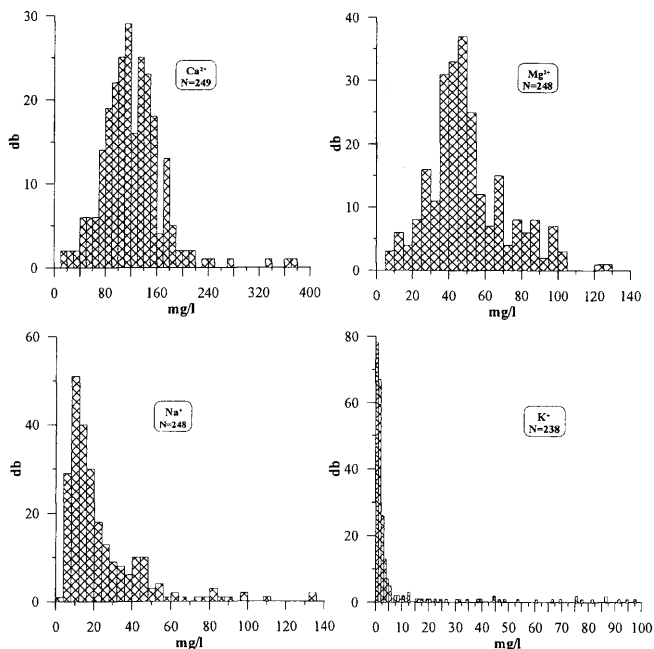
A 3. ábrán, amelyen a Cl^- mellett a NO_3^- -tartalom is szerepel, megfigyelhető, hogy amíg a kationok eloszlása változatlan maradt, az anionok eloszlása a nitrátos sarok felé húzódott, jelezve a magas NO_3^- -koncentrációk jelenlétét. A gyémánt-diagramon szintén látható a nitrát hatása; a minták a $\text{Cl}+\text{SO}_4+\text{NO}_3$ oldal mentén elszórtan helyezkednek el.

Mindezekkel együtt megállapítható, hogy egy nagyjából egységes, tipikus dombvidéki, $\text{Ca}-\text{Mg}-\text{HCO}_3$ -os talajvíz jellemzi a területet, helyenként magas nitrát-tartalommal.

Mivel az alkotók többsége nem normál eloszlású (4a, b ábra), a következőkben a várható érték becsléseként nem az átlagok, hanem a mediánok szerepelnek.

A talajvíz kémiai összetétele a földtani felépítés függvényében

A mintákat – a korábban már ismertetett földtani felépítésnek megfelelően: attól függően, hogy mely képződményből származik a vízminta – 3 csoportba soroltam, „futóhomok”, „lössz” valamint „egyéb” megnevezésekkel. Utóbbi kategóriába a pannóniaiánál idősebb képződmények (foltokban kvarter lösz előfordulásokkal) területein található kutak mintái kerültek. A másik két csoportban a pannóniai képződmények mellett futóhomok, illetve lösz fordul elő.

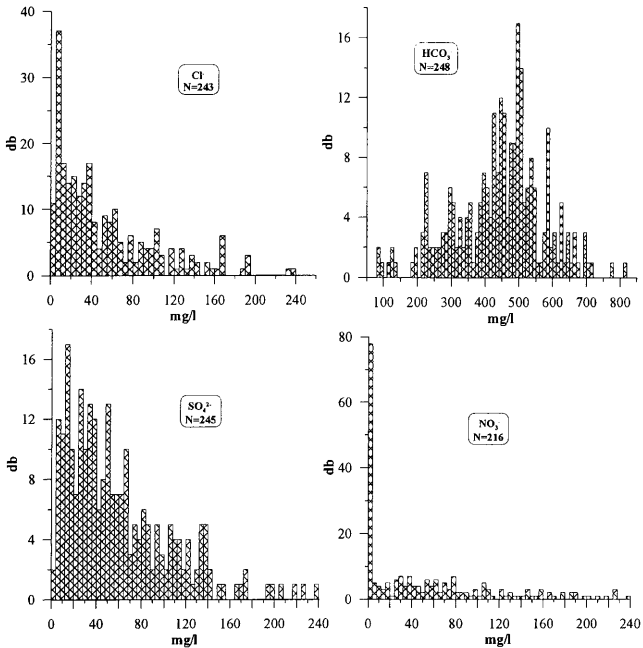


4a ábra. A fontosabb kationok eloszlásai

Fig. 4a Histograms of major cations

Ha csak az egészségügyi határértéknél (40 mg/l) kevesebb nitrátot tartalmazó mintákat nézzük (5. ábra), a következőket állapíthatjuk meg. Úgy a klorid-, mint a szulfát-tartalom követi a nitrát-tartalom változását: a három, szennyeződést jelző anion koncentrációja együtt mozog. E tendencia (a nitrát kivételével) az összes mintát vizsgálva is megfigyelhető. A legmagasabb koncentrációkat a „futóhomoknál” tapasztaljuk, a legalacsonyabbakat pedig az „egyéb” kategóriában.

Ha az összes-tartalom változását (6. ábra) vizsgáljuk, látható, hogy a < 40 mg/l NO₃⁻-tartalmú csoportok és az összes minták csoportjai ellentétes tendenciát mutatnak. A várhatótól eltérően az összes-tartalom a „futóhomok” csoportban a legmagasabb, és az „egyéb” kategóriában a legalacsonyabb. Abban az esetben, amikor a minták nitrát-tartalma < 40 mg/l, az összes-tartalom az előzetes várakozásnak megfelelően alakul: a „futóhomok” esetében a legalacsonyabb, és a földtani felépítés összetettebbé válásával nő.



4b. ábra. A fontosabb anionok eloszlásai

Fig. 4b Histograms of major anions

Alacsony nitrát-tartalom esetében tehát a Ca^{2+} , Mg^{2+} és HCO_3^- határozza meg az összesó-tartalom mértékét. Ezzel szemben, amikor a talajvízben magas koncentrációkban vannak jelen a szennyezést jelző anionok (Cl^- , SO_4^{2-} és NO_3^-), megváltozik az összesó-tartalom tendenciája, a „futóhomok” esetében érve el a maximális koncentrációt, jelezve, hogy e csoport mintái a legszennyezettebbek.

Víz-kőzet kölcsönhatás

A csapadékeszivárgástól a talajvízig

Felhasznált modellező programok a NETPATH és a PHREEQCI.

A NETPATH modellező program a feltételezett beszivárgási, áramlási pálya mentén, tömeg-egyensúly egyenletek alapján számolja a víz-kőzet

kölcsönhatások során végbe-
menő folyamatokat. A folya-
matok a kiinduló és a keletkező
víz összetételének ismeretében,
illetve a reakcióban részt vevő
„fázisok” (ásványfázisok, gázok,
reakció-típusok, vegyületek
stb.) megadásával modellez-
hetőek.

$$A + B = A' + B'$$

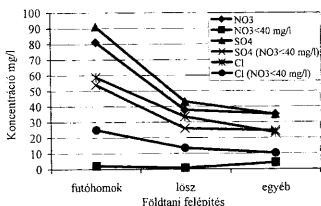
A – kiindulási víz; B – reak-
cióban résztvevő fázisok;

A' – keletkező víz; B' – keletke-
ző fázisok

A program két Fortran kódot
használ, egyiket az adatok
bevitelére és szerkesztésére, a
másikat a futtatásra. Lehetőség
van izotópos adatok megadá-
sára is, de jelen tanulmányhoz
nem álltak rendelkezésre ilyen
elemzések. A program kiszámol-
ja az ásványok telítettségé-
indexeit is, ami segítséget nyújt a
reakció típusok meghatározásá-
nál.

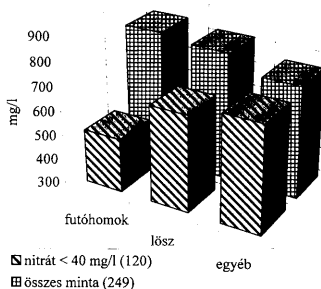
A PHREEQCI modellező
program (PARKHURST 1995,
GLYNN et al. 1997) egy C nyelven
írt, könnyen kezelhető, inter-
aktív program. A PHREEQCI
inverz-modell hasonló elven
működik, mint a NETPATH,
tudja mindazt, amit a
NETPATH, ráadásul mód van az elemzések hibahatárainak %-os megadására. Az
előrejelző számításoknál („forward modeling”) termodinamikai paramétere-
ket is figyelembe vesz a program, és van lehetőség a felhasználó által Basic nyelven
megfogalmazott kinetikus reakciók modellezésére is.

A beszivárgó csapadék oldott-anyag tartalmára a móranyi hegyvidék területén
lehullott hóból vett minták elemzése szolgáltatott adatokat (HORVÁTH et al. 1997).
A hőminták klorid-tartalma megegyezik a Meteorológiai Szolgálat siófoki bázisán
1990–96 között gyűjtött csapadékok klorid-tartalmainak mediánjával. A klorid-
tartalom megbízhatósága kiemelkedően fontos, mivel – konzervatív alkotó lévén
– ennek alapján számítható a párolgás, vagyis a beszivárgás. Az evaporációs
faktor a keletkező és a kiindulási víz klorid-tartalmának aránya.



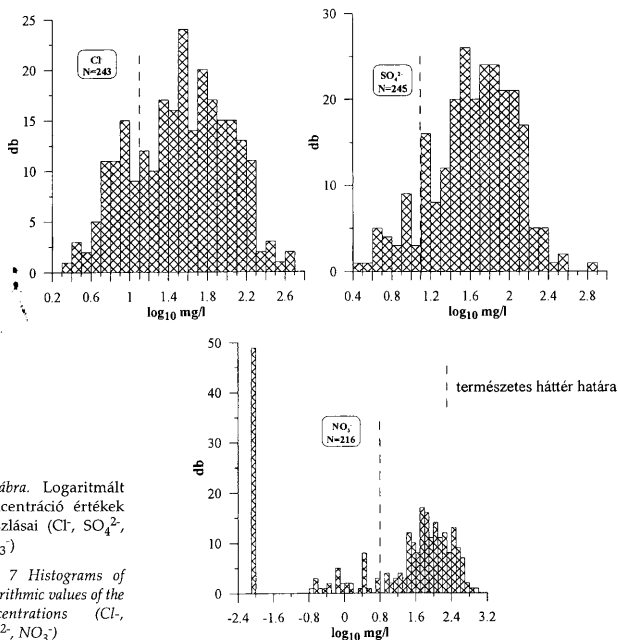
5. ábra. Szennyeződést jelző anionok koncentrációi a víztartó földtani felépítésének függvényében

Fig. 5 Concentrations of pollution indicating anions in the function of aquifer geology



6. ábra. Az oldott-anyag-tartalom változása a szennyezettség és a földtani felépítés függvényében n=249

Fig. 6 Changes of total dissolved solids in the function of pollution and geology



7. ábra. Logaritmált koncentráció értékek eloszlásai (Cl^- , SO_4^{2-} , NO_3^-)

Fig. 7 Histograms of logarithmic values of the concentrations (Cl^- , SO_4^{2-} , NO_3^-)

A NETPATH és a PHREEQCI futtatásához használt adatokat az I. táblázat tartalmazza. A természetes háttérrel a Cl^- - SO_4^{2-} - NO_3^- logaritmált koncentráció értékeinek eloszlásai (7. ábra) alapján jelöltem ki. A Cl^- és SO_4^{2-} háttér határa 1,1, ami 12,6 mg/l-nek felel meg, míg a NO_3^- háttér határa 0,8, ami 6,5 mg/l-nek felel meg. A modellezéshez csak azokat a mintákat vettem figyelembe, amelyeknél mindhárom alkotó a természetes háttér csoportjába tartozott.

A NETPATH futtatása során nyert modellezések eredményei

A löszös terület (II. táblázat) modellezéséhez felhasznált „fázisok” a következők: CH_2O , kalcit, dolomit, plagioklász (45% anortit – 55% albit), kálicföldpát, Ca-montmorillonit, illit, CO_2 (g), N_2 (g), ioncsere ($\text{Ca}^{2+}/\text{Na}^+$).

A NETPATH-szal számítva a löszös területre 7,179-es párolgási faktort kapunk, ami 13,9%-os csapadékeszivárgást jelent. A közel 14%-os beszivárgás picit magas, a maximális értéket jelentheti. Az elég kis anyagmozgással járó víz-kőzet

I. táblázat. A természetes háttér fontosabb alkotóinak értékei

Table I Medians of the major components of unpolluted groundwaters

Adatok	Hó	Lősz	Futóhomok
Na	0,54	13,4	9,19
K	0,21	1,6	2,87
Ca	1,27	98	87,1
Mg	0,21	44,3	25,3
Cl	1,27	9,11	5,75
HCO ₃	12,2	495	410
SO ₄	1,49	7,33	9,6
NO ₃	1,3	0,01	0,01
H ₂ SiO ₃	0,39	27,4	20,5
pH	4,8	7,85	7,86
T°C	2	17,4	10,2

kölcsönhatás reálisnak tűnik, leszámítva a relatíve nagyobb dolomitoldódást. Dolomit ugyan van a kőzetekben, és a talajvíz telítettségi indexe enyhe túltelítettséget mutat, de ilyen mértékű oldódás, ami megköveteli a CO₂ (g) beoldását is, nem valószínű. A jelentősebb dolomitoldódásra a talajvíz relatíve magasabb Mg²⁺ koncentrációja miatt van szükség.

Mivel a NETPATH egyformán definiálja a tömegegyensúly számí-

II. táblázat. NETPATH modellezés eredményei a löszös területen

Table II Results of Netpath models in the loess area

NETPATH Alkotók	Reakció típusa	1-es modell	2-es modell	3-as modell
		mmol/l		
CO ₂ (g) vagy CH ₂ O *	+	0,43492	0,38123	0,42081
Kalcit		0,02676	0,08046	
Dolomit		0,24536	0,24536	0,26580
Káliciföldpát	+	0,00033	0,00033	0,04939
Plagioklász	+	0,10502	0,01684	0,10502
Illit	-			-0,08176
Ca-Montmorillonit	-	-0,06127		-0,02339
Ionszere Ca/Na	+		0,02425	
N ₂ (g)	-	-0,01062	-0,01062	-0,01062
Evap.faktor		7,179	7,179	7,179

Reakció típusa: „+” csak oldódik, „-” csak keletkezik, „nincs jel” oldódás is - keletkezés is megengedett. Mennyiségek előjelei: „-” keletkezik; „+” (nincs jelölve) oldódik. * - CO₂(g) és CH₂O együtt

tásoknál a CO₂-ot és a szerves anyagot, nincs mód arra, hogy egyenként kövessük a két fázis mol-változásait. A II. táblázatban a CO₂ (g) vagy CH₂O megfogalmazásnál a CO₂ (g) és a CH₂O együtt értendő.

A reakció végbemehet ionszere nélkül (1-es modell) vagy ionszerével (2-es modell) is. Ha több plagioklász oldódik (1-es modell), akkor több Na⁺-ion kerül a talajvízbe, és nincs szükség a Ca²⁺/Na⁺ ionszeréjére.

A N₂ (g) keletkezés azt mutatja, hogy a csapadékbeszívargás kis mértékű denitrifikációval jár, és a felszabaduló nitrogén a rendszerből N₂ gáz formájában távozik.

Erteljesebb káliciföldpát-oldódás esetén illit is keletkezik, méghozzá nagyobb mennyiségben, mint Ca-montmorillonit, de ebben a mélységzónában e folyamat nem reális (3-as modell).

A futóhomokos terület (III. táblázat) modellezéséhez felhasznált „fázisok” a következők: CH₂O, kalcit, dolomit, káliciföldpát, K-csillám, kvarc, CO₂ (g), N₂ (g), ionszere (Ca²⁺/Na⁺).

III. táblázat. NETPATH modellezés eredménye a futóhomokos területen

Table III Results of Netpath models in the drift sand area

NETPATH Alkotók	Reakció típusa	Modell
		mmol/l
CO ₂ (g) vagy CH ₂ O *	+	0,62175
Kalcit		0,25947
Dolomit		0,22119
Káliciföldpát**	+	0,01084
Kvarc	+	0,02045
Ioncsere Ca/Na	+	0,03240
N ₂ (g)	-	-0,01066
Evap.faktor		4,530

Reakció típusa: „+” csak oldódik, „-” csak keletkezik, „nincs jel” oldódás is - keletkezés is megengedett. Mennyiségek előjelei: „-” keletkezik; „+” (nincs jelölve) oldódik. * - CO₂(g) és CH₂O együtt. ** - a víz-kőzet kölcsönhatások során teljesen megegyeznek a reakciók és a fázisok változásainak mértékei is, ha káliciföldpát helyett K-csillámot alkalmazunk a futtatás során

szerkesztésére, az ion-egyensúly- és a telítettségi index számításához, nem követelmény, hogy a SO₄²⁻-t illetve a SO₄²⁻-változás követéséhez szükséges gipszet (önálló fázisként) figyelembe vegyünk. A csapadék beszivárgása során a SO₄²⁻-tartalom nagyon kevéssé változik, és mivel ez az alkotó a reakció menetét sem befolyásolja, nyugodtan elhanyagolható.

A PHREEQCI futtatása során nyert modellezések eredményei

A löszös terület (IV. táblázat) modellezéséhez felhasznált „fázisok” a következők: CH₂O, kalcit, dolomit, albit, anortit, káliciföldpát, klorit, Ca-montmorillonit, illit, gipsz, CO₂ (g), N₂ (g), ioncsere (0,75Ca²⁺+0,25Mg²⁺/Na⁺), H₂O.

A PHREEQCI-vel számítva a reális reakciókhoz tartozó evaporációs faktorok a löszös területen 6,862 és 7,896 között változnak, ami 14,57% és 12,66% közötti beszivárgást jelent. Ez (akárcsak a NETPATH számításai alapján) kicsit magasabb, mint a Dél-Dunántúl egyéb területein, vízfolyások alapvízhozamaiból számított, 8-9%-os beszivárgási értékek (TÓTH et al. 1997). Amennyiben elfogadjuk, hogy a klorid egy konzervatív alkotó és a szűrt adatok a természetes hátteret képviselik, akkor a beszivárgás maximális értékeként a 13-15%-ot is el kell fogadni.

A NETPATH-szal ellentétben a PHREEQCI képes külön-külön kezelni a CO₂ (g)-t és a szerves anyagot, mivel eltérő tömegegyensúly képleteket használ. Amint azt a (IV. táblázat) is mutatja, a karbonát oldódásához CO₂ (g) beoldódás kapcsolódik, és ennél másfél nagyságrenddel kisebb a CH₂O oxidálódásának mértéke.

Az 1-es és 2-es modell majdnem teljesen megegyezik. Egy apró különbség van a kettő között, mégpedig az, hogy az elsőnél a 0,25707 mmol/l dolomit mellett

A futóhomokos területen körülbelül 22% a csapadékbeszivárgás. E magasabb beszivárgási értékhez nagyobb mol-változások társulnak, mivel több csapadék jut le a talajvízig, mint a löszös területen.

A modellezés csak egy, reálisnak tűnő eredményt adott. Jelentős CO₂ (g) beoldódás és kalcit-dolomit oldódás mellett alacsony kvarc- és káliciföldpát oldódás valamint Ca²⁺/Na⁺ ioncsere szükséges a reakció végbe meneteléhez. A kis mértékű denitrifikáció során felszabaduló nitrogén itt is N₂ gáz formájában távozik a rendszerből. (Ha a plagioklász oldódása is engedélyezett, akkor felesleges illit- és montmorillonit keletkezést eredményez.)

Mivel a NETPATH önálló Fortran kódot használ az adatok betelvére,

IV. táblázat. PHREEQCI modellezés eredményei a löszös területen
 Table IV Results of PHREEQCI models in the loess area

PHREEQCI Alkotók	Reakció típusa	1-es modell	2-es modell	3-as modell	4-es modell	5-ös modell
		mmol/l			mmol/l	
CO ₂ (g)		0,46954	0,48849	0,41723	0,58232	0,58447
CH ₂ O	+	0,02617	0,02617	0,02617	0,03404	0,03404
Kalcit		0,01819		0,06175	0,27659	0,27659
Dolomit		0,25707	0,27528	0,26144		
Albit	+	0,06746	0,06746	0,03239	0,03594	0,03594
Anortit	+	0,04343	0,04343			
Klorit	+				0,04863	0,04889
Illit	-					-0,00030
Ca-Montmorillonit	-	-0,06622	-0,06622	-0,01391	-0,05717	-0,05709
Gipsz		0,00904	0,00904	0,00904	0,01049	0,01049
Ca _{0,75} Mg _{0,25} X ₂	-			-0,01753		
NaX				0,03505		
N ₂ (g)	-	-0,01047	-0,01047	-0,01047	-0,01361	-0,01361
H ₂ O		47,42	47,42	47,42	48,48	48,48
Evap.faktor		6,862	6,862	6,862	7,896	7,896

Reakció típusa: „+” csak oldódik, „-” csak keletkezik, „nincs jel” oldódás is – keletkezés is megengedett. Mennyiségek előjelei: „-” keletkezik; „+” (nincs jelölve) oldódik

0,01819 mmol/l kalcit is oldódik, míg a másodiknál a teljes Ca²⁺- és Mg²⁺-szükségletet és az ebből adódó CO₂ (g) beoldódást a dolomit oldódása biztosítja. Az 1-es modell gyakorlatilag megegyezik a NETPATH 1-es modelljével.

A 3-as modell nagyon hasonló a NETPATH 2-es modelljéhez: a mol-változások közötti különbségek minimálisak. A PHREEQCI század mmol/l Ca-montmorillonit keletkezést is számol, de ez oly kicsi, hogy eltekinthetünk tőle.

A plagioklász az adatbázisban nem szerepel önálló fázisként, hanem albit és anortit megadására van lehetőség. Új fázisként definiálható lett volna a plagioklász is, de ezt nem tartottam szükségesnek. Az 1-es és 2-es modellben az albit-anortit együttes változása a reakciók során 0,11mmol/l körüli, ami gyakorlatilag megegyezik a NETPATH 1-es modelljének plagioklász változásával. A 3-as modell csak kevés albit oldódásával számol, de még ez is több, mint a NETPATH 2-es modelljében a plagioklász oldódása. Ennek következménye a század mmol/l-nyi Ca-montmorillonit keletkezés.

Csak a 3-as modell számol ioncserével, ami duzzadó agyagásványok, pl. montmorillonit jelenlétében reális. Az ioncsere definíciójánál 0,75Ca²⁺+0,25Mg²⁺/Na⁺-t használtam, de gyakorlatilag azonos (az első három tizedesre megegyező) cserét eredményezett a Ca²⁺/Na⁺ ioncsere modellezése is.

A 12,66%-os csapadékbeszivárgásnak megfelelő 4-es és 5-ös modell szerint a beszivárgás során a fontosabb reakciók másképp is végbemehetnek. Belép a vizes rendszerbe a CO₂ (g) és oldódik a kalcit. A Mg-szükségletet nem a dolomit, hanem a klorit oldódása biztosítja.

Egyik modell sem veszi figyelembe a káliciföldpát oldódását, mivel oly kis anyagmózságról lenne szó, aminél jóval nagyobb a számítás hibája.

Gipsz nincs a közetben, de a SO₄²⁻-változás követéséhez (a NETPATH-szal ellentétben) szükség van ennek beiktatására. Beoldódása (0,009-0,01 mmol/l) oly minimális, hogy ennél a csapadék SO₄²⁻ változékonysága nagyobb eltérést okozhat.

V. táblázat. PHREEQCI modellezés eredménye a futóhomokos területen

Table V Results of PHREEQCI models in the drift sand area

PHREEQCI Alkotók	Reakció típusa	1-es modell	2-es modell
		mmol/l	
CO ₂ (g)		0,54393	0,54238
CH ₄ O	+	0,02616	0,02616
Kalcit		0,25386	0,25541
Dolomit		0,23002	0,23002
Kálföldpát	+	0,01084	
K-csilám	+		0,01084
Kvarc	+	0,03753	0,07168
Ca-Montmorillonit	-	-0,00465	-0,01396
Ca _{0,75} Mg _{0,25} X ₂	-	-0,03536	-0,03536
NaX		0,07075	0,07075
N ₂ (g)	-	-0,01047	-0,01047
H ₂ O		43,25	43,25
Evap faktor		4,53	4,53

Reakció típusa: „+” csak oldódik, „-” csak keletkezik, „nincs jel” oldódás is – keletkezés is megengedett. Mennyiségek előjelei: „-” keletkezik; „+” (nincs jelölve) oldódik

A számításokhoz egyik modellnek sincs szüksége gipszre, mivel a szulfát-változás mértéke a hibahatár alatt marad. A csapadékbeszivárgás során nincs reális, klorit oldódásával járó folyamat.

Értékelés

A vizsgált térség talajvize tipikus dombvidéki, Ca²⁺-Mg²⁺-hidrogénkarbonátos. Ugyan a talajvíz nem szennyezett egységesen, de jelentős a bel-területekhez kapcsolódó szennyezés.

A PHREEQCI-s inverz modellezés eredményei nagyon közel állnak a NETPATH-szal kapottakhoz. A PHREEQCI-ben több paramétert (elemzések százalékos hibahatárait, csak egy adott elem koncentrációjának bizonytalansági értékét, mol-változások tolerancia értékeit stb.) állíthatunk be, mint a NETPATH-ban, ami a felhasználótól függően könnyíti vagy nehezíti az értékelést. Célszerű a potenciális víz-kőzet kölcsönhatásokat először a NETPATH-szal megvizsgálni, és utána térni át a PHREEQCI futtatására.

A löszös területeken lejátszódó folyamatok modellezése során kapott, átlagosan 12–15%-os beszivárgások nem teljesen vágnak egybe a Dél-Dunától egyéb dombvidékein, vízfolyások alapvízhozamaiból számított beszivárgási értékekkel; maximális csapadékbeszivárgási értékeknek tekinthetők. A futóhomokos területeken a 22% körüli csapadékbeszivárgás teljesen reális.

A csapadékbeszivárgás során a két területtípuson hasonlóak a víz-kőzet kölcsönhatások. A jelentősebb CO₂ (g) beoldódás és kalcit- dolomit-oldódás, valamint a N₂ gáz keletkezésével járó denitrifikáció mindkét területre jellemző (APPELO & POSTMA 1993).

Az eltérések a következők:

A futóhomokos terület (V. táblázat) modellezéséhez felhasznált „fázisok” a következők: CH₂O, kalcit, dolomit, kvarc, kálföldpát, K-csilám, klorit, Ca-montmorillonit, gipsz, CO₂ (g), N₂ (g), ioncsere (0,75Ca²⁺+0,25Mg²⁺/Na+), H₂O.

A PHREEQCI modellezés 1-es modellje gyakorlatilag azonos a NETPATH futtatása során kapott eredménnyel. Csak néhány század mmol/l eltérés figyelhető meg a CO₂ (g) és a Ca-montmorillonit beoldódása, illetve keletkezése során.

Ha a K-szükségletet a kálföldpát helyett K-csilám oldódása biztosítja (2-es modell), több kvarc oldódik és több Ca-montmorillonit keletkezik. A reakciók során bekövetkező változások egyébként teljesen megegyeznek.

- a löszös területen plagioklász oldódik, míg a futóhomokon kvarc,
- a jelentősebb csapadékbeszivárgásból adódóan a futóhomokos területen több kalcit oldódik, mint a löszökön,
- a futóhomokos területen közel két nagyságrenddel több kálföldpát oldódik, mint a löszön,
- a futóhomokos területen a beszivárgás mindenképp ioncserével jár, míg a löszös területen, (több plagioklász oldódásával számolva) a víz-kőzet kölcsönhatás ioncsere nélkül is reális.

Mivel a természetes háttér csoportja a gondos válogatás ellenére is tartalmazhat némi humán eredetű szennyezést, ezért a modellezett víz-kőzet kölcsönhatások is hordozzák ezt a hibalehetőséget. A hibahatár nem haladja meg a 10%-ot.

Az eredmények megbízhatóságát és pontosságát növelné, ha izotópos adatok is rendelkezésünkre állnának.

Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom HORVÁTH Istvánnak munkám folyamatos támogatásáért és tanulmányom lektorálásáért, valamint FÜGEDI Ubulnak a kézirat lezárásában nyújtott segítségével. Köszönet illeti MÁDLNÉ SZÖNYI Juditot lektori észrevételeiért, SZILÁGYI Ferencet a mintagyűjtésben nyújtott segítségével és BOZÓ Lászlót, amiért lehetővé tette számomra a Meteorológiai Szolgálat síófoki állomásán gyűjtött csapadékvíz adatok felhasználását.

Irodalom – References

- APPELO, C. A. J. & POSTMA, D. 1993: *Geochemistry, groundwater and pollution*. – A. A. Balkema, Rotterdam, 536 p.
- CHIKÁN G.-né (összeállító) 1996: Szigetvár (803). Dél-Dunántúl Földtani Térképsorozata. – 1996. Kézirat, MÁFI, Somogy-Baranya Projekt Jelentéstára.
- GLYNN, P. D., PLUMMER, L. N., PARKHURST, D. L., & RÉVÉSZ, K. 1997: Ground water modeling short course. Principles and Applications of Modeling Chemical Reaction in Ground Water. – Lecture Notes 1–2, Eötvös Loránd University, Budapest.
- HORVÁTH, I., DEÁK J., HERTELENDI, E. & SZÓCS, T. 1997: Hydrogeochemical Investigations in the Tolna Hills Area (Vízgeokémiai vizsgálatok tolnai dombvidéki területeken.) – *M. Áll. Földtani Intézet Évi Jelentése 1996/II*, 271–280.
- PARKHURST, D. L. 1995: User's guide to PHREEQC – a computer program for speciation, reaction-path, advective-transport, and inverse geochemical calculations – *USGS Water-Resources Investigations Report 95/4227*. Lakewood, Colorado, 143 p.
- PLUMMER, L. N., PRESTEMON, E. C., & PARKHURST, D. L. 1994: An interactive code (Netpath) for modelling net geochemical reactions along a flow path version 2.0. – *USGS Water-Resources Investigations Report 94/4169*. Reston, Virginia, 130 p.
- SZÓCS T. 1994: Dél-Somogy és Baranya talajvizeinek állapota, Szigetvár 803-as 1:100 000-es térképlap. – Kézirat, MÁFI Adattár.
- TÓTH, Gy., GONDÁRNÉ SÖREGI, K., ROTÁRNÉ SZALKAI, Á., HORVÁTH, I., NÁDOR, A. & SZÓCS, T. 1997: Hydrogeological conditions of the Udvari and Diósberény Sites and Their Surroundings. – *M. Áll. Földtani Intézet Évi Jelentése 1996/II*, 230–246.

Kézirat beérkezett: 2000. 10. 27.