

SZENT ISTVÁN EGYETEM



DOKTORI (PhD) ÉRTEKEZÉS

**Gázdifúzió modellezése bolygatatlan talajoszlopokban a
talajszerkezet függvényében**

Gyarmati Bernadett

Gödöllő

2013

A Doktori Iskola

megnevezése: **Környezettudományi Doktori Iskola**

tudományága: **Környezettudomány**

vezetője: **Dr. Heltai György DSc.**
egyetemi tanár, MTA doktora

Szent István Egyetem,
Mezőgazdaság- és Környezettudományi Kar
Környezettudományi Intézet
Kémia és Biokémia Tanszék

Témavezető: **Dr. Mészárosné Dr. habil. Bálint Ágnes Ilona PhD**
tanszékvezető, egyetemi docens

Szent István Egyetem,
Mezőgazdaság- és Környezettudományi Kar
Környezettudományi Intézet
Kémia és Biokémia Tanszék

Társ-témavezető: **Dr. habil. Mészáros Csaba PhD**
egyetemi docens

Szent István Egyetem
Gépészmérnöki Kar
Fizika és Folyamatirányítási Tanszék

.....
Az iskolavezető jóváhagyása

.....
.....
A témavezetők jóváhagyása

TARTALOMJEGYZÉK

1. BEVEZETÉS.....	5
2. IRODALMI ÁTTEKINTÉS	9
2.1. A transzportfolyamatok egyik legfontosabb porózus közege: a talaj	9
2.2. A röntgenes komputertomográfia áttekintése.....	11
2.2.1. A röntgensugaras szegmentációs technikákról.....	13
2.3. Gázdifúzió a talajban.....	15
2.3.1. A gáz diffúziós együtthatója a talajban és a kapcsolódó becsülő modellek	15
2.3.2. Talajtípustól függő gáz diffúziót leíró modellek bolygatott talajokra	16
2.3.3. Talajtípustól függő gázdifúziós modellek bolygatatlan talajokra	20
3. ANYAG ÉS MÓDSZER.....	23
3.1. Talajmintavétel	23
3.2. Talajelőkészítés	24
3.3. A diffúziós kísérlet	25
3.3.1. A gázdifúziós kísérlet adatfeldolgozása	28
3.4. A komputer tomográfiai mérés	30
3.5. A komputer tomográfiai mérés képadatainak feldolgozása	31
4. EREDMÉNYEK ÉS ÉRTÉKELÉSÜK	37
4.1. A talaj makropórus rendszerének analízise	37
4.2. A diffúziós kísérlet eredménye.....	53
4.3. A gázdifúzió kapcsolata a talaj paramétereivel.....	63
4.3. A klasszikus egy- és kétparaméteres relatív diffúziós tényezőt előrejelző modellek tesztelése.....	75
5. ÚJ EREDMÉNYEK.....	83
6. JAVASLATOK	85
7. ÖSSZEFOGLALÁS.....	89
8. SUMMARY	93
9. KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS	95
10. MELLÉKLETEK	97
1. MELLÉKLET: Irodalomjegyzék	97
2. MELLÉKLET: A tervezett talajmintavevő rajza és a mintavételezés folyamata.....	113
3. MELLÉKLET: Mintavételi adatok és kiegészítő vizsgálati eredmények	114
4. MELLÉKLET: Részletek DU-T minta szemcseméret-eloszlás elemzésének kiértékeléséből (Sedimat)	115
5. MELLÉKLET: A CT-vel készített felvételek dicom formátumú fájljainak módosításához és a Th ₁ küszöbérték meghatározásához írt program	117
6. MELLÉKLET: A 9. ábrában látható Pareto és a többi eloszlásfüggvény példa programja	120

7. MELLÉKLET: A függőségi kapcsolatok feltárásának alaptáblázata.....	121
8. MELLÉKLET: A többváltozós lineáris regressziós analízis Th_1 bemeneti értékekkel, első tesztmodell	123
9. MELLÉKLET: A többváltozós lineáris regressziós analízis Th_1 bemeneti értékekkel, második tesztmodell.....	124
10. MELLÉKLET: A többváltozós lineáris regressziós analízis Th_1 bemeneti értékekkel, harmadik tesztmodell.....	125
11. MELLÉKLET: A többváltozós lineáris regresszió analízis CO_2 -ra Th_1 bemeneti értékekkel	126
12. MELLÉKLET: A N_2O -ra Th_1 bemeneti értékekkel kapott legjobb modellkombinációk és a választott többváltozós lineáris regresszió analízise.....	127
13. MELLÉKLET: A CH_4 -ra Th_1 bemeneti értékekkel kapott legjobb modellkombinációk és a választott többváltozós lineáris regresszió analízise.....	128
14. MELLÉKLET: A többváltozós lineáris regressziós analízis Th_2 bemeneti értékekkel, végső tesztmodell	129
15. MELLÉKLET: A CO_2 -ra Th_2 bemeneti értékekkel kapott legjobb modellkombinációk és a választott többváltozós lineáris regresszió.....	130
16. MELLÉKLET: A N_2O -ra Th_2 bemeneti értékekkel kapott legjobb modellkombinációk és a választott többváltozós lineáris regresszió analízise.....	131
17. MELLÉKLET: A CH_4 -ra Th_2 bemeneti értékekkel kapott legjobb modellkombinációk és a választott többváltozós lineáris regresszió analízise.....	132
18. MELLÉKLET: A többváltozós lineáris regressziós analízis Th_3 bemeneti értékekkel, első tesztmodell	133
19. MELLÉKLET: A többváltozós lineáris regressziós analízis Th_3 bemeneti értékekkel, második tesztmodell.....	134
20. MELLÉKLET: A CO_2 -ra Th_3 bemeneti értékekkel kapott legjobb modellkombinációk és a választott többváltozós lineáris regresszió.....	135
21. MELLÉKLET: A N_2O -ra Th_3 bemeneti értékekkel kapott legjobb modellkombinációk és a választott többváltozós lineáris regresszió analízise.....	136
22. MELLÉKLET: A CH_4 -ra Th_3 bemeneti értékekkel kapott legjobb modellkombinációk és a választott többváltozós lineáris regresszió analízise.....	137

*Doktori disszertációm a legnagyobb szeretettel és tisztelettel
drága édesapámnak és édesanyámnak ajánlom.*

1. BEVEZETÉS

A földkéreg rétegeiben lejátszódó transzportfolyamatok igen változatosak: a kőolajkutatástól és kitermeléstől kezdődően a természetes-, és műtrágyák alkalmazásainak folyamatai mind ebbe a témakörbe sorolhatók. Ezen belül a földkéreg legfelső, termékeny rétegének, azaz a talaj mindenkori állapotának ismerete nélkülözhetetlen az összetett energetikai, mezőgazdasági és/vagy környezeti jellegű feladatok sikeres megoldásához. Így a határfelületen és a felszín alatt zajló anyag és energiaáramok feltérképezésének szerves része a porózus közegekben zajló csatolt transzportfolyamatok kísérleti és elméleti vizsgálata, valamint számítógépes szimulációval történő tanulmányozása. Ez egy teljesen nyitott kutatási terület számos megválaszolatlan kérdéssel és új modellezési módszerek fejlesztésének és alkalmazásának lehetőségeivel. Például a legaktívabban kutatott területek közé tartozik az üvegházhatású gázok keletkezése (Bálint et al. 2009) és transzportja a talajban (Huang et al. 2002; Von Fischer et al. 2009), illetve a talajfelszín közelében (Smith et al. 2003), vagy mezőgazdasági szempontból nagy jelentőséggel bíró vízvezető képesség vizsgálat (Weller et al. 2011).

Ezekre a folyamatokra közvetlen kihatással van a talajok szerkezete. A teljes pórusrét (leggyakoribb elméleti felosztás szerint) makro-, és mikropórus hálózatokra bontható a pórusok mérete alapján. Habár a talajok makropórus járatainak aránya a teljes pórusréthez képest általában 5%-nál kevesebb (Perret et al. 1999), mégis meghatározó jelleggel bírnak a transzportjelenségeknél. A hagyományos vizsgálati módszerek nem képesek pontos jellemzést adni a makropórus rendszert érintő mennyiségi és minőségi kérdésekre. Az elterjedt indirekt módszerek (talaj vízvisszatartó-képességének vizsgálata (Stolf et al. 2011) vagy beszivárgás-mérők (infiltróméterek)) alkalmazásából csak becsülhető a makropórusok mennyisége. A vékonyréteg alapú porozitás becsülés destruktív jellege miatt szintén nem alkalmas háromdimenziós pórusgeometria feltérképezésére (Schaap és Lebron 2001).

Ezért az elmúlt évek legnagyobb hozományaként említhető a roncsolásmentes vizsgálati módszerek, mint például a computer tomográfia (CT) (Rogasik et al. 2003) vagy mágneses rezonancia (MRI) (Pohleimer et al. 2010), bevezetése és alkalmazása földtani mintákra. Ezen orvosi diagnosztikai eszközök használata tette lehetővé a pórusrét háromdimenziós feltérképezését, így

lényegesen pontosabban vizsgálható minden olyan folyamat, amelyben a talajpórusok fontos szerepet játszanak (talajlevegő, talajvíz és kemikáliák transzportja, gyökér penetráció (Jarvis 2007), élet a talajban (Capowiez et al. 1998)). Ennek ellenére még nagyon kevés tanulmány létezik, ahol nagymintákon háromdimenziós makropórus jellemzést végeztek (Luo et al. 2008), mivel a módszer alkalmazása még közel sem kiforrott és meglehetősen költséges. Ezért maga a vizsgálati módszer nyújtotta lehetőségek és korlátok pontos feltárása is aktív kutatási terület, azonban annyi biztosan elmondható, hogy a roncsolásmentes talajszerkezet feltérképezés meghatározó szerepet kap a jövőbeni talajtani kutatások során.

Jelen dolgozatom keretében egy környezetvédelmi szempontból igen fontos részt ragadtam ki az áramlástani problémák közül: bolygatatlan talajoszlopok segítségével vizsgáltam a diffúzió alakulását a talajszerkezet tulajdonságainak tükrében.

- A vizsgálathoz szükséges adatok előállítása dolgozatom első lépése és egyben első célkitűzése is volt. Az adatok előállítását egy sajáttervezésű kísérleti rendszer, illetve egyedi műszeres kombináció alkalmazásának segítségével oldottam meg. A kísérlet felépítését úgy terveztem meg, hogy az a doktori munkámmal párhuzamosan folyó projektekben szereplő konvekciós kísérleti rendszerrel (Nagy et al. 2011) és annak elméleti vizsgálatával Mészáros et al. 2011, Kirschner et al. 2007, Gyarmati 2006), illetve a talaj folyadékvezetést és -visszatartást vizsgáló berendezéssel (Weller et al. 2011) összeilleszthető legyen.

A munka első felében nyolc, különböző textúrával rendelkező, 180 mm átmérőjű és 350 mm hosszúságú talaj monolitokat alkalmaztam. A talajokat a legáltalánosabb áramlástani paramétereinek meghatározása, sterilizése, majd kísérleti előkészítése után folyamatos gázellátással rendelkező gázdiffúziós rendszerrel kapcsoltam össze, amely segítségével nyomon követtem 80 mm-es lépésközökkel a gázkoncentráció változást, illetve az adott talajból eltávozó gázmennyiséget a kísérleti ciklus alatt. Ezek után komputertomográfias vizsgálat (továbbiakban: CT) segítségével nagyfelbontású vékonyréteg felvételek készültek a talajszerkezetről.

A kísérleti szakasz befejezésével kutatásom céljait az alábbi pontokban határoztam meg:

- A tomográfias képadatbázis szegmentálása a vizsgálat legkritikusabb, kulcsfontosságú lépése, amely nem csak a jelenlegi talajtani kutatást tekintve, de orvosdiagnosztikai

szempontból is egyaránt igaz. Azonban amíg a gyógyászatban egységesen bevezetett és elfogadott módszereket alkalmaznak, addig geológiai mintaanyagok szegmentálására nincs jól bejáratott módszer. Így a talajtani adatok szegmentálására ajánlott küszöbérték definiálási módszerek közül három vizsgálatát választottam kutatási céloknak. Ezeknél is elsősorban a következő pontban meghatározott talajkarakterisztikára gyakorolt hatásvizsgálatára helyezve a hangsúlyt.

- A talaj makropórus terének vizualizációja, és CT-s adatmátrix alapján átfogó jellemzése korszerű képfeldolgozó szoftver segítségével. A talaj-karakterisztikát a következő tulajdonságok meghatározása ölelte fel: teljes makroporozitás, effektív porozitás, átlagos makropórus méret és átmérő, teljes pórusfelület, makropórus hálózat sűrűsége, tekervényesség, elágazási pontok sűrűsége és a talaj póruster vázszerkezetének előállítása. A kutatás jelentőségét az adta, hogy a legtöbb talajdiffúziós kísérletben 200 cm^3 , vagy annál kisebb bolygatatlan mintákat használnak, amelyek nem képesek a talaj természetes heterogenitását reprezentálni. Ezért a nagyobb talajmonolitok háromdimenziós rekonstrukciójából származó adatbázisok különösen nagy értéket képviselnek.
- Szintén célom volt a számítógépes háromdimenziós rekonstrukcióból származó adatelemzésen keresztül rálátást nyerni az adott talajszöveti struktúra jellemzőire és gáz alakú áramlástan hatására, vagyis a diffúziós kísérleti eredményekből származtatott relatív gázdifúziós együtthatók kapcsolatának vizsgálata talajkarakterisztikákkal. Itt azonban szeretném kihangsúlyozni, hogy ilyen jellegű kísérletkombináció csak nagyon ritkán fordul elő a szakirodalomban, így ennek a feladatnak a lényege egy új út és egyben egy új elemzési lehetőség bemutatása volt. Ezért ez a célkitűzés nem foglalta magába az elemzett talajok transzportképessége és talajkarakterisztikai összefüggéseinek bemutatását talajgenetikai besorolás szerint (amely feladat költségvetésében messze túlmutatna a rendelkezésre álló lehetőségeken).

A vizsgálat megvalósítása azt a hiányt próbálja pótolni, amely abból fakad, hogy a talajok transzportképességét vizsgáló komputer tomográfias kutatások súlypontja jelentősen eltolódott a hidraulikus vezetőképesség vizsgálatok irányába.

- A talajok relatív gázdifúziós együtthatójának becslése a globális klímaváltozáshoz hozzájáruló talajból származó üvegházhatású gázok miatt egyre jobban előtérbe kerül. Ezért kiemelten fontosnak tartottam a kísérleti eredményeim alapján azoknak a

talajtulajdonságoknak a körvonalazását, amelyek szignifikáns kapcsolatban vannak a talaj gázdifúziójával. Továbbá ehhez kapcsolva feladatul tűztem ki a széles körben elterjedt, diffúziót becslő modellek tesztelését a három különböző szegmentálási technikából származó bemeneti adatokkal.

2. IRODALMI ÁTTEKINTÉS

2.1. A transzportfolyamatok egyik legfontosabb porózus közege: a talaj

„Ne feledd, hogy a talajon nem csak állsz, hanem élsz is!” (Stefanovits Pál)

A földkéreg legkülső, laza rétege, minden földi élet alapja. Fizikai, kémiai és biológiai tulajdonságain keresztül olyan létfontosságú dolgokat szabályoz, mint például a természetes napi hőmérséklet-dinamika, üvegházhatású gázok emissziója, mezőgazdasági területek vízmegtartóképessége, kémiai anyagok transzportja a felszíntől egészen a talajvízig, és még sorolhatnánk.

Tehát, ha a talajban zajló transzportfolyamatok vizsgálata a cél, akkor egy olyan kihívással találjuk magunkat szemben, ahol a közeget alkotó szerves összetevők és ásványi társulások keverékének minősége közvetlenül kihat az anyag- és energiaáramlás dinamikájára. Ezért a talaj még napjainkban is aktív kutatási területet biztosít „legegyszerűbb”, egyfázisú (teljesen száraz talaj) állapotában is. Modellezési szempontból a talaj részlegesen telített állapotában még nehezebben kezelhető, mivel olyan többfázisú rendszernek tekinthető, ahol a talaj telítettségének foka, a pórusok geometriája (beleértve ebbe a pórusméret-eloszlást, pórustér topológiát és belső kapcsolathálót, vagy interkonnektivitást (Vogel 2000, Mecke és Stoyan 2002)), kapcsolathálója és tekervényessége (Bear 1972, Moldrup et al. 2001) közvetlen hatással van az átviteli tényezőkre.

A gyakorlatban ez annyit jelent, hogy a talaj textúrája már körvonalazza a benne található pórusok minőségét (például telített; telítetlen) és mennyiségét, de a fizikai féleség meghatározása csak általános következtetések levonására elegendő (amely akár a talaj heterogenitásának figyelmen kívül hagyásával félrevezető is lehet). Például egy agyagtalajnál a rendkívül tömör szerkezet, ami abból adódik, hogy az apró agyagszemcsék már minimális nedvesség hatására is megduzzadnak és kitöltik a talajhézagokat, gátolja a talajvíz transzportját és a talajlevegő bejutását. Ennek ellentéte a homoktalaj, ahol a mikro- és makroaggregátumok képződésének hiánya miatt nem differenciálódnak a nagy pórushálózatok, így az ilyen talajok jellemzően nagy vízáteresztő képességgel és csekély természetes tápanyagtartalommal rendelkeznek.

Modellezési szempontból az általánosabb tényezők legtöbbször kísérleti úton (az alkalmazott módszer minőségének függvényében) makroszkopikus szinten meghatározhatók, azonban pusztán alkalmazásuk, azaz a komplex pórusgeometria áramlástan hatását figyelmen kívül hagyása, szintén félrevezető lehet (Carman 1956, Vogel és Roth 2001).

Tehát a pontosítások megtételéhez érdemes a Dullien (1992) által két kategóriába sorolt pórus szerkezeti paraméterek vizsgálata az elérhető technikai szinten. A makroszkopikus pórus szerkezeti paraméterek, mint például porozitás és effektív porozitás, áteresztőképesség vagy permeabilitás, bemeneti légnyomás, elsősorban a talaj általános viselkedését határozzák meg, míg a mikroszkopikus pórus szerkezeti paraméterek, mit például a pórustorok átmérője és hossza, a nagyobb makropórus-teret alkotó részek jellemzői.

A mikroszkopikus paraméterek meghatározása egyrészt költséges, nagyfelbontású noninvazív mérési eljárást igényel, emellett meghatározásuk elég körülményes a számtalan szabálytalan pórus geometriának köszönhetően. Ezért a pórus méret, alak, és átmérő meghatározásával megközelítőleg jellemezhető a természetes mikroszkopikus struktúra.

A talaj tekervényessége, vagy tortuozitása, egy olyan talajszövetet jellemző paraméter, amelynek következetes használata még nem kiforrott a talajtudományokban (Moldrup et al. 2001), ennek ellenére, mint majd a későbbiekben tárgyalt diffúziós modelleknél is, számtalan esetben szerepel modellparaméterként, így ismerni kell az adott esetben alkalmazott definíciót.

A pórustérfogat folytonosságának vizsgálata a következők miatt fontos: egy teljesen száraz talaj esetén a teljes pórusrendszer rendelkezésre áll a talajlevegő-gázok transzportjára, ami annyit jelent, hogy a relatív gázdifúziós együttható elsősorban a talajmátrix térbeli elrendeződésétől függ. Azonban, ha talajvíz is jelen van a vizsgálati rendszerben, lényegesen bonyolultabb modellezési probléma lép fel, hiszen a pórustérfogat csökkenés nem arányos a víz mennyiségével az úgynevezett pórusblokkolás miatt, amit akár egy egészen vékony folyadékfilm réteg is létrehozhat (Freijer 1994). Ennek eredményeként olyan pórus holtágak jöhetnek létre, amelyek a modellezési munkákban leggyakrabban alkalmazott teljes porozitásba beleszámítanak, de ténylegesen nem vesznek részt az aktív gázalakú transzportfolyamatokban. Számos kísérlet igazolta, hogy egészen alacsony víztartalom is okozhat drasztikus effektív pórustér csökkenést (Freijer 1994, Xu et al. 1992).

Összegezve, a fentiekben taglalt talajtulajdonságok mérése és figyelembevétele kiemelten nehéz feladat a már egészen kisméretű talajmintákban megjelenő heterogenitás minőségi és mennyiségi jelenléte miatt, azonban az orvos-diagnosztikai eszközök földtani mintákra történő alkalmazása, illetve a vizsgálati eszközökkel karöltve fejlődő digitális képfeldolgozás és képanalízis technikák a talajmorfológia ugrásszerű fejlődéséhez is vezettek. Kezdetben kétdimenziós vizsgálatokat optikai és elektronmikroszkóppal végeztek, ahol az impregnált vékonyréteg mintákból különböző módszerekkel próbáltak talajtulajdonságokat meghatározni (például Euler-Poincaré karakterisztika (Vogel 1997, 2002, Blair et al. 2007) a talaj kapcsolathálójának jellemzésére), azonban a mágneses

rezonancia és komputertomográfia megjelenése utat nyitott a talajminták roncsolás nélküli, nagyfelbontású és háromdimenziós vizsgálatára.

2.2. A röntgenes komputertomográfia áttekintése

Sir Godfrey Newbold Hounsfield és Allan MacLeod Cormack 1979-ben orvosi Nobel-díjat kaptak a Computer Tomográfia (CT) kifejlesztéséért. A CT gyakorlati alkalmazása lényegében 1973 után elkezdődött és valamivel később megindultak a földtani anyagok komputertomográfias vizsgálatai is. Az első, talajtanhoz köthető CT-s eredményeket Petrović et al. (1982) publikálta a Soil Science Society of America Journalban, amelyben kísérleti úton megállapították a röntgensugár elnyelődése és a talajsűrűség közötti lineáris kapcsolatot.

Azóta a röntgenes CT-t már számtalan kutató alkalmazta (Taina et al. 2007) mind a talajtudományok, mind a geológia területén (Hainsworth and Aylmore 1983, Grevers et al. 1989, Heeraman et al. 1997, Simons et al. 1997, Clausnitzer and Hopmans 2000, Van Geet et al. 2000, 2001, Ketcham and Carlson 2001, Akins és Kovscek 2003, Földes et al. 2003, Taud et al. 2005, Cnudde et al. 2006, Remeysen and Swennen 2006). Ahogy a röntgensugár nyalábja keresztülhalad az anyagon, megfigyelhető a sugár intenzitásának fokozatos gyengülése az anyagot alkotó atomokkal való kölcsönhatása miatt. A CT scannerek szokásos energiaszintjénél (<1 MV), a sugár gyengülése elsődlegesen három mechanizmus eredménye: inkoherens szóródás, koherens szóródás és fotoelektronikus abszorpció (Simons et al. 1997).

Inkoherens szóródás alatt a foton energiájának részleges átadását egy elektronnak, és az alacsonyabb energiájú fotonok szétszóródását (Kak and Slaney 1988) értjük; ezt a hatást az anyag sűrűsége jobban befolyásolja, mint a tényleges rendszám (Simons et al. 1997, Mees et al. 2003, Ketcham 2005). Koherens szétszóródás a röntgen fotonjának energiavesztés-mentes irányváltása; ez a hatás erőteljesebb alacsony energiaszinteken és magas rendszámú atomoknál. Fotoelektronikus abszorpció a foton energiájának átadásából az atom számára, és egy elektron kibocsátásából áll (Murty és Devan 1997, Kak és Slaney 1988, Ketcham 2005). Ez a hatás legfőképpen alacsony energiaszinten jelentős és nagymértékben függ a tényleges rendszámtól (Carlson et al. 1999, Van Geet et al. 2000, Mees et al. 2003).

Általánosan elmondható, hogy a röntgen foton energiára való érzékenység inkoherens szétszóródás esetén a legalacsonyabb, és fotoelektronikus abszorpció esetén a legmagasabb. Ezen gyengülési

mechanizmusok komplexitása eleve kizárja a sugárgyengülés egyszerűsített értelmezését olyan heterogén anyagokban, mint például a talaj.

A monokromatikus röntgensugár nyaláb intenzitás gyengülése Beer törvényével írható le:

$$\frac{I}{I_0} = e^{-\mu h}, \quad (1)$$

ahol μ a lineáris gyengülési együttható (m^{-1}), I_0 és I a bemenő és a gyengült röntgensugár intenzitásai, és h a vizsgált objektum vastagsága. Következésképpen, a röntgensugár gyengülése, mivel μ függ az anyag sűrűségétől (ρ), a tényleges rendszámától (Z) és a beeső röntgensugár nyalábjának energiájától (E) (Denison et al. 1997):

$$\mu = \rho \left(\frac{a + bZ^{3,8}}{E^{3,2}} \right), \quad (2)$$

ahol a és b energiafüggő együtthatók.

Ahogy az egyenletből is következik, az alacsonyabb energiájú sugárzás gyengülése nagyobb, mint a magasabb energiájú sugárzásé; ez a röntgensugár energetikai összetételének a változását, „keményedését” eredményezi ahogyan az keresztülhalad az anyagon. Ezért egy vizsgált objektum gyengülési együtthatója részben függ a környezetének gyengülési együtthatójától.

A Hounsfield egység (HU, Hounsfield Unit) leírja a röntgensugár minden egyes térfogat elemre, azaz az ún. voxelre vetített gyengülését a vizsgált anyagmatrixban.

A Hounsfield skála standard nyomáson és hőmérsékleten a desztillált vízhez 0 HU értéket, a levegőhöz -1024 HU-t rendel. A kérdéses anyag HU értéke, ha μ a lineáris gyengülési együttható:

$$HU = 1000 \frac{(\mu - \mu_w)}{(\mu_w - \mu_a)}, \quad (3)$$

ahol μ_w és μ_a a víz és a levegő gyengülési együtthatója.

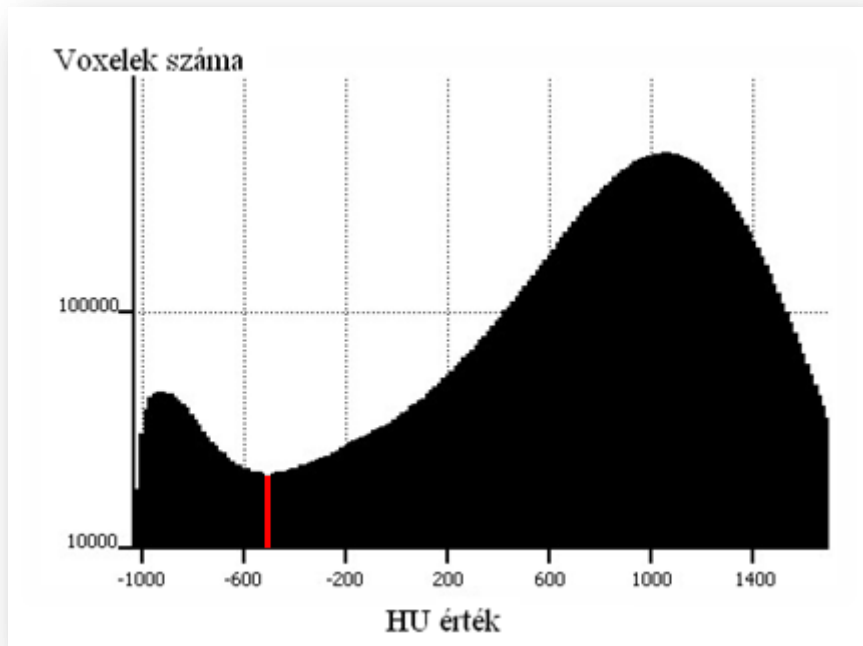
Következésképpen a CT vetület nem más, mint a gyengülési együtthatók lineáris összesítése tomografikus rekonstrukcióval (Rogasik et al. 2003).

2.2.1. A röntgensugaras szegmentációs technikákról

Ha elfogadjuk Clothier és munkatársai (2008) munkáját, mint megerősítést a transzportjelenségek és a talaj pórustér kiemelt kapcsolatáról, akkor a pórusteret definiáló szegmentációs technika megválasztása kritikus pontja minden munkának, mint azt már a bevezetőben is említettem. Szegmentálás, vagy szegmentáció alatt azt a folyamatot értjük, amelyben a CT képet legalább kettő vagy több (folyamatos) régióra, azaz a vizsgálati célnak megfelelő voxel halmazokra osztjuk (1 voxel a legkisebb térfogategység az adott vizsgálati felbontásban). Minden CT-s vizsgálatot tartalmazó munkában alkalmaznak valamilyen szegmentációs technikát, amelyet azonban időnként csekély részletességgel tárgyalnak a munka publikálása során, holott az eltérő szegmentációs módszerek, komoly eltéréseket generálhatnak a kiértékelés folyamán.

Talajtani kutatások esetén, a talaj természetéből adódóan az egyik legelterjedtebb szegmentációs módszer, a globális küszöbértékkel való szegmentálás, azaz a kétdimenziós bináris (fekete-fehér) leképezéssel készített hisztogram analízis alapján történő küszöbérték meghatározás, majd tagolás. Természetesen a hisztogram minősége, azaz a vizsgált objektum leképezésének jósága, direkt összefüggésben áll a választott felbontással, és az ehhez kapcsolható parciális térfogat hatással is. A parciális térfogat hatás olyan voxelek esetén jön létre, amelyekben kis térfogatszázalékban nagy sűrűségű anyag és nagyobb térfogatszázalékban alacsony sűrűséggel rendelkező anyag van egyszerre jelen. Ennek eredményeképpen a jelfeldolgozó processzor átlagolással próbálja meg kiegyenlíteni az egy térfogatelemet jellemző két eltérő jelet, így az információ a sűrűségkülönbség függvényében romlik, vagy teljesen elvész. Mindez a CT képen az éles, jól elválasztható határvonalak elmosódását vagy homályosságát okozza. Ezt a problémát elsősorban a felbontás növelésével lehet áthidalni.

Számos kutató választotta küszöbértékként az úgynevezett azonos valószínűségű pontot (Joschko et al. 1991, 1993, Øygarden et al. 1997, Je'gou et al. 1999, Langmaack et al. 1999), amely a két fázis Gauss-eloszlását feltételezve az üres, illetve a talajfázist reprezentáló voxelcsúcsok közötti minimum ponthoz kapcsolható HU érték (lásd 1. ábra –494 HU). Ez a módszer azonban nem biztosít kellő finomságot nagyobb érzékenységet igénylő kutatások esetén, például olyankor, amikor a transzportfolyamatoknak helyet biztosító üres fázis folytonossága kritikus jelentőséggel bír.



1. ábra: EL-T talaj hisztogram részlete, ahol a voxelek mennyiségi eloszlása a HU értékük függvényében van feltüntetve. (Az ábra Avizo Fire, evaluation version 7.0.0 programmal készült.)

A Capowiez et al. (1998) cikkében közölt módszer szerint a csúcselemzés után a $2/3*d$ feltétel alapján kapták meg a küszöbértéket, ahol d a levegőt (-978 HU) és a talajt (1048 HU) reprezentáló csúcsok közötti távolságot jelöli. Vannak olyan módszerek, amelyek a HU értéket előbb sűrűsége váltják át, majd az ebből számolt átlagos talajsűrűség 50 és 75%-ánál húzzák meg a határt (Anderson et al. 1990), Pierret et al. (2002) egy olyan makropórus (voxelcsoport) detektáló, rekurzív algoritmust dolgozott ki, amely egy új voxel befoglalását a befoglalással járó átlag szűrkeségi szint változásának nagyságához köti a már befoglalt voxelek átlag szűrkeségi szintjéhez képest. Az algoritmus kezdő pontja, illetve egy voxelcsoport lezárása után az újakezdő pontja mindig a legkisebb HU értékkel rendelkező, azaz a legvilágosabb voxel.

Ezenkívül még számos más szegmentációs technika található a vonatkozó szakirodalomban, ezért fontos megemlíteni, hogy az eltérő módszerek komoly kihatással vannak a leválasztani kívánt régiókra. Erre például Tarquis et al. (2008) szegmentációs technikákat elemző cikke kiválóan rámutat, mivel négy féle módszer alapján vizsgált pórushálózat komplexitást a küszöbérték megválasztásának módszerétől függően.

Mindaddig amíg legalább minimális szintű egységesítés nem történik a szegmentációs eljárások alkalmazása tekintetében a kutatási eredmények összehasonlíthatósága megkérdőjelezhetővé válik.

2.3. Gázdifúzió a talajban

Gázdifúzió alatt a különböző gázmolekulák keveredését értjük, amelyet a molekulák hőenergiája és kinetikus tulajdonságai határoznak meg. Keveredés közben a részecskék rendezetlen, de egyenes vonalú mozgást végeznek, átlagos sebességük szobahőmérsékleten 100-300 m s⁻¹-ig terjedhet, miközben 10⁹–10¹⁰ alkalommal változtatják meg mozgásuk irányát a részecskeütközések következtében (Várkonyi et al. 1983).

Eltekintve attól, hogy konvektív, termokonvektív (Rose és Guo 1995) és termodifúziós áramlatok is hozzájárulhatnak a talaj felső rétegében fellépő gázcsere folyamatokhoz, főleg ahol a hőmérséklet gradiens és a széles pórusok kedvező feltételeket biztosítanak, azonban a legtöbb kutató a normál diffúziót jelöli meg a talaj gázcseréjét biztosító domináns jelenségként (Richter et al. 1991, Lange et al. 2009).

A talajban a pillanatnyilag uralkodó lokális parciális nyomás és/vagy koncentráció gradiens hatására kialakuló diffúziós transzportfolyamatok biztosítják a talajpórusokon belüli, illetve a talajatmosfera határfelületen keresztül zajló gázcserét (Arah és Ball 1994, Kruse et al. 1996, Smith et al. 2003). Így a diffúziós jelenség köthető elsősorban és legáltalánosabban a talajhoz tartozó olyan gázalakú transzportfolyamatok esetéhez, mint például talajlevegőztetés és oxigénellátottság (Smith et al. 2003), vagy a talaj vaporizációja (Wuest et al. 1999, Jabro 2009), és a szerves anyagok volatilizációja (Amali et al. 1996, Petersen et al. 1996, Wang et al. 2003).

2.3.1. A gáz diffúziós együtthatója a talajban és a kapcsolódó becsülő modellek

Az első kvantitatív diffúziós leírás Thomas Graham (1850) és Adolf Eugen Fick (1855) nevéhez fűződik. Graham hidrogéngázzal végzett kísérletei során felfedezte a diffúziós fluxus és a gáz koncentráció különbség közötti arányosságot. Eugen Fick felismerte, hogy a diffúzió olyan dinamikus molekuláris folyamat, amely matematikailag a hővezetés és az elektromosság analógiájára felírható konstitutív egyenlettel mutatható be:

$$j = -D\nabla C, \quad (4)$$

ahol, j (kg m⁻² s⁻¹) az egységnyi felületen keresztül egységnyi idő alatt átjutó anyagáram-sűrűség, D (m² s⁻¹) a gáz diffúziós együttható, C pedig (kg m⁻³) az adott gáz koncentrációja.

Habár Fick I. törvénye kedvelt a különböző talajban zajló egydimenziós gázdifúziós transzportfolyamatok leírásánál, Jaynes és Rogowski (1983), Thorstenson és Pollock (1989), Webb és Pruess (2003), Milligen et al. (2005) az alkalmazhatóság korlátaira hívják fel a figyelmet.

Talajok esetén a 4. összefüggés a következőképpen írható fel:

$$j = \frac{m_g}{A_e t}, \quad (5)$$

amelyben A_e az effektív pórusok által biztosított felületet (m^2) és m_g (kg) a vizsgált diffundáló gáz mennyisége.

A talajban a gáz diffúziós együttható a D_g ($m^2_{\text{talaj gáz}} m^{-1}_{\text{talaj}} s^{-1}$) az általános gáz diffúziós együttható analógiája alapján jellemzi a porózus közeg molekuláris átteresztőképességét egy vizsgált diffundáló gázra. A legtöbb modellezési munka esetében D_g -t normalizálják az adott gázra vonatkozó azonos hőmérsékleten és nyomáson, szabad levegőben mért diffúziós együtthatóval, D_0 -lal. Így a D_g/D_0 arány, ami nem más, mint a talaj relatív gázdifúziós együtthatója, tulajdonképpen egy, a gáz tulajdonságaitól független, adott teljes (ϕ , $m^3_{\text{levegő}} m^{-3}_{\text{talaj}}$) és effektív porozitás (levegővel töltött pórustér, $\theta_{\text{levegő}}$, $m^3_{\text{levegő}} m^{-3}_{\text{talaj}}$) mellett elsősorban a talaj tulajdonságaitól függő állandó (Penman 1940, Shimamura 1992, Lange et al. 2009).

Következőkben a leggyakrabban alkalmazott, relatív gázdifúziós tényezőt (D_g/D_0) becslő modelleket mutatom be, amelyeknek irodalma szerteágazó és csoportosításuk szerzőnként eltérő. Én a Tuli (2002) által felállított csoportosítást követem, amelynek alapja a talaj szerkezet bolygatott vagy intakt állapota.

2.3.2. Talajtípustól függő gáz diffúziót leíró modellek bolygatott talajokra

A fentiek értelmében a talaj teljes, vagy összporozitása (ϕ , $m^3_{\text{levegő}} m^{-3}_{\text{talaj}}$) felírható a talaj levegővel ($\theta_{\text{levegő}}$, $m^3_{\text{levegő}} m^{-3}_{\text{talaj}}$) és a talajvízzel ($\theta_{\text{víz}}$, $m^3_{\text{víz}} m^{-3}_{\text{talaj}}$) töltött pórustérfogat összegeként:

$$\phi = \theta_{\text{levegő}} + \theta_{\text{víz}}, \quad (6)$$

Nimmo és Landa (2005) kutatása feltárta, hogy maga a porozitás, mint kifejezés Edgar Buckingham (1904) nevéhez fűződik, aki talajtani kutatómunkája során elsők között javasolt egy általános összefüggést a diffúziós együttható és a levegővel töltött pórustérfogat kapcsolatára, mely szerint:

$$\frac{D_g}{D_0} = (\theta_{\text{levegő}})^2, \quad (7)$$

ahol a kitevő a talaj tortuozítására (τ , -), azaz tekervényességére vonatkozik, és amelynek fontosságát már érintőlegesen említettem. A tekervényesség vagy más nevén még labirintusfaktor, értéke porózus közegben általában 1,25 és 5 között változik a szemcseméret-eloszlás és a szemcsék érintkezésének módja függvényében (Kovács 1998). E fogalom matematikai felírása során számos eltérő definíciót találhatunk a szakirodalomban (Epstein 1989, Moldrup et al. 2001), ennek köszönhetően általános zavart okoz a legtöbb tortuozitást tartalmazó modell összehasonlítása, kísérleti reprodukciók és tesztek során.

Az egyik legalapvetőbb leírás szerint (Carman 1937, 1956, Currie 1960, Scheidegger 1974, Ball 1981, Epstein 1989, Moldrup et al. 2001, Kristensen et al. 2010) egy egységes átmérővel rendelkező tekervényes kapilláris csőben a tortuozitás nem más, mint az átlagos kapilláris cső hosszának (L_k) aránya a diffúziós áramlás fő tengelye mentén mért porózus közeg (vagyis a talajminta) hosszával ($L_{talajminta}$):

$$\tau = \frac{L_k}{L_{talajminta}} . \quad (8)$$

1940-ben Penman publikálta prediktív modelljét, amely már figyelembe veszi a különböző telítettségi szintek hatását, így

$$\frac{D_g}{D_o} = \frac{1}{\tau_k} \theta_{levegő}, \quad 0 < \theta_{levegő} < 0,7 . \quad (9)$$

τ_k a levegő pórustérfogattól független, tortuozitáshoz kapcsolható állandót jelöl, melynek értéke megközelítőleg $\sqrt{2}$. Ennek a modellnek a kísérleti adatokra való illesztése eredményezte a klasszikus

$$\frac{D_g}{D_o} = 0,66\theta_{levegő} \quad (10)$$

kifejezést, amelyben 0,66 egy olyan univerzális tortuozitási együtthatót jelent, amely Penman szerint alkalmazható minden porózus közeg esetén. Van Bavel (1952) ugyanilyen megfontolás alapján a

$$\frac{D_g}{D_o} = 0,61\theta_{levegő} \quad (11)$$

összefüggést javasolja. Későbbi vizsgálatok felhívták a figyelmet ezen modellek alkalmazhatóságának korlátaira, mivel a levegővel töltött pórustérfogat növekedésével, például a talaj száradása esetén, a tortuozitás értékének csökkenése várható (Hillel 1998, Xu et al. 1992), így a modell becslését tesztelő kísérletek a tortuozitást reprezentáló állandó érték miatt a modell jelentősen túlbecsüli a diffúziós együttható értékét (Moldrup et al. 2004).

Marshall (1958, 1959) a levegő fázis kontinuitás hatását vizsgálta a konduktivitásra. Kísérleti eredményei alapján javasolta a Penman modell módosítását:

$$\frac{D_g}{D_o} = (\theta_{\text{levegő}})^{\frac{3}{2}}, \quad (12)$$

amelyben a gáz fázis diszkontinuitása megjelenik a 0,66 állandó cseréjével $\theta_{\text{levegő}}^{\frac{3}{2}}$ -re, amennyiben feltételezzük, hogy a porózus közeg egyenlő átmérővel rendelkező kapilláris pórusokból áll.

Millington (1959) szintén a konstans tag módosításával próbálta a modell alkalmazhatóságát kiterjeszteni, úgy hogy a tortuozitási együtthatót a talajlevegő porozitása függvényében írta fel:

$$\tau_k = \frac{1}{\theta_{\text{levegő}}^{\frac{1}{3}}}, \quad (13)$$

$$\frac{D_g}{D_o} = (\theta_{\text{levegő}})^{\frac{4}{3}} \quad (14)$$

Így azonban magas effektív pórusterfoggattal rendelkező talajok esetén a modell túlbecsüli a diffúziós együttható értékét a mért kísérleti értékekhez képest.

Hasonlóképpen Currie (1960) is a talaj levegőtartalmához kapcsolta a diffúzió mértékét. Azonos méretű részecskékből álló porózus közegeken végzett kísérletei alapján a következő összefüggést vezette be:

$$\frac{D_g}{D_o} = \varphi(\theta_{\text{levegő}})^{\xi}, \quad (15)$$

ahol $\varphi(\leq 1)$ a teljes porozitástól függő paraméter és $\xi(\geq 1)$ a szemcsés anyagnak megfelelő állandó, jellemezve ezzel a kialakult póruster mértékét. Habár a modell elsősorban alacsony porozitással rendelkező talajok esetén ad pontosabb becslést, olyan esetekben, amikor nedvesség hatására megváltozik a talaj levegővel töltött pórusok geometriája (például magas agyagtartalom esetén), nem alkalmazható. Alacsony telítettség esetére, amikor a legtöbb makropórus szabadon átjárható, Currie (1961) a következő összefüggést javasolja:

$$\frac{D_g}{D_{mp}} = \left(\frac{\theta_{\text{frac.levegő}}}{\theta_{mp}} \right)^g, \quad (16)$$

ahol g a részecske alakot jellemző állandó, D_{mp} az olyan állapotra jellemző diffúziós együttható, amikor csak a makropórusok által képzett pórusterfogatot (θ_{mp}) tölti ki a talajlevegő. $\theta_{\text{frac.levegő}}$ pedig a töredékes levegő térfogat.

Lai et al. (1976) az eddigi modellek felépítéséhez hasonlóan állították fel a diffúzió leírására vonatkozó összefüggésüket, amelyet in situ, természetes struktúrával rendelkező talajba injektált

oxigén koncentrációmérésekre alapoztak, majd bolygatott szerkezetű homokos vályog talajmintákon teszteltek:

$$\frac{D_g}{D_o} = (\theta_{\text{levegő}})^{\frac{5}{3}}. \quad (17)$$

Ezzel a modellel lényegében lezárult a kizárólag levegő porozítására alapozott, úgynevezett első generációs becselő modellek csoportja.

A következő generációs modellek többnyire tapasztalati vagy mechanikusan megalapozott nemlineáris modellek, amelyekben a talaj levegőtérfogat-tartalma mellett a teljes porozitást is figyelembe veszik.

Azon feltételezés mellett, hogy az összes levegővel töltött pórustér egyenlő mértékben hozzájárul a diffúzióhoz, Millington és Quirk (1960) a következő összefüggést javasolja a relatív diffúziós hányados leírására a teljes porozitás figyelembevételével:

$$\frac{D_g}{D_o} = \frac{(\theta_{\text{levegő}})^2}{\phi^{\frac{2}{3}}}. \quad (18)$$

Ez a népszerű modell évtizedeken keresztül nyújtott vizsgálati alapot a diffúziós kísérletek körében. Ezért számos kutató használta összehasonlításra más diffúziós modellekkel (Sallam et al. 1984, Collin és Rasmuson 1988, Xu et al. 1992, Petersen et al. 1994, Washington et al. 1994, Jin és Jury 1996, Moldrup et al. 1996, Moldrup et al. 2000). Így a vizsgálatok általános eredményeképpen elmondható, hogy a modell számos esetben szignifikánsan alábecsüli a diffúzió mértékét, azonban szitált talajminták esetén jó közelítést ad (Jin és Jury 1996).

A szintén Millington és Quirk (1961) által javasolt következő összefüggés

$$\frac{D_g}{D_o} = \frac{(\theta_{\text{levegő}})^{\frac{10}{3}}}{\phi^2} \quad (19)$$

szignifikánsan pontosabb becslést végez a mért értékekhez viszonyítva (Jin és Jury 1996), elsősorban bolygatott talajokban alacsony levegővel töltött pórustérfogat esetén (Sallam et al. 1984). Troeh et al. (1982) két empirikus talajspecifikus paramétert tartalmazó összefüggést javasol:

$$\frac{D_g}{D_o} = \left(\frac{\theta_{\text{levegő}} - u}{1 - u} \right)^z, \quad (20)$$

ahol u azt a levegővel töltött térfogattartalmat jelenti, amely nem folytonos a talaj levegő fázisával (például holt pórustérbe szorult, vízhártyával leválasztott légtér). Ennek értelmében, ha

$$\theta_{\text{levegő}} = \phi, \quad (21)$$

akkor u megszűnik. A hatványkitevőben szereplő z paraméter a függvény görbületét szabályozza és a közeg tekervényességét képviseli a modellben. Annak ellenére, hogy ez az összefüggés képes a kísérleti adatok egyik legpontosabb leírására, Petersen et al. (1994) és Jin és Jury (1996) hiányolja a két paraméter világos kapcsolatát az egyértelműen mérhető talajtulajdonságokkal, így a modell prediktív alkalmazhatósága megkérdőjelezhető.

2.3.3. Talajtípustól függő gázdifúziós modellek bolygatatlan talajokra

Az ebbe a csoportba sorolható modellek legnagyobb kérdése, hogy hogyan lehet egy talajtípust jellemző geometriai komplexitást egy egyszerűsített leírásként prezentálni. Arah és Ball (1994) egy funkcionális modelljavaslat keretében három kategóriába sorolta $\theta_{levegő}$ -t, miszerint (1) térrész, amely közvetlenül hozzájárul a diffúzióhoz (arteriális porozitás), (2) térrész, amely a koncentráció gradiensre merőleges irányú diffúzióhoz járul hozzá (marginális porozitás), és (3) a teljesen elzárt pórustér. Azonban a talaj porozitását a fenti kategóriába sorolni legalább olyan nagy kihívás, mint magát a diffúziós képesség és porozitás kapcsolatát pontosan definiálni, annak ellenére, hogy 1994-hez képest már jelentős előrelépések történtek háromdimenziós talaj-pórustér vizuális interpretációkban.

Moldrup és munkatársai (1996) a következő Campbell-féle (1974) talaj vízvisszatartó képességére alapozott modelljéhez nyúltak vissza

$$h = h_l \left(\frac{\theta_{víz}}{\theta_{tvíz}} \right)^{-b}, \quad (22)$$

amelyben h a kapilláris nyomásmagasság (m), h_l levegő bemeneti nyomásmagassága (m), $\theta_{tvíz}$ teljes telítettség esetén a pórusokat kitöltő vízmennyiség ($\text{m}^3_{\text{talajvíz}} \text{m}^{-3}_{\text{talaj}}$), illetve b a talajvíz karakterisztikát jelölő görbe meredeksége a $\log(h/h_l)$ - $\log(\theta_{víz})$ koordináta rendszerben.

Így a Moldrup által javasolt modell, amely referencia pontként a legmagasabb levegő telítettséggel szolgáló állapotot jelöli meg, a következő összefüggést javasolja:

$$\frac{D_g}{D_0} = \left(\frac{\theta_{levegő}}{\theta_{tlevegő}} \right)^\delta, \quad (23)$$

ahol $\theta_{tlevegő}$ a talaj legmagasabb ($\text{m}^3_{\text{levegő}} \text{m}^{-3}_{\text{talaj}}$) levegőtartalom térfogatát jelöli, mint illesztő pont, δ egy talajtípustól függő kitevő, amely elsősorban a pórustér kapcsoltságát és tortuozitást reprezentálja, és amelyet saját kísérleti adataik alapján

$$\delta = 1,5 + \frac{3}{b}, \quad (24)$$

egyenlettel definiáltak. Az egyenlet 1,5 tagja elsősorban az átlag tortuozitást jelöli, míg $3/b$ a pórusok vízáteresztő képességére utal.

Moldrup és kutató csoportja (1997) szintén javasolta a már bemutatott Millington és Quirk (1961) és Penman (1940) modellek kombinációjaként az úgynevezett PQM modellt, amely szerint:

$$\frac{D_g}{D_0} = 0,66\phi \left(\frac{\theta_{levegő}}{\phi} \right)^{\frac{12-d}{3}}. \quad (25)$$

Ebben a kifejezésben d értéke a bolygatott és bolygatatlan talajok közötti eltérő pórusminőséget reprezentálja és a kísérleti adatokra történő illesztés után intakt talajok esetén hatot, bolygatott, szitált talajoknál pedig hármat javasol. A PQM modellt a legjobb modellek között tartják számon. További kísérletek során a modellbecslés jóságát a -100 cm H₂O mátrix potenciálhoz kapcsolható referencia pont bevezetésével fejlesztették tovább (Moldrup et al. 1999, Tuli 2002, Tuli et al. 2005), azonban ez a modell még mindig nem volt alkalmas általános összefüggések leképezésére, ezért Moldrup et al. (1999) újragondolta az összefüggést teljesen száraz talajok esetén. Ennek eredményeként született meg Buckingham–Burdine–Campbell (BBC) modell, amely szerint:

$$\frac{D_g}{D_0} = \phi^2 \left(\frac{\theta_{levegő}}{\phi} \right)^{2+\frac{3}{b}} = \frac{\theta_{levegő}^{2+\frac{3}{b}}}{\phi^{\frac{3}{b}}}. \quad (26)$$

Arra az esetre ha b nem lenne ismert, alkalmazható Buckingham-féle talaj textúra modell, miszerint

$$\frac{D_g}{D_0} = \phi^2 \left(\frac{\theta_{levegő}}{\phi} \right)^{\Omega(HV)}, \quad (27)$$

amelyben HV a homok és vályogtartalom összesített értékét, valamint Ω egy talajtípus függő, empirikus paraméter, és amelyet a vonatkozó szakirodalom alapján kell meghatározni. Ennek értelmében a modell kalibráció elengedhetetlen.

A következő modell szintén azon alapul, hogy Moldrup et al. (2000) erős korrelációt talált -100 cm H₂O mátrixpotenciálon mért makroporozitás (munkában alkalmazott definíció szerint, pórusátmérő > 30 μm) és a talaj gázdifúziója között:

$$\frac{D_{g(100)}}{D_0} = 2\phi_{100}^3 + 0,04\theta_{levegő100} \left(\frac{\theta_{levegő}}{\theta_{levegő100}} \right)^{\frac{2+3}{b}}. \quad (28)$$

A modellt 0,1-től 0,37 m³ levegő m⁻³ talaj porozitás mellett tesztelték bolygatatlan agyagos-vályog talajokon, és b a már ismertett Campbell modelltől a talaj vízvisszatartó képességét jelöli.

A relatív diffúziós együttható és porozitás összefüggését tovább kutatva Moldrup et al. (2005) megalkotta az úgynevezett 3POE modellt (Three-porosity-encased):

$$\frac{D_g}{D_0} = \phi^2 \left(\frac{\theta_{\text{levegő}}}{\phi} \right)^{2 + \frac{\log\left(\theta_{\text{levegő}100}^{\frac{1}{4}}\right)}{\log\left(\frac{\theta_{\text{levegő}100}}{\phi}\right)}}. \quad (29)$$

A modell ugyan új, a -100 H₂O mátrixpotenciálon mért porozitás értékre alapoz és szerkezetében megfelel a Buckingham-féle talaj textúra modellnek.

A relatív diffúziós együttható leírására szolgáló összefüggések felsorolását még tovább lehetne folytatni, azonban az új generációs modellek több esetben olyan bemeneti paraméter igényvel rendelkeznek, ami miatt használatuk a gyakorlati alkalmazásokban nem terjedt el.

Ennek ellenére számos tanulmány konklúziójában megjelent az igény a modellek pontosítására, a talaj pórus karakterisztika valamilyen formájú beépítésére (Freijer 1994, Moldrup et al. 2004, 2005, Tuli et al. 2005, Lange et al. 2009), amely a talajok egyértelmű eltéréséből adódó gázdifúziós különbségek kezelését segítené. Lange et al. (2009) kiemeli, hogy a talajok közötti D_g/D_0 különbség nem vezethető vissza egyértelműen a leggyakrabban alkalmazott modellparaméterek (Φ , $\theta_{\text{víz}}$, $\theta_{\text{levegő}}$) változatosságára. Kísérleteimben ezt a kérdést is megvizsgáltam, amelyet a későbbiekben részletezek.

3. ANYAG ÉS MÓDSZER

3.1. Talajmintavétel

A kutatási céloknak megfelelően összesen 8 darab, 350 mm magas és 180 mm átmérőjű, intakt talajoszlopot mintavételeztem egyedi mintatartó hengerek (DIN EN ISO 15493) segítségével, amelyek tervezésénél elsősorban magát a mintavételezést és a diffúziós kísérleti rendszer felépítését vettem alapul. Azonban a szabványtól eltérő mintavételi tervezés biztosította még a rendszer kompatibilitását a Helmholtz Zenter für Umweltforschung (UFZ) hallei telephelyen található talaj folyadékvezetést és -visszatartást egyidejűleg vizsgáló berendezéssel (MSO, multi-step-outflow), illetve a potsdami Leibniz-Institut für Agrartechnik (ATB) kutatóközpontban felállított konvekciós kísérlettel.

A mintavételi henger ábrája a 2. mellékletben látható.

A mintavétel helyén az adott vegetációtól függően óvatosan eltávolítottam a talaj felszínén felhalmozódott szerves maradványokat, erdős vegetáció esetén körülbelül a felső 100 mm-es réteget (2. melléklet). Az eredeti struktúra megőrzése érdekében a 45 fokban levágott él mentén fokozatosan eltávolítottam a talajt, amíg a mintatartó függőleges elmozdulása kezdetben ellenállás nélkül, majd később minimális ellenállással elérhetővé vált. A talajminta kiemelését követően politetrafluoretilén háló (30 µm) borítást alkalmaztam a talajelmozdulás és az alsó lemorzsolódás gátlására.

A kísérleti minták közvetlen környezetéből további, 350 mm magas és 100 mm átmérőjű talajmintákat vettem a kiegészítő vizsgálatok elvégzéséhez, amelyeket alulról 100-100-100-50 mm szakaszokra vágtam fel. Erre a mintavételre azért volt szükség, mert a nagyminták jelen munkában nem taglalt, más tudományos kutatások részét is képezik, ezért a minták intakt szerkezetének megőrzése a diffúziós kísérlet után is fontos volt.

A mintavételi adatokat (mintavétel helye, mélysége), illetve a minták bemutatását (fizikai talajféleség, talaj térfogattömeg és sűrűség, szervesanyag-tartalom, szemcseméret-eloszlás) a 3. melléklet táblázata tartalmazza, amelyben a minta jelölések DU-T, EL-T, ID-T, KI-T, KO-T, LA-T, LI-T, MO-T a bolygatatlan nagymintákhoz tartoznak, míg a hozzájuk tartozó kiegészítő mintákat analóg módon kisbetűvel jelöltem.

3.2. Talajelőkészítés

Talajsterilizés:

A talajok 30 kGy erősségű gamma sugaras sterilizését (Izotóp Intézet Kft.) a mikrobiális gáztermelés, illetve a mintavétel utáni növényi és állati eredetű talajszerkezet módosulás elkerülése tette szükségessé.

A talajvíztartalom beállítása:

Mivel a talajminták különböző helyről származtak, ezért talajonként szerkezeti minőségtől és a mintavétel előtti időjárástól függően más-más nedvességtartalommal rendelkeztek a kísérlet kezdetekor. A későbbi összehasonlítás megköveteli a minták konzisztens kezelését, s így a víztartalom beállítása mind a gázdifúziós, mind a komputer tomográfias vizsgálat előtt is szükségszerű volt. Első lépésben a minták kíméletes telítését a maximális vízkapacitás eléréséig a közlekedő edények elve alapján értem el fokozatos vízszintemeléssel. A kapilláris telítés után a víztartalmat saját készítésű, sterilizett, 2500 mm magas és 400 mm átmérőjű oszlop segítségével állítottam be -200 cm mátrixpotenciálon (-19,6 kPa nyomás potenciál).

Kiegészítő vizsgálatok: talaj térfogattömeg, szerves anyag tartalom és szemcseméret-eloszlás meghatározása:

A korábban említett okok miatt a gázdifúziós kísérletben szereplő nagy monolitok szerkezetének érintetlennek kellett maradnia, ezért a kiegészítő vizsgálatokat az intakt talajminta mellől vett kis mintákon végeztem el.

Talajtérfogat tömeg meghatározása Blake és Hartke (1986) leírása alapján történt.

Schumacher (2002) leírása alapján hidrogén peroxidos roncsolás segítségével meghatároztam a szervesanyag-tartalmat.

A szemcseméret-eloszlást SEDIMAT 4-12 (Umwelt-Geräte-Technik GmbH, Müncheberg, Németország) határoztam meg DIN ISO 11277 szabvány szerint 4 frakcióra. A meghatározás menete minden talajminta esetén három ismétlésben a következőképpen zajlott:

Edényenként körülbelül 10 g, összetört, szerves maradványoktól megtisztított és 2 mm lyuksűrűségű szitán átszitált, légszáraz talajmintát mértem be. A szerves anyag eltávolításáért óvatosan 30 cm³ 30%-os hidrogén peroxidot kevertem a mintához, majd a mintát mindaddig pihentettem, míg a gázképződés teljesen abbamaradt (kb. 12 óra). A diszpergálást szabvány szerint 25 cm³ 0,4 M nátrium-pirofoszfáttal (Na₄P₂O₇ · 10 H₂O) végeztem, amely hozzáadása után a mintát körülbelül 200 cm³-re töltöttem fel desztillált vízzel és 8 órán keresztül rázógéppben rázattam. A

rázatás után a mintát a műszerhez tartozó mérőhengerbe töltöttem át és feltöltöttem 1000 cm^3 -ig.

A minta felkeverését és elválasztását innentől a gép végezte, amely beállított programja szerint a $\leq 63 \mu\text{m}$ frakció meghatározásához pontosan 57 másodperc után 20 cm mélységből, majd újabb keverés után a $\leq 20 \mu\text{m}$ frakció meghatározásához 9 perc 23 másodperc után vett mintát. A $\leq 6.3 \mu\text{m}$ frakció meghatározásához pontosan 44 perc után 10 cm mélységből, illetve újabb keverést követően az agyaggal teli szuszpenzióból, $\leq 2 \mu\text{m}$, 2 óra 13 perc és 56 másodperc után 4 cm mélységből vett mintát a gép. A mintasorozatot frakciók szerint csoportosított, csiszolatos fedővel ellátott üvegedényekbe töltötte, amelyek tömegét még az elválasztás megkezdése előtt négytizedes pontossággal lemértem. Ezek után a mintákat $105 \text{ }^\circ\text{C}$ fokra beállított szárítószekrénybe tettem és teljes kiszáradásuk után exszikkátorban hagytam őket kihűlni, majd $0,0001 \text{ g}$ pontossággal lemértem tömegüket. Mivel a diszpergáláshoz használt nátrium-pirofoszfát a szárítás során kikristályosodik, így a szisztematikus mérési hiba elkerülése végett minden negyedik próba vak oldatot tartalmazott, amely értékével a kiértékelés során korrigáltam. A mérőhengerben maradt próbaoldatot nedves szitálással fracionáltam ($0,063$; $0,2$; $0,63 \text{ mm}$).

A kiértékelés végső lépéseinek egyes részletét a 4. mellékletben található DU-T mintához tartozó táblázatok és ábra mutatja be.

3.3. A diffúziós kísérlet

A talajminták előkészítése a diffúziós kísérlethez:



A mintákat szilikon tömítő anyag (Ceresit Sanitär Silikon) segítségével egy erre a kísérletre tervezett és (MSO kísérlettel összeilleszthető) műanyag alapra gáztömören rögzítettem. Ez az alapzat egy öblös belső térrel és egy alsó, zárt csőelvezetéssel rendelkezik, amelyek funkciója egyrészt a gázok egyenletes és nagyfelületű talajra történő bevezetésének biztosítása, illetve a kísérlet közben alul felgyülemelő víz elvezetése volt. Ezek után a mintavételi henger kialakításának megfelelően, 80 , 160 , 240 , és 300 mm magasan 120 fokos eltolással 4×5 mintavételi helyet készítettem. A

2. ábra: A talajminta kísérlet előtti felépítése

mintavételi hely alul vágott, eredetileg 20 cm³-es mintavevő üvegből áll (WIC 43220, WICOM, Németország).

Ezeket illesztettem a talajba, majd felülről WICOM 20 mm-es alumíniumkupakkal rögzíthető szürke butilgumi szeptumokkal (WIC 43699, WICOM Németország) zártam. A mintavételt szolgáló üvegeket szintén szilikon ragasztóval rögzítettem. Továbbá három ragasztás nélküli mintavételi helyet telepítettem a talaj felszínére. A talajminta kísérlet előtti felépítését a 2. ábra mutatja, ahol látható a mintavételi pontok jelölése is: 120 fokos eltolással X, Y, Z irányban, az A - 80 mm, B -160 mm, C -240 mm, D -300 mm magasan, E pedig a talajminta tetején lévő mintavételi helyet jelöli.

A diffúziós kísérleti rendszer leírása:

A kísérletben két gáztartályt alkalmaztam. Az első esetben, a folyamatos gázellátást biztosító standard gáztartály (DIN ISO 6141, Linde) tartalmát az 1. táblázat mutatja (273,15 K; 101325 Pa).

1. táblázat: A standard gáztartály tartalma

NÉV	ELŐÍRT ÉRTÉK (cm ³ m ⁻³)	TÉNYLEGES ÉRTÉK (cm ³ m ⁻³)	MÉRÉSI BIZONYTALANSÁG, REL. (%)
CH ₄	0,35	0,36	± 10
N ₂ O	18,0	17,0	± 2
CO ₂	4,50	4,511	± 2
He	maradék	maradék	

2. táblázat: A kén-hexafluorid gáztartály tartalma

NÉV	ELŐÍRT ÉRTÉK (cm ³ m ⁻³)	TÉNYLEGES ÉRTÉK (cm ³ m ⁻³)	MÉRÉSI BIZONYTALANSÁG, REL. (%)
SF ₆	100,0	97,5	± 2
H ₂	1,00	1,07	± 2

A kísérlet gázellátását - melyet 10000 cm³ standard gáz per napban határoztam meg - digitális áramlásmérő és a palackra szerelt reduktor segítségével állítottam be. Így a kiáramló gázok gáztömör szilikon cső elvezetéssel, az alapzat öblébe oldalról beépített gáztömör csatlakozón keresztül jutottak be a talajok alá. Így a vizsgált kísérleti gázok együtt, keverékként kerültek a talajra.

A standard gáztartályban található gázok vízdoldhatósága szerepet játszik a kísérlet kimenetelében,

ezért referencia gázként kén-hexafluoridot (SF_6) választottam apoláris jellege miatt. Ennek bevezetése tette szükségessé a második gáztartály kialakítását, amelyet szintén egy oldalsó szilikon csővel ellátott, gáztömör csatlakozáson keresztül kapcsoltam a kísérleti rendszerhez. Ez szintén megfigyelhető az 2. ábrán. Azonban a SF_6 -ot tartalmazó palack (2. táblázat) közvetlen rákapcsolása a kísérleti rendszerre nem lehetséges (a magas koncentráció miatt egy minta gázkromatográfiás oszlopról történő lemosása akár heteket is igénybe venne), így a referencia gáz esetén nem valósulhatott meg a folyamatos gázellátás. Ezért naponta négy darab SF_6 gázt tartalmazó üveg gáztartályt készítettem a következő módon: légköri nyomáson $2,5 \text{ cm}^3$ SF_6 gázt fecskendeztem gáztömör fecskendővel (SGE 10 cm^3 Gas Tight and Dispenser Syringe) 20 cm^3 térfogatú mintavevő üvegbe (WIC 43220, WICOM, Németország), amelyet szürke butilgumi szeptummal (WIC 43699, WICOM Németország) zártam le és még fecskendezés előtt magas nyomáson héliummal öblítettem ki. Az így készült üvegtartályt saját készítésű összekötő rendszer segítségével bekötöttem a már említett oldalsó szilikon csőbe, majd 6 órás periódusonként cseréltem a kísérlet időtartama alatt.

Minden talaj vizsgálati időszak a tíz napig tartott, amelyben az első két napon 4 óránként, majd a hátralévő hat napon 6 órás időközönként vettem 2 cm^3 mintát gáztömör fecskendővel (SGE 10 cm^3 Gas Tight and Dispenser Syringe) minden mintavételi helyről. A peremfeltételek meghatározásához körülbelül 400 mm-es magasságban a talajminta feletti légtérből (kiértékelésben „AIR”) is



3. ábra: Shimadzu GC-14
gázkromatográf

mintavételeztem, illetve a vízelvezető csővön, kb. 400 mm-es távolságban az alapzati csatlakozó csavartól is, amely a talajalatti légteret reprezentálja (kiértékelésben „PIPE”).

Majd a minták gázkoncentrációit automata mintaadagolóval (Headspace Auto Sampler) ellátott gázkromatográfal (Shimadzu GC-14 B PsF P/N 221-41665-34 (FID/ECD, Shimadzu Corp., Japán) lemértem.

A GC rendszer beállítása: izotherm és izobar mérés mód: kemence hőmérséklet: $35 \text{ }^\circ\text{C}$; injektor hőmérséklet: $120 \text{ }^\circ\text{C}$; FID detektor (flame ionisation detector - lángionizációs detektor) $280 \text{ }^\circ\text{C}$; ECD detektor (electron capture detector – elektron befogásos detektor) $295 \text{ }^\circ\text{C}$; oszlop: QP5000 $25 \text{ m} \times 0,25 \text{ mm} \times 0,25 \text{ }\mu\text{m}$; vivőgáz: $20 \text{ cm}^3 \text{ N}_2 + 3 \text{ cm}^3$

Ar/CH₄, öblítő gáz: 20 cm³ N₂ + 3 cm³ Ar/CH₄, „Backfl”.: 20 cm³ N₂, gőztér segéd gázok: 60 kPa N₂, levegő: 50 kPa, H₂: 70 kPa, retenciós idő CH₄= 1,77 perc, CO₂= 3,20 perc, N₂O= 4,10 perc, SF₆= 5,90 perc (3. ábra).

A kísérlet időtartalma alatt, túvel ellátott, digitális manométer (VD8 Digital Compact Vacuum Meter, Thyracont Vacuum Instruments) segítségével naponta háromszor ellenőriztem a rendszerben uralkodó nyomásértékeket, amely minden esetben atmoszferikus nyomás körül alakult (101100-102200 Pa).

A kísérleti tér hőmérséklete is rögzítésre került, amely $22,5 \pm 1,5$ °C volt a talaj kísérletek ideje alatt.

3.3.1. A gázdifúziós kísérlet adatfeldolgozása

A diffúziós kísérlet során a következő közelítéseket alkalmaztam: a makroszkopikus diffúzió egy dimenziós, amely párhuzamos a talaj fő tengelyével; a kísérlet során fellépő advekción és konvekción elhanyagolható, tehát a gázmozgásért csak a diffúzió felelős; továbbá adszorpciós és deszorpciós folyamatok elhanyagolhatóak (Liu et al. 2006).

A kiértékelésnél az irodalomban már említett Fick második törvényére hagytam (4), amely a konkrét kísérletre:

$$j = -D_g \nabla C, \quad (30)$$

amelyben j (kg m⁻² s⁻¹) az eddigieknek megfelelően az egységnyi felületre vetített anyag áramot jelöli, D_g (m² s⁻¹) a kísérleti talajokra vonatkozó diffúziós együttható, C (kg m⁻³) a vizsgálatban használt gázkoncentráció. A 30. egyenlet kombinálása a tömegmegmaradás törvényéből származó egyenlettel:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla j = 0 \quad (31)$$

a következő parabolikus típusú parciális egyenletet eredményezi:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_g \nabla^2 C \quad (32)$$

feltételezve, hogy a diffúziós együttható D_g időben t (s) állandó és nem függ például a hőmérséklettől, nyomástól, koncentrációtól.

A következőkben taglalt lépéseket a Matlab (Version 7.12.0.635 (R2011a), MathWorks Inc.) szoftver segítségével végeztem.

Először az adatok előkészítése történt meg a 32. egyenlet szerinti numerikus modellközelítéséhez:

A GC programja által generált, szöveg alapú nyersadatokról az X, Y, Z irányokban mért koncentráció adatokat mérésenként átlagoltam minden szintre (A, B, C, D, E), leszámítva az “AIR” és “PIPE” adatokat, mert ezeket peremfeltételként használtam. Hasonlóképpen, a kiindulási állapotot az A, B, C, D, E mérési pontok átlaga adta a 0. időpillanatban a gáztartály megnyitása előtt.

Kezdetben Euler (forward) módszert akartam alkalmazni egy ekvidisztáns rácshálón. Mivel a mérések nem egyenlő léptékűek térben és időben (mintavételi pontok helye: A -80 mm, B -160 mm, C -240 mm, D -300 mm, E- talaj tető; mintavételi sűrűség: első két napon 4 óránként majd 6 óránként), ezért új mérési hálót készítettem, amely megfelelő térbeli felosztás mellett kellő finomsággal illeszkedik a kísérlet felépítéséhez. Lineáris interpolációval átalakítottam a peremfeltételeket 2 órás felosztásban 0-284 órás intervallumban, míg a kezdeti állapotot 10 mm-es beosztással -350 mm-től 0 mm-ig. Ennek eredményeként egy olyan számítási diszkretizációs rácsot kaptam, amelynek

$$\left(\frac{284}{2} + 1\right) \left(\frac{350}{2} + 1\right) = 5148 \quad (33)$$

rácspontja van (143 rácspont időben és 36 rácspont térben, mert a kísérlet időtartalma 284 óra illetve a talaj oszlop magassága 350 mm). A munka fejlődése során azonban jobb megoldásnak találtam a Matlab (pdepe) parciáldifferenciálegyenlet-megoldó függvény alkalmazását a 32. egyenletre, ahol megőriztem a korábban alkotott rácshálót (ez egy implicit végesdifferencia-módszer megvalósítása legfeljebb egy térbeli változóval rendelkező parabolikus és elliptikus parciális differenciálegyenletek megoldásához).

Az egyenlet megoldása után lehetőség nyílt a mért és a modell által számolt különbséghez kapcsolható hibák meghatározására.

A hibánégyzetek összege (Error Sum of Squares):

$$SSE = \sum_{i=1}^n (C_n - C_{Mn})^2, \quad (34)$$

amelyben n a mért és számolt koncentrációértékek száma, C_n az n . időpillanatban mért koncentrációérték, míg, C_{Mn} a C_n -hez térben és időben legközelebb eső modellérték (Deza és Deza, 2009).

Mivel a D_g paramétert időben állandónak tekintettem, ezért a modell illesztése egy olyan optimum keresési feladattá vált, ahol D_g értékével való iteráció segítségével definiálható az a pont, amikor a

hibanégyzetek összege eléri minimumát. Ezt a Matlab („fminsearch”; MathWork-ref2) direkt szimplex kereső algoritmusával határoztam meg.

Alternatívaként alkalmaztam még a hiba mérőszámaként a következő kifejezést is:

$$Err_A = \sum_{i=1}^n \frac{|C_n - C_{Mn}|}{|C_n|} 100, \quad (35)$$

mivel a hibanégyzet összeg nem alkalmas a modellillesztés jóságának összehasonlítására két különböző talaj esetén. Ezért kiegészítésként alkalmaztam még 35. egyenletet, amelyben minden jelölés megegyezik az előző kifejezés jelöléseivel.

3.4. A komputer tomográfias mérés

A talajminták előkészítése a komputer tomográfias méréshez:

Az effektív- (levegővel töltött póruster) és teljes makroporozitás becsléséhez kétszer volt szükség komputer tomográfias felvételezésre, mivel a talajanyaggal és/vagy vízzel töltött térfogatelemek nem választhatók el egyértelműen sűrűség alapon.

Az első előkészítésre a gázdifúziós kísérlet után került sor, mivel a talajminták struktúrájuk függvényében eltérő mértékben veszítettek vizet a 10 napos vizsgálati idő alatt. A víztartalom beállítása a 3.2 fejezetben már részletesen ismertetett eljárással történt. A későbbi kiértékelés során a CT- vizsgálat előtti talaj víztartalmat azonosnak tekintettem (-200 cm mátrixpotenciál, -19,6 kPa nyomás potenciál) a diffúziós kísérlet kezdetekor beállított víztartalommal, élve azzal a közelítéssel, hogy egy talajoszlop közel azonosan viselkedik.

A második CT-s felvétel előtt a talajokat érintetlen helyen egy évig száradni hagytam, ezáltal olyan gáztranszport szempontjából kétfázisú állapot alakult ki, amelyben a talaj teljes porozitása egyenlő az effektív porozitással, azaz a kizárólag levegővel töltött pórusterrel. Ezzel a lépéssel két célt is elértem: egyrészt a későbbi kiértékelés során képet kaptam a talajok teljes porozitásáról, amely a legtöbb két paraméteres modellben az egyik bemeneti adat, illetve lehetőség nyílik a talajvízzel blokkolt póruster mennyiségi becslésére.

A talajminták háromdimenziós felvételezése:

A minták felvételezése Siemens Somatom Sensation 16 Cardiac CT Scanner (SIEMENS AG, Erlangen, Németország) használatával készült. A felvételezés beállítása (120 kV; 250 mA; 1000 ms) elősegítette a mért és a rekonstruált gyengülési adatok közötti következetességet, lehetőség

szerinti műtermék mentességet és a minőséget tekintve a különböző fázisok szeparálását.

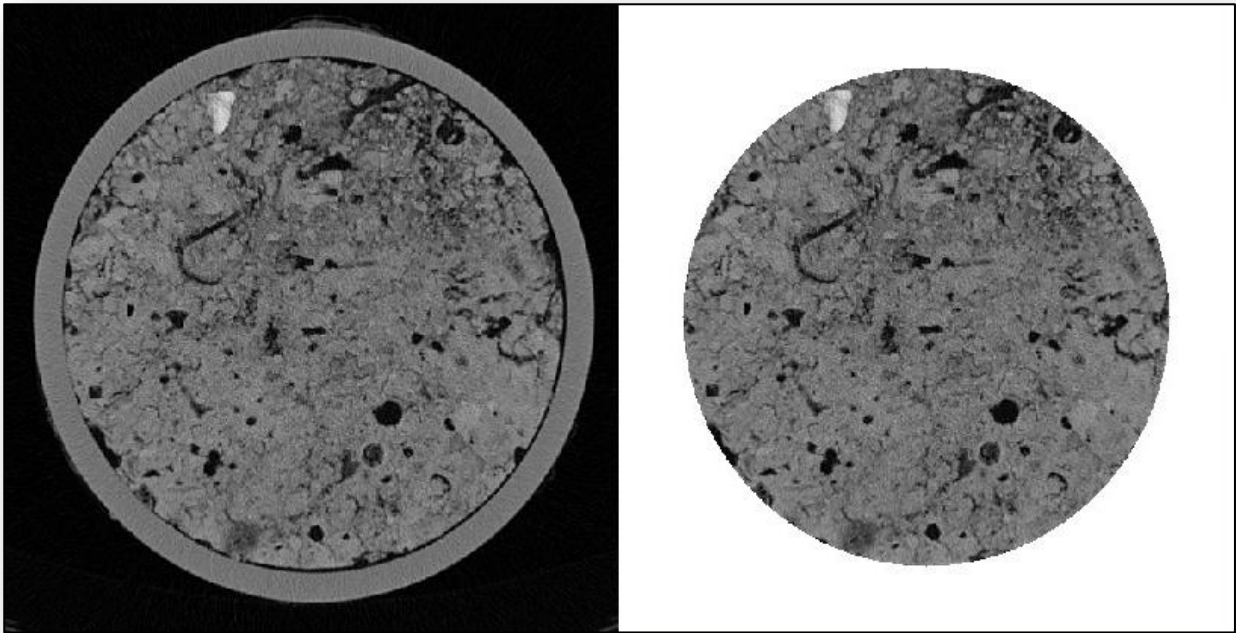
A nyers adatok rekonstrukciója Somatom Syngo CT 2007S programmal készült. A felvételezés kimeneti adatbázisa úgynevezett "dicom" fájl formátumban állt rendelkezésemre, ami minden mintára körülbelül 300 darab 16 bites, 512 x 512 pixeles file sorozat. Ezek alapján a talajmátrix háromdimenziós rekonstrukciója $0,390625 \times 0,390625 \times 1,2 \text{ mm}^3$ (voxel méret) felbontással vált lehetővé.

3.5. A komputer tomográfias mérés képadatainak feldolgoása

A képfeldolgozásnál elsődleges célom az volt, hogy a talajmintát leképező voxel mátrix belsejében azok a pórushálózatok azonosításra kerüljenek, amelyekről nagy bizonyossággal elmondható, hogy átjárható utat biztosítottak a diffundáló gázok számára. A cél megvalósítása azonban több komplex lépésből áll: képmódosítás, küszöbérték meghatározás, izotróp voxelek generálása, megfelelő szűrő kiválasztása és alkalmazása, szegmentáció, 3 dimenziós rekonstrukció és a különböző pórus struktúra attribútumainak mennyiségi meghatározása.

Képmódosítás:

A nyers képek tanulmányozása során behatároltam a vizsgálni kívánt területet (4. ábra, bal oldal), majd ennek megfelelően Matlab szoftver (Version 7.12.0.635 (R2011a), MathWorks Inc.) segítségével minden dicom fájlt úgy módosítottam, hogy a vizsgálati területen kívül eső voxelek értékét extrém magas HU értékre cseréltem. Ezáltal értem el, hogy a későbbi szegmentációs eljárás során ezek a voxelek automatikusan kikerültek a levegővel töltött pórustér-rekonstrukciónál, oly módon, hogy közben a talajra vonatkozó voxel intenzitás disztribúció változatlan maradt, amely a küszöbérték meghatározásánál tölt be nagyon fontos szerepet. A dicom fájlok módosításhoz írt programot az 5. melléklet tartalmazza.



4. ábra: Eredeti CT kép (bal oldal), módosított CT kép (jobb oldal). A megjelenített pixel színmélysége fordítottan arányos az általa reprezentált tér sűrűségével.

Küszöbérték meghatározás:

A küszöbérték meghatározásához minden minta egyedi hisztogramját vettem alapul, amelynek képét DU-T minta esetén már példaként bemutattam az 1. ábrán. A legalacsonyabb HU értékkel rendelkező első csúcs a talajminta levegővel töltött voxeleit reprezentálja, míg a következő csúcs a talajjal, vízzel és szerves anyaggal töltött térfogathoz kapcsolható. A harmadik csúcs, amelyet az általam mesterségesen generált külső légtér voxelei alkotnak, olyan magas értékkel rendelkezik (10000 HU), hogy már nem látható.

A munkám során háromféle módszert teszteltem a küszöbértékek megválasztására:

Th₁: első esetben a küszöbértéket a levegőhöz és talajhoz kapcsolható voxelek Gauss eloszlását feltételezve az azonos valószínűségű ponthoz kötöttem, amely viszonylag gyakran választott küszöbérték geológiai és talajtani kutatások esetén (Tarquis et al. 2008).

Th₂: második esetben a légtérhez és talajhoz kapcsolható HU középértékek átlagaként definiáltam a szegmentáció kritikus pontját.

Th₃: harmadik esetben Capowiez et al. (1998) ajánlása szerint a két csúcs közötti távolság kétharmadosához eső HU értéket választottam.

Az 5. mellékletben megtalálható a képek módosítására és az Th₁ küszöbérték meghatározásához írt és tételesen feliratozott Matlab parancssor (szkript).

Izotróp voxelek előállítás:

Az adatfeldolgozást ettől a ponttól fogva Avizo Fire (evaluation version 7.0.0., VSG-Visualization Sciences Group, SAS) szoftver próba verziójával végeztem. A kezdeti anizotróp voxelek ($0,390625 \times 0,390625 \times 1,2 \text{ mm}^3$) átalakítása izotróp voxelekké ($0,45 \times 0,45 \times 0,45 \text{ mm}^3$) a morfológiai számítások komplexitását csökkenti. A transzformációt Lanczos szűrő alkalmazásával végeztem el (Meijering et al. 1999, Luo et al. 2010), amely egy szinusz függvény alapú interpolációs eljárás, és a digitális képfeldolgozással foglalkozó irodalom adatmegőrzés szempontjából a legjobb eljárások között tartja számon. Emellett képesítő funkciója is van, amely a fázisok éleinek detektálása szempontjából fontos.

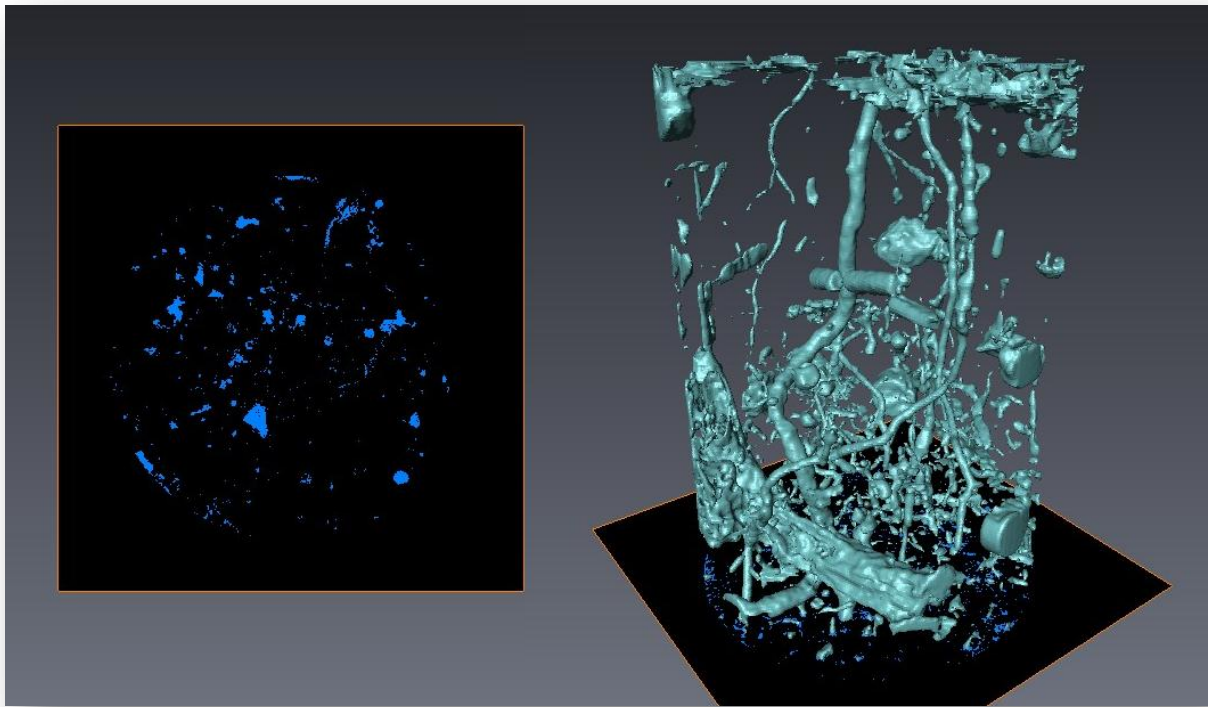
Röviden megemlítem, hogy a szűrő algoritmusának megalkotója Lánczos Kornél, eredeti nevén Löwy Kornél (1893–1974), a magyar elméleti fizika és alkalmazott matematika egyik legnagyobb egyénisége volt.

Zajszűrés:

Kívánatos a zaj és információtorzulást okozó műtermékek eltávolítása a nyers képtérben. A zajszűrés során olyan eljárást kellett keresnem, amely akár a szűrőmaszk (kernel) méretétől függően információvesztést is okozhat, de megőrzi a voxelekbe kódolt levegő-talaj határfelületi információt, azaz az előbb említett éleket, amely munkám szempontjából kritikus jelentőséggel bírt. Ezért választottam a median szűrőt, amely egy olyan nem lineáris szűrő, amely kimondottan alkalmas impulzív zajok szűrésére, és amelynek alapja a kernel középpontjában lévő voxelérték módosítása a szűrőmaszk HU értékeinek mediánjára.

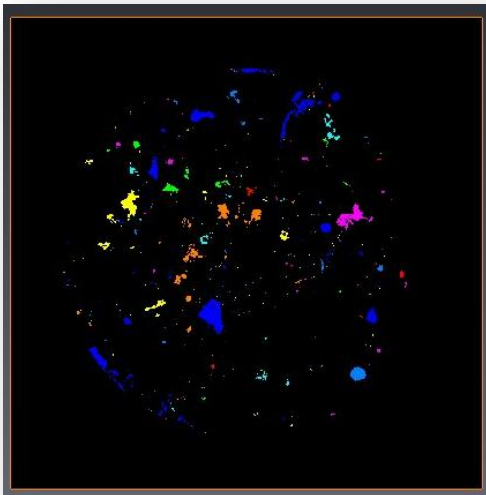
Szegmentáció:

A már korábban definiált küszöbértéket megadva a szoftver egy binarizációs eljárás keretében minden olyan voxelt szelektált, amelynek intenzitása (HU értéke) a megadott küszöbértéket nem érte el. A folyamat eredményeként olyan bináris mátrixteret kaptam, amelyben a gázok számára átjárható térfogategységek 1-gyel, a “tömör” talajtérfogatokat 0-val kódoltam. A folyamat eredménye a 5. ábra baloldalán látható, ahol kék szín 1-es kódolású a fekete szín pedig 0.



5. ábra: EL-T minta binarizációja Th_1 -nél alacsonyabb küszöbérték mellett (-700 HU) és a binarizáció alapján felállított póruster mátrix háromdimenziós megjelenítése

Jelölő algoritmus:



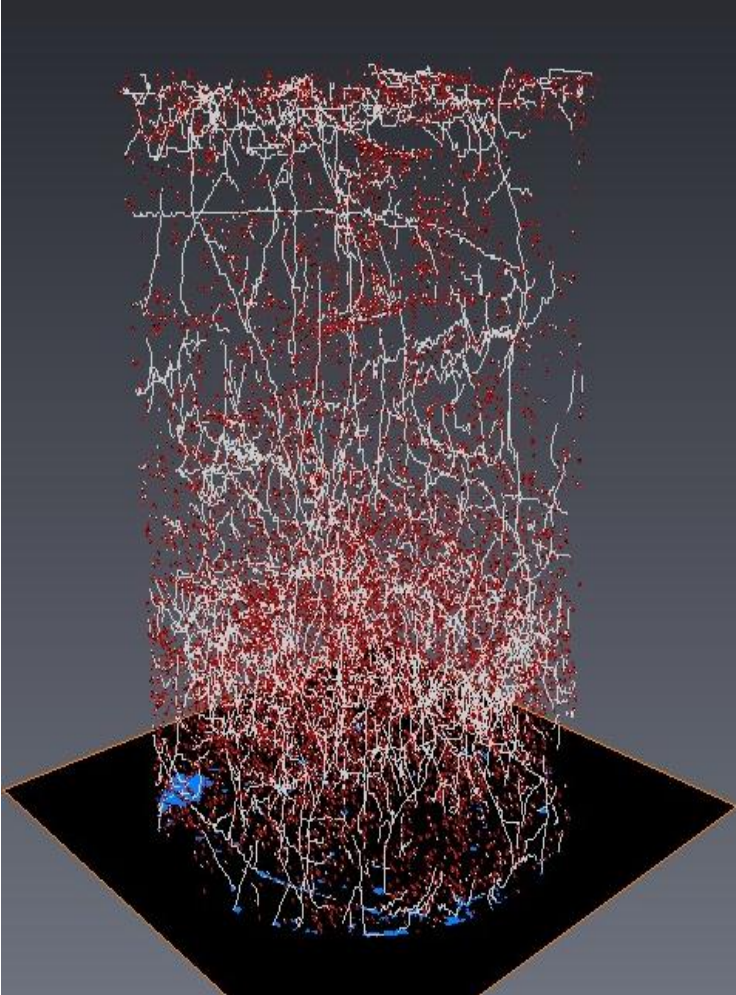
6. ábra: EL-T minta binarizált képének jelölése.

A programba épített jelölő algoritmussal (labelling) újra kódoltam a háromdimenziós térben egymással nem kapcsolódó voxelek, voxel csoportok binarizált értékét, amelyet a 6. ábra mutat. Ezáltal a pórusteret alkotó hálózat minden különálló eleme egyenként vizsgálhatóvá vált.

Így a képanalízis eredményeként megkaptam a makropórusok számát, a teljes talajminta makroporozitást, a mintát jellemző átlagos pórusméretet, az egyes pórusok felületét és a talajminta összpórusainak átlagfelületét, pórus hálózat sűrűséget, átlagos pórus hosszt.

Vázszerkezet-előállítás:

A vázszerkezet-előállítás (szkeletonizáció) egy olyan bináris morfológiai eljárás, amely rekurzív eróziót tartalmazó algoritmusra épül. A bináris erózió lényegében addig távolítja el a voxel csoportok határai mentén a voxeleket a térben, amíg az utolsó voxel leválasztása a voxelcsoport megszűnését eredményezné. A megmaradt voxel a talajpórus megfelelően definiált középvonala lesz, amelyet a voxelcsoportba beírható maximális sugarú kör középpontja határoz meg rétegenként.



7. ábra: EL-T minta pórusterének vázszerkezete, amelyben a piros jelölés az elágazási pontokat jelenti

Ennek értelmében a vázszerkezet-előállítás bemeneti adata a küszöbérték alapján történt leválasztás kimeneti adatbázisa.

A talaj vázszerkezetének előállítása olyan kiemelten fontos talajt jellemző morfológiai paraméterek meghatározását teszi lehetővé, mint például az átlagos pórus hossz, ami a talaj labirintusfaktorával van kapcsolatban, vagy a pórustérben megjelenő elágazások mennyisége, amely a pórustér kapcsoltságát jellemzi, lehetőséget adva ezzel, például a holt pórusterek kivonását a kiértékelésből. Minden olyan voxel elágazási pontnak számít, amelynek értelemszerűen kettőnél több 1 értékű szomszédja van. A talajváz-szerkezet Sato et al. (2000) algoritmus szerinti („centerlinetree”) előállításának eredményét a 7. ábra

mutatja be, ahol a szemléletesség kedvéért nagyon alacsony küszöbértéket választottam.

A talajváz-szerkezet igen időigényes generálását a küszöbérték emelésével növekvő morfológiai komplexitások miatt egyelőre csak a két alacsonyabbik küszöbérték mellett tudtam kivitelezni.

4. EREDMÉNYEK ÉS ÉRTÉKELÉSÜK

4.1. A talaj makropórus rendszerének analízise

A kiegészítő kísérletek eredményét a 3. mellékletben található táblázat mutatja be.

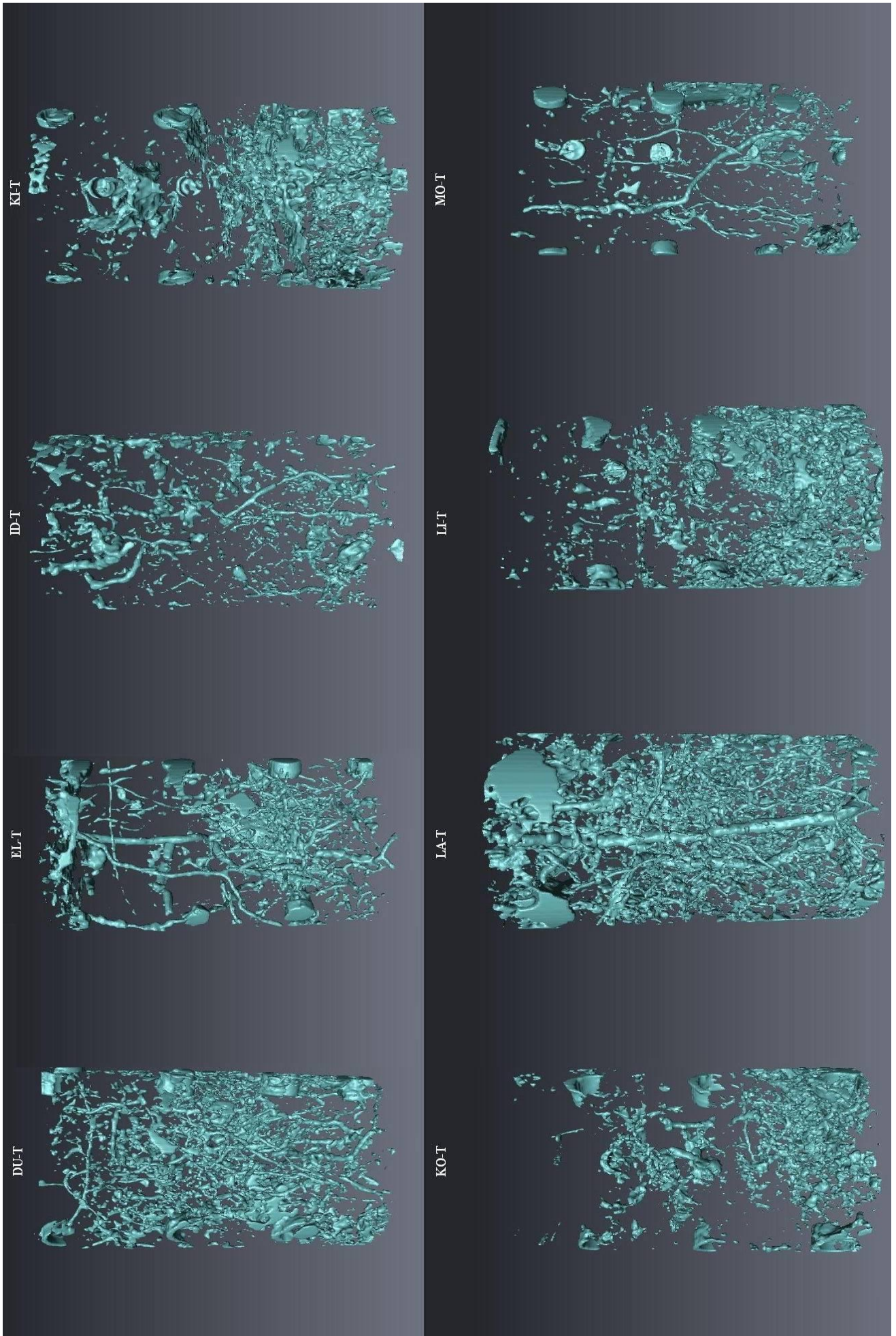
A makropórus hálózat háromdimenziós vizuális bemutatása jól visszatükrözi a különböző szemcseméret-eloszlással rendelkező talajok szerkezeti különbségeit (8. ábra).

Míg egyes talajokban viszonylag egyenletes a pórusok mennyisége és eloszlása (LA-T; ID-T; DU-T), addig megfigyelhető olyan minta, amelynek pórushálózata a főtengely mentén egyenlőtlen, például érdekes módon KO-T és KI-T alul sokkal sűrűbb makropórus hálózattal rendelkezik a felszín közeli térhez képest.

A képeken megfigyelhető néhány jellegzetes makropórus típus. A közel azonos átmérővel rendelkező, csőszerű pórusrendszer például földgiliszta-félék (*Lumbricidae*) által létrehozott makropórusokterek. Míg azok a nagyfolytonossággal rendelkező hengeres pórusok, melyek átmérője a mélységgel csökken, a növénygyökérszet által keletkeztek (LA-T). A rendszertelen megjelenésű, változatos formával rendelkező talaj aggregátumok közötti pórusterek alakját az évszakváltásnak megfelelő fagyás és olvadás ciklusai, illetve a talajpórusok nedvességgel telítődése majd száradása formálta (Luo et al., 2010).

Például MO-T és ID-T képen is látható, hogy egy vélhetően töretlen, nagy folytonossággal rendelkező pórus egy szakaszon elvesztette folytonosságát. Mivel a diffúziós kísérletem keretében a pórustér folytonosságának kérdése meghatározó, ezért a probléma megfigyelésekor a következő okokat kellett megfontolni a kutatási cél értelmében:

- A törés oka a talajszerkezet károsodásában keresendő, amely a mintavételezéskor, szállításkor, előkészítéskor vagy a kísérlet során történt, így a két „összetartozó” légtér közé eső voxelek valós információval töltöttek. A küszöbérték megválasztása helyes.
- A törés oka az adott vizsgálati térfogatban lévő anyag által generált jel, amely a felvételezés felbontása mellett zajként jelenik meg a képen (parciális térfogat hatás). Ebben az esetben a hiányzó szakasz voxelei elvesztették reális információ tartalmukat. Ezek után meg kell határozni az elvesztett információ mennyiségének függvényében a megfelelő szűrők és/vagy kapcsolat helyreállító algoritmusok alkalmazását.
- A törés oka a helytelen szegmentációs küszöbérték megválasztása.



8. ábra: A talajminták pórusterének háromdimenziós képe

Küszöbérték és a detektált voxelcsoportok:

A 3. táblázatban látható (38. oldal), hogyan változik a detektált makropórusok száma és ezzel a pórustér térfogat az eltérő küszöbérték definiálás függvényében. A táblázat jelöléseit tekintve megegyezik a 3.5. pontban taglaltakkal, miszerint Th_1 az azonos valószínűségi ponthoz rendelt küszöbérték, Th_2 a talajhoz és levegőhöz köthető voxelcsúcsok átlaga (Tarquis et al. 2008), míg Th_3 a Capowiez és munkatársai (1998) által használt szegmentációs pont. Ha a legalacsonyabb küszöbérték esetén detektált pórusszámot és mennyiséget vesszük alapul, akkor Th_2 mellett detektált pórusszám növekedés 64% (LA-T) és 274% (DU-T) között mozog, míg ugyanez térfogatra vetítve 43% -tól (ID-T) változik 348% -ig (KO-T). Mivel a detektált térfogat mennyiség a szegmentáció kritikus értékét definiáló módszerre vezethető vissza, ezért az egyik legfontosabb kérdés az, hogy az egyes meghatározási módok önmagukhoz viszonyítva mennyire következetesek. Ez gyakorlatilag annyit jelent a kutatási munkára vonatkoztatva, hogy két talaj eltérő küszöbértéke esetén ugyanazon sűrűséggel rendelkező voxeleket egyik esetben átjárhatónak, míg másik esetben átjárhatatlannak nyilvánítom a szegmentáció során. Ezért első megközelítésben figyelembe vettem a három küszöbérték számítás által generált adatsor mintaterjedelmét ($Th_1= 300$ HU; $Th_2= 445$ HU; $Th_3= 580$ HU), és kiszámoltam a minták küszöbértékének szórását (SD), ahol a kis elemszám miatt (8 db) az eltérés négyzetösszeget a korrigált elemszámmal osztottam.

$$SD = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}} \quad (36)$$

A 36. képletben x_i jelölés az adott megfigyelést, \bar{x} , a megfigyelések átlagát, n pedig a megfigyelések számát jelöli. A szórásértékek ($SD_{Th1}= 97,97$ HU; $SD_{Th2}= 131,50$ HU; $SD_{Th3}=177,26$ HU) és a mintaterjedelemre kapott értékek alapján Th_1 küszöbérték meghatározási mód tűnik a legalkalmasabbnak a minták közötti azonos minőségű pórustér-detektálásra, azonban a mintaterjedelem, mint statisztikai jellemző nem ad információt az adatsor változékonyságára, míg a szórás számolásakor az átlag jósága kulcsfontosságú. Ezért figyelembe kellett vennem még a relatív szórást is ($CV\%$):

$$CV\% = \frac{SD}{\bar{x}} 100. \quad (37)$$

A relatív szórás, amely tulajdonképpen a szórás és az átlag hányadosának százalékos értéke, és amelynek alkalmazási előnyei közé sorolható, hogy elvonatkoztat nagyságrendi viszonyoktól és a mértékegységtől. Segítségével arról is árnyaltabb képet kapunk, hogy a szórás kiszámításában elemi szerepet játszó átlag, mennyire jellemzi az adatsort.

Vizsont a $CV\%$ -t csak arányskálán mért értékek esetén kap minden esetben értelmet. Az értékek 1024 HU értékkel való eltolása esetén a Hounsfield skála, mint intervallum skála (standard

nyomáson és hőmérsékleten a desztillált vízhez 0 HU értéket, a levegőhöz -1024 HU-t rendel) könnyen átalakítható arányskálává, anélkül hogy a skálába kódolt információ torzulna, vagy a már korábban számolt szórás és terjedelemértékek megváltoznának. Így $CV\%_{Th1} = 23,48$; $CV\%_{Th2} = 12,91$; $CV\%_{Th3} = 14,20$. Ebből az következik, hogy Th_1 az adatsor változékonynak minősíthető és a szórásnál használt átlag rosszabbul jellemzi az adatsort, mint a másik két esetben. Vagyis jelen kutatás keretein belül a három statisztikai mutató figyelembevételével valószínűsíthető, de nem bizonyítható egyértelműen az első módszer alkalmasabb mivolta ilyen kis mintaszám mellett. A vizsgálati mintaszám növelésével pontosabb képet lehetne kapni a szegmentálási módszerekről, illetve figyelembe kell venni a kutatási célt is, azaz hogy az egyes átjárható voxelek elvesztése, vagy esetlegesen átjárhatatlan voxelek bevonása milyen mértékben torzítja a kutatási kérdésekre adott választ.

Mivel nem lehet kiválasztani biztonsággal egy szegmentálási módot, ezért a fentiekből következően az adatok kiértékelésének elemzését mind a három küszöbérték esetében elvégeztem.

Azonban a későbbiekben tárgyalt előrejelző modellek a relatív diffúziós tényezőre adott becsléstesztelése során újra szerepet kap majd a megfelelő szegmentálási módszer kiválasztása. Így a későbbiekben újra előtérbe kerül a megfelelő küszöbérték megválasztása az elvégzett gázdifúziós kísérlet tükrében.

Szükségesnek tartom kihangsúlyozni, hogy komputer tomográfias vizsgálat kiértékelésére nincsenek egységes, jól bejáratott módszerek talajtani mintákra. Ezért a már fent bemutatott eljárás és a dolgozat további részeiben található elemzések az általam kidolgozott és egyedileg összeállított utat követik, amely nem zárja ki más megoldások érvényességét.

3. táblázat: CT-s kiértékelés eredménye a három eltérő szegmentálási szint függvényében

Minta	Küszöb (HU)	Detekált voxelesop. ($m^3 m^{-3}$)	Makropor ₁ ($m^3 m^{-3}$)	Átl. Méret (mm ³)	Felület (mm ²)	Hál. Sűrűség* ($\times 10^6$ darab m^{-3})	POM* (100%) (43. egyenlethől) ($m^3 m^{-3}$)	α	Elágazások* ($m^3 m^{-3}$)	Hosszsűrűség* ($km m^{-3}$)	τ	
T	DU-T	-644	8212	0,110	0,024	13,517	199410,7	1,780	45,8	376133,673	6,342	0,727
	EL-T	-494	5091	0,096	0,035	31,487	189297,4	1,100	76,6	290451,550	4,887	1,187
H	ID-T	-524	6297	0,064	0,015	10,076	129774,3	1,360	40,9	199780,342	4,394	0,860
	KI-T	-544	6571	0,111	0,021	15,022	188672,5	1,380	72,5	677864,895	6,185	2,686
1	KO-T	-794	5661	0,081	0,018	14,255	139363,6	1,220	71,2	362467,917	3,987	1,184
	LA-T	-584	9920	0,098	0,048	22,442	346937,6	2,150	70,7	941201,849	10,684	1,456
MO-T	LI-T	-664	6709	0,094	0,028	19,300	187456,4	1,450	75,6	460731,212	5,256	1,923
	MO-T	-544	3223	0,061	0,017	24,319	75333,0	0,690	79,1	74619,368	2,071	0,843
	SD											
	CV%											
T	DU-T	-14	30771	0,181	0,089	13,374	809605,9	6,670	82,4	2464391,383	23,774	12,172
	EL-T	61	8916	0,197	0,070	24,915	413235,3	2,820	84,3	850964,475	10,856	4,109
H	ID-T	46	13003	0,111	0,022	11,184	188486,8	1,930	43,9	606065,445	10,832	1,178
	KI-T	136	12342	0,129	0,069	25,911	552986,0	2,670	89,3	1842491,014	14,186	10,019
2	KO-T	-309	20513	0,141	0,078	17,638	614459,0	4,440	86,6	1934680,640	16,752	6,487
	LA-T	1	16275	0,209	0,122	34,558	908260,6	3,530	93,0	3088460,920	23,494	81,683
LI-T	LI-T	36	16637	0,228	0,083	22,924	612609,1	3,600	84,3	1769390,064	15,777	4,311
	MO-T	-4	10956	0,078	0,031	12,942	200521,1	2,370	67,7	267892,207	6,137	1,156
	SD											
	CV%											
T	DU-T	96	35552	0,327	0,117	30,293	1064785,7	7,712	86,6	N/A	N/A	N/A
	EL-T	289	16421	0,251	0,097	54,629	620225,7	3,562	87,2	N/A	N/A	N/A
H	ID-T	309	26168	0,151	0,061	10,736	564330,6	5,676	62,1	N/A	N/A	N/A
	KI-T	429	15118	0,143	0,108	32,966	803685,1	3,279	92,2	N/A	N/A	N/A
3	KO-T	-151	20563	0,142	0,079	17,647	616122,8	4,460	86,7	N/A	N/A	N/A
	LA-T	236	16276	0,315	0,122	34,558	908261,0	3,531	93,0	N/A	N/A	N/A
LI-T	LI-T	309	20187	0,332	0,174	39,723	1175427,1	4,379	94,4	N/A	N/A	N/A
	MO-T	269	19819	0,106	0,051	11,884	402770,0	4,299	73,0	N/A	N/A	N/A
	SD											
	CV%											

N/A: nem elérhető adat
* pontos definíció a dolgozatban

Makroporozitás₁:

A 3. táblázat Makropor₁-ként jelölt értéke, a hosszú száradási idő után készült második CT mérésből számolt porozitást jelenti $m^3_{\text{talajlevegő}} m^{-3}_{\text{talaj}}$ -ban, ahol a talaj állapotára vonatkozó hipotézis értelmében a talaj effektív makroporozitása egyenlő a teljes makroporozitással, mivel feltételezhetően a talaj kétfázisú állapotban van. Továbbra is hangsúlyozni kell, hogy mikroporozitás mérésére az ún. mikro-CT-k rendelkeznek magasabb felbontási képességgel, de azokba a gázdifúziós kísérletekhez használt viszonylag nagyméretű oszlopok nem helyezhetők el. Így meg kellett elégedni a makropórusok vizsgálatával ezen a szinten. A CT kép-felvételzési felbontása ($0,390625 \times 0,390625 \times 1,2 \text{ mm}^3$) eleve nem ad lehetőséget mikroporozitás vizsgálatára, ezért kizárólagosan csak makroporozitást említhetünk, amelyhez alapul a következő szerzők által javasolt talaj porozitás osztályait vettem (4. táblázat), és amelyben az értékek ekvivalens pórus átmérőben adtam meg:

4. táblázat: Különböző pórusméret-tartományok határértékei az egyes szerzőknél

Mega	Makro	Mezo	Mikro	Szerzők
	>1000 μm	1000-10 μm	< 10 μm	Luxmoore (1981)
> 1000 μm	1000-10 μm	10-0,2 μm	< 0,2 μm	Stefanovits (1999)

A CT mérés kezdeti felbontása jól illeszkedik a makro-, illetve a mezoporozitás tartomány felső határába.

Th₁ esetén KI-T rendelkezik a legnagyobb porozitással ($0,111 m^3_{\text{talajlevegő}} m^{-3}_{\text{talaj}}$), míg a legkevesebb pórustér MO-T mintánál van ($0,061 m^3_{\text{talajlevegő}} m^{-3}_{\text{talaj}}$). Az adatsor korrigált szórása $SD_{Th1Makropor1}=0,02$. Th₂ küszöbérték meghatározási mód mellett a sorrend változik és LI-T mintában található a legtöbb légtér ($0,228 m^3_{\text{talajlevegő}} m^{-3}_{\text{talaj}}$). MO-T minta megmaradt a legpóruszegényebbnek ($0,078 m^3_{\text{talajlevegő}} m^{-3}_{\text{talaj}}$). Th₃ alkalmazásával számított adatsorban a korábbiaknak megfelelően alakul a porozitás sorrendje (LI-T: $0,332 m^3_{\text{talajlevegő}} m^{-3}_{\text{talaj}}$; MO-T: $0,106 m^3_{\text{talajlevegő}} m^{-3}_{\text{talaj}}$), azonban egy érdekes negatív korreláció figyelhető meg az iszap és homok frakció összege és a porozitásértékek között ($r = -0,569$; $p < 0,900$). Ez alapján, 10%-os első fajú hiba mellett normál eloszlást feltételezve, elmondható, hogy a két változó között szignifikáns kapcsolat van. A többi küszöbérték adatsor és szemcseméret-eloszlás között lineárisan korreláló kapcsolat nem található.

A fent említett kapcsolatot a Pearson-féle korrelációs együttható (r) segítségével definiáltam, amely a legelterjedtebben használt statisztikai mutató két változó közötti összefüggés erősségének mérésére:

$$r_{XY} = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2 \sum (y_i - \bar{y})^2}}, \quad (38)$$

amely kifejezésekben a jelölések megegyeznek (38). egyenletével.

Emellett t-tesztet (Hazewinkel, 2001) alkalmaztam a szignifikancia megállapítására adott valószínűség mellett (p):

$$t = r \sqrt{\frac{N}{1-r^2}}, \quad (39)$$

N a szabadság fokot jelenti, amely t eloszlás esetén $n-2$.

A következőkben alkalmanként említem még a Dixon-féle Q tesztet, amelyet a kiugró adatok azonosítására használtam, és amely az adatbázisban szereplő értékek növekvő sorba rendezése után $(x_1, x_2, x_3, \dots, x_{n-1}, x_n)$ Q értéke felső és alsó kiugró érték minősítése esetén a

$$Q = \frac{x_n - x_{n-1}}{x_n - x_1}, \text{ és } Q = \frac{x_2 - x_1}{x_n - x_1} \quad (40)$$

képlettel számolható. A Dixon-féle Q teszt null hipotézise értelmében a feltételezett adat szignifikánsan különbözik ha $Q_{\text{kritikus}} < Q$. Nyolc minta esetén a Q kritikus értéke $Q_{95\%}=0,526$ és $Q_{99\%}=0,634$.

Mivel az egyes kategóriákban megjelenő, különböző talajokra vonatkozó értékek egymástól függetlenek, és eltérésüket elsősorban a talajok összetételének heterogenitásában kell keresni, ezért ezt a tesztet az egyes vizsgálati kategóriákban megjelenő szignifikáns eltérések megállapítására használtam, de a kiugró értékek azonosítása sehol nem vontam maga után az adatsorból való kizárást, mert az adatok természete ezt sehol nem indokolta.

Makroporozitás₂:

A 3. táblázatban Makropor₂-ként jelölt adatsor, azokat a porozitásértékeket mutatja be $\text{m}^3_{\text{talajlevegő}} \text{m}^{-3}_{\text{talaj}}$ -ban, amelyek a gázdifúziós kísérlet kezdetéhez tartoznak a víztartalom másodszori beállítása után, feltételezve, hogy a talaj azonosan viselkedett a nedvesítés és a vízvisszatartás tekintetében az adott -200 cm mátrixpotenciálon.

Th₁ mellett LA-T ($0,048 \text{ m}^3_{\text{talajlevegő}} \text{m}^{-3}_{\text{talaj}}$) minta rendelkezik a legnagyobb levegővel töltött térfogatszázalékkal, és ID-T minta rendelkezik a legalacsonyabb porozitással ($0,015 \text{ m}^3_{\text{talajlevegő}} \text{m}^{-3}_{\text{talaj}}$). A részlegesen telített és teljesen száraz állapotot jellemző porozitásértékek különbségéből

megállapítható, hogy a legtöbb vizet KI-T és DU-T minták tartották vissza (KI-T: $0,090 \text{ m}^3_{\text{talajvíz}} \text{ m}^{-3}_{\text{talaj}}$; DU-T: $0,86 \text{ m}^3_{\text{talajvíz}} \text{ m}^{-3}_{\text{talaj}}$). A talaj vízvisszatartó képessége összefüggésben áll a porozitás-viszonyokkal. Ez kiterjed a jelen kutatás érzékenysége alá eső mikropórus rendszer mennyiségére és differenciáltságára is (Garcia-Bengochea et al. 1979, Rajkai és Kabos 1999, Elek 2009). mivel az adszorpciós $< 0,2 \text{ } \mu\text{m}$, kapilláris $0,2\text{-}10 \text{ } \mu\text{m}$, illetve a kapilláris-gravitációs pórusterek mennyiségére és minősége (pórustér folytonossága, elrendeződés) is befolyásolja a talajok vízvesztését a leszívás során.

Th₂ féle értékelés esetén, szintén LA-T ($0,122 \text{ m}^3_{\text{talajlevegő}} \text{ m}^{-3}_{\text{talaj}}$) és ID-T ($0,022 \text{ m}^3_{\text{talajlevegő}} \text{ m}^{-3}_{\text{talaj}}$) minták rendelkeznek a mintasorban szélsőséges porozitással. Érdekes megfigyelni a becsült víztartalom mennyiségének alakulását a Th₁ és Th₂ küszöbérték számítások mellett, ugyanis KI-T (KI-T_{Th1}: $0,090 \text{ m}^3_{\text{talajvíz}} \text{ m}^{-3}_{\text{talaj}}$; KI-T_{Th2}: $0,060 \text{ m}^3_{\text{talajvíz}} \text{ m}^{-3}_{\text{talaj}}$) és KO-T (KO-T_{Th1}: $0,0635 \text{ m}^3_{\text{talajvíz}} \text{ m}^{-3}_{\text{talaj}}$; KI-O_{Th2}: $0,0628 \text{ m}^3_{\text{talajvíz}} \text{ m}^{-3}_{\text{talaj}}$) minták esetén nem igaz, hogy a küszöbérték eltolása automatikusan megnövelné a víztartalomra vonatkozó becsléseket is.

Th₃ mellett LI-T mintánál található a legnagyobb porozitás (LI-T_{Th1}: $0,173 \text{ m}^3_{\text{talajlevegő}} \text{ m}^{-3}_{\text{talaj}}$) és MO-T ($0,051 \text{ m}^3_{\text{talajlevegő}} \text{ m}^{-3}_{\text{talaj}}$) lesz a legkisebb porozitással rendelkező talaj. KO-T becsült víztartalma Th₃ esetében is konzisztens maradt (KO-T_{Th3}: $0,0631 \text{ m}^3_{\text{talajvíz}} \text{ m}^{-3}_{\text{talaj}}$). A többi talajvíztartalom becslését tekintve csak DU-T ($0,210 \text{ m}^3_{\text{talajvíz}} \text{ m}^{-3}_{\text{talaj}}$) és LA-T ($0,193 \text{ m}^3_{\text{talajvíz}} \text{ m}^{-3}_{\text{talaj}}$) minták esetén történt jelentős változás. A többi minta esetén $0,025 \text{ m}^3_{\text{talajvíz}} \text{ m}^{-3}_{\text{talaj}}$ a legnagyobb eltérés Th₂-hez képest.

A porozitás értékét a talajok permeabilitásán keresztül gyakran visszavezetik a szemcseméret-eloszlásra (Detmer 1995, Dai et al. 2008). Jelen kutatás keretében a porozitás értéke az agyagtartalommal gyengén, pozitívan korrelál ($r_{\text{Th1}} = 0,539$; $r_{\text{Th2}} = 0,541$; $r_{\text{Th3}} = 0,405$), míg a többi szemcsetartománnyal egyáltalán nem. Ha nem csak korreláció, de lineáris regresszió is feltételezhető, vagyis az agyagtartalom mennyisége szignifikánsan meghatározza a pórustér mennyiségét, akkor a determináltsági együtthatók alapján Th₁ esetén 29%-ban Th₂ esetén 30%-ban, míg Th₃ esetén 17%-ban lehet csak előre jelezni a porozitás mértékét.

Összefoglalva az eddigieket elmondható, hogy a 3. táblázat eddig elemzett oszlopai alapján a javasolt három szegmentálási mód mellett három lényegesen eltérő teljes és effektív makroporozitás értéket kaptam. Ezért a tudományos szakirodalomban különböző szerzők által kiértékelt komputer tomográfias talajtani munkák porozitásértékeinek pusztán összevetése, a kiértékelés pontos menetének ismerete nélkül nem megalapozott.

Amíg a porozitás értéke, más módszerrel, például piknométeres méréssel is megbecsülhető, addig a következő jellemzők non-destruktív módszerek nélkül nehezen, vagy egyáltalán nem meghatározható talaj paraméterek. Ezek elsősorban a diffúziós modellek fejlesztéséhez és/vagy talaj hidraulikus vezetőképesség vizsgálatokhoz nagyon hasznosak.

Átlagos makropórus méret:

A 3. táblázatban Átl. méretként jelölt adatsor a pórusok összméretének számtani átlaga mm^{-3} -ben, amely elsősorban a porozitást adó voxelcsoportok sokaságára jellemző adat az egyes talajminták esetén, és amelynek értékét befolyásolhatja a talajban található nagyobb törések, nagy sűrűségben jelentkező gyökérszövet, vagy állati eredetű járatok.

Érdekes megfigyelni az értékek változását a küszöbértékek függvényében. ID-T és KO-T mintákra egységes becslést kaptam (ID-T_{Th1}: 10,076 mm^3 ; ID-T_{Th2}: 11,184 mm^3 ; ID-T_{Th3}: 10,736 mm^3 ; KO-T_{Th1}: 14,255 mm^3 ; KO-T_{Th2}: 17,638 mm^3 ; KO-T_{Th3}: 17,647 mm^3), míg EL-T minta esetén különös változás tapasztalható (EL-T_{Th1}: 31,487 mm^3 ; EL-T_{Th2}: 24,915 mm^3 ; EL-T_{Th3}: 54,629 mm^3). Az EL-T mintában detektált voxelcsoportok száma a következőképpen változott: Th₁= 5091; Th₂= 8916; Th₃= 16421. Ez azt jelenti, hogy a Th₁ és Th₂ intervallumba foglalt voxelek jórészt különálló, egymástól elszigetelt pórusokként szerepeltek a talajmátrixban, majd Th₃ mellett tapasztalt ugrásszerű változás annak köszönhető, hogy a 61–289 HU közé eső voxelek a kis különálló póruszsigetek összekötő voxeleit kódolják a már meglévő nagy pórustérrel, annak ellenére, hogy az összes pórusmennyiség 7505 darab voxelcsoporttal növekedett. Mindez megint a talajok sokszínűségének bizonyítéka, hiszen a HU-skálán ugyan abban a tartományban EL-T-nél (228 HU) közel akkora elmozdulás történik mint ID-T-nél (263 HU). Ahhoz, hogy megállapítsam mennyire jelentős ez az EL-T minta pórustérfogat átlagában jelentkező különbség a többi mintához képest, leellenőriztem a Dixon próba nullhipotézisét a feltételezhetően kiugró adatként jelentkező 54,629 mm^3 értékre a teljes 24 mintából álló adatsorra, és csak a Th₃-hoz kapcsolható 8 minta adatsorára vonatkozólag. Ennek eredményeként egyik esetben sem állapítható meg szignifikáns eltérés ($Q_{24\text{minta}} = 0,334$; $Q_{24;95\%} = 0,413$; $Q_{8\text{minta}} = 0,339$; $Q_{8;95\%} = 0,554$). Itt meg kell említenem újra a CT-s vizsgálatokban rejlő hatalmas lehetőségeket, amely alapján vizuális magyarázat is adható az eltérésekre (5. és 8. ábra), miszerint EL-T minta alsó felében egy jelentős térfogattal rendelkező gyökér húzódik, amely térbeli kiterjedésére és alakjára vonatkozó vizsgálatok a pusztán adatok alapján nem lenne lehetséges. A küszöbérték megemelésével befoglalásra kerülnek azok a voxelek, amelyek a sokkal kiterjedtebb járulékos gyökerek mentén húzódó térfogathoz kapcsolhatók. Így a 3. táblázatban feltüntetett legnagyobb pórusértékek változása valóban reálisan értelmezhető az átlag pórustérben talált egy mintára vonatkozó eltérésekre.

A talajokra vonatkozó átlagos pórusméret adatai az effektív makroporozitással₂ lineáris kapcsolatban állnak ($r_{Th1} = 0,555$, $p < 0,900$; $r_{Th2} = 0,737$, $p < 0,975$; $r_{Th3} = 0,647$, $p < 0,950$), míg a szemcseméret-eloszlással nem korrelálnak.

Teljes makropórus-felület:

3. táblázat felületkén megnevezett adatok a voxelcsoportok kumulált felületiértékét jelentik mm²-ben. Ebből nem csak az általános talajfizikai tulajdonságokra következtethetünk, mint például a felületi kötőképeség, hanem olyan érdekes határtudományok kutatások alapja is lehet, mint a talajfelület érdekessége, amely kapcsolatba hozható a talajlakó mikroarthropódák élőhelyével (Kampichler és Hauser 1993), vagy a talajpórus-felületből számolt fraktál paraméterekkel, amely mutatókat a talajdegradáció függvényében vizsgálják (Pachepsky et al. 1995).

Az elvártaknak megfelelően, a teljes makropórus-felület szoros kapcsolata a makroporozitással jól visszatükröződik az erős lineáris regresszióban ($r_{Th1} = 0,882$, $p < 0,995$; $r_{Th2} = 0,944$, $p < 0,995$; $r_{Th3} = 0,915$, $p < 0,995$), amely minden esetben a legmagasabb valószínűségi szint mellett is szignifikáns.

Ez teljes összhangban van Luo et al. (2010) és Zhu et al. (2010) kutatási eredményeivel, ezért Th₁ mellett LA-T rendelkezik a legnagyobb (346937,567 mm²), míg MO-T (75332,976 mm²) a legkisebb felülettel. Th₂-nél szintén LA-T (908260,64 mm²), majd ID-T (188486,79 mm²), majd Th₃-nál LI-T (1175427,122 mm²) és MO-T (402770,0021 mm²) lesz az adatterjedelmet meghatározó minta. A küszöbérték szintek mellett tapasztalható növekedés mértéke attól függ, hogy a befoglalt voxel új, teljesen önálló és elszigetelt pórussteret képvisel az adatmátrixban, így a teljes voxelfelülettel növelve a talajra vonatkozó összes felületiértéket, vagy a már detektált pórustérhez/terekhez kapcsolódik oldalaiival. Ennek értelmében megalapozott lenne legalább egy közepes erősségű lineáris kapcsolat feltételezése a detektált makropórusok számával. Amíg Th₁ ($r_{Th1} = 0,868$, $p < 0,995$) és Th₂ esetén ($r_{Th2} = 0,628$, $p < 0,950$) szignifikáns kapcsolatot mutatnak az adatok, addig Th₃-nál már nem szignifikáns a kapcsolat a változók között (csak 30%-os elsőfajú hiba mellett), és maga a korreláció is nagymértékben gyengült ($r_{Th3} = 0,252$).

Ennek a tendenciának megfelelően szintén a küszöbérték növelésével gyengül az agyagtartalommal mutatott korreláció ($r_{Th1} = 0,731$, $p < 0,975$; $r_{Th2} = 0,592$, $p < 0,900$; $r_{Th3} = 0,529$, $p < 0,900$), míg a többi szemcseméret-tartománnyal értékelhető kapcsolat nem található.

Makropórus hálózatok sűrűsége:

A makropórus hálózatok sűrűsége (Hál. sűrűség), az adatok alapján, egy köbméterben található voxelcsoportok mennyiségét mutatja, amely elsősorban a talaj vízháztartását kutató vizsgálatok

középpontjában áll (Perret et al. 1999, Koekkoek és Booltink 1999). Mivel ez egy származtatott adat, ezért természetes, hogy e változó és a pórusok száma között majdnem mind a három esetben tökéletes lineáris regresszió áll fenn. Így ugyanaz a kapcsolati minőségromlás figyelhető meg a küszöbérték emelés során a makropórus hálózat sűrűségértékek és a pórustér teljes makropórusfelület értékei között. Azonban érdekes megemlíteni, hogy csak Th_1 esetén található szignifikáns korreláció a talaj-agyagtartalommal ($r_{Th_1} = 0,874$, $p < 0,995$), a többi küszöbérték mellett már nem áll fenn kapcsolat a változók között.

Az 1000 mm^3 -nél nagyobb pórusok százalékos aránya a teljes porozitásban, POM (100%):

A POM (100%) Luo és munkatársai (2010) által javasolt mutató, amely az 1000 mm^3 -nél nagyobb pórusok százalékos arányát mutatja az összes porozitásban. Egyéb vizsgálatok nélkül ez a mutató arra enged következtetni minél nagyobb százalékos arány mellett, hogy a vizsgált talaj valószínűleg jól kapcsolt pórushálózattal vagy esetlegesen egy nagy belső repedéssel, töréssel rendelkezik. A 8. ábrában LA-T mintánál látható, hogy a talaj elvált a mintavevő hengertől száradás közben. Ez és a többi a mesterségesen létrehozott „pórustér”, mint például a mintavételi üvegek által kialakított jellemzően hengersizű, mesterséges levegővel töltött térfogatok, minden esetben egyedi azonosításra kerültek és értéküket kétszeres szegmentációs szűrűn keresztül kivontam az össztérfogatból. Ez a folyamat a következő lépésekből állt: a jelölő algoritmus segítségével lehetőség van visszakeresni a vizsgálni kívánt pórust, és egyszerű szűrés segítségével értékét kivonni a teljes porozitásértékből, de ha a mesterséges térfogat a talajban lévő pórustérhez is kapcsolódik, amire minden esetben lehet számítani, akkor a talajmátrixban található természetes pórusokat képviselő voxelek értéke is elveszik. Ezért kell egy elválasztó térfogat részt kijelölni, amely jó közelítéssel a minta oldala mentén húzódik és elsősorban csak a mesterséges térfogatot kódoló voxeleket tartalmazza. Kizárólag erre a térfogat egységre vonatkozólag a 3. fejezetben már tárgyalt lépések szerint újra el kell jutni a jelölő algoritmusig, és az így kapott térfogatértékkel csökkenteni kell az eredetileg számolt pórustérfogatot. Habár a munka elég időigényes az egyedi azonosítások miatt, de ebből kifolyólag a térfogatérték kiértékelését terhelő hiba jelentősen lecsökken, és a POM (100%) értéke sem lesz félrevezető.

Logikus az a tendencia, hogy minél több voxelt nevezünk ki levegővel töltött pórustérnek, annál nagyobb a valószínűsége, hogy a különálló voxelcsoportok közötti teret jelölő voxelek bevonásra kerülnek és egy magasabb kapcsolódási fokkal rendelkező, nagyobb össztérfogattal rendelkező pórushálózatot hoznak létre. Ennek a feltevésnek minden minta megfelel, csak MO-T mintánál van eltérés, ahol az tapasztalható, hogy először a pórustér körülbelül 79%-át teszi ki az 1000 mm^3 -nél nagyobb pórusok száma, majd ez lecsökken 67%-ra, Th_3 -nál meg újra növekedés tapasztalható,

amely végül 73%-ot ér el. Ennek a mintának a legnagyobb a homoktartalma (62,34%), amely alapot adott arra, hogy megvizsgáljam a POM (100%) és szemcseméret-eloszlások közötti kapcsolatot. Ennek eredményeként a frakciókkal alkotott lineáris kapcsolat kimondottan gyenge (Th_1), vagy nem létezik, azonban hatványfüggvény alapú korreláció jellemzi a Th_1 és homoktartalom százalékos értéke közötti kapcsolatot ($r^2 = 0,591$). A kapcsolatot leíró függvény egyenletében $y = 21,46x^{0,315}$ a kitevő jelenti az úgynevezett elaszticitási együtthatót, amely meghatározza a hatványfüggvény lefutását. Mivel értéke nulla és egy közé esik, ezért a függvény rugalmatlan, lassú növekedést jelöl. A kitevő értéke határozza meg, hogy x értékének egy százalékos emelése hány százalékos változást okoz y értékében. A statisztikai kiértékelés egysége érdekében a kapcsolat sztochasztikus jellegének ellenőrzésére először természetes alapú logaritmikus átalakítást végeztem, majd megvizsgáltam az $\ln(x)$ és $\ln(y)$ változók közötti lineáris kapcsolat szorosságát a már korábban alkalmazott módon, amelynek eredménye, hogy a kapcsolat $p < 0,975$ -es valószínűségi szint mellett szignifikáns a Pearson-féle korrelációs együttható pedig $r = 0,764$ lesz. A küszöbérték emelésével a kapcsolat szorossága lényegesen romlik, Th_3 -nál már csak $r = 0,547$, amely $p < 0,900$ mellett lesz éppen hogy szignifikáns.

Érdekes módon, ahogy a homok frakcióval való kapcsolat gyengül, úgy erősödik a Makroporozitás₂ értékeivel. Ez esetben már lineáris összefüggésről van szó. Th_1 esetén nem található korreláció ($r = 0,290$), Th_2 -nél viszont szoros kapcsolat áll fenn a két változó között ($r = 0,849$, $p < 0,995$), amelynek determináltsági együtthatója ($r^2 = 0,720$), így a makroporozitás értéke alapján 72%-ban megbecsülhető a nagyméretű pórusok száma. Th_3 mellett ($r = 0,773$, $p < 0,975$) ez az érték 59%-ra csökken.

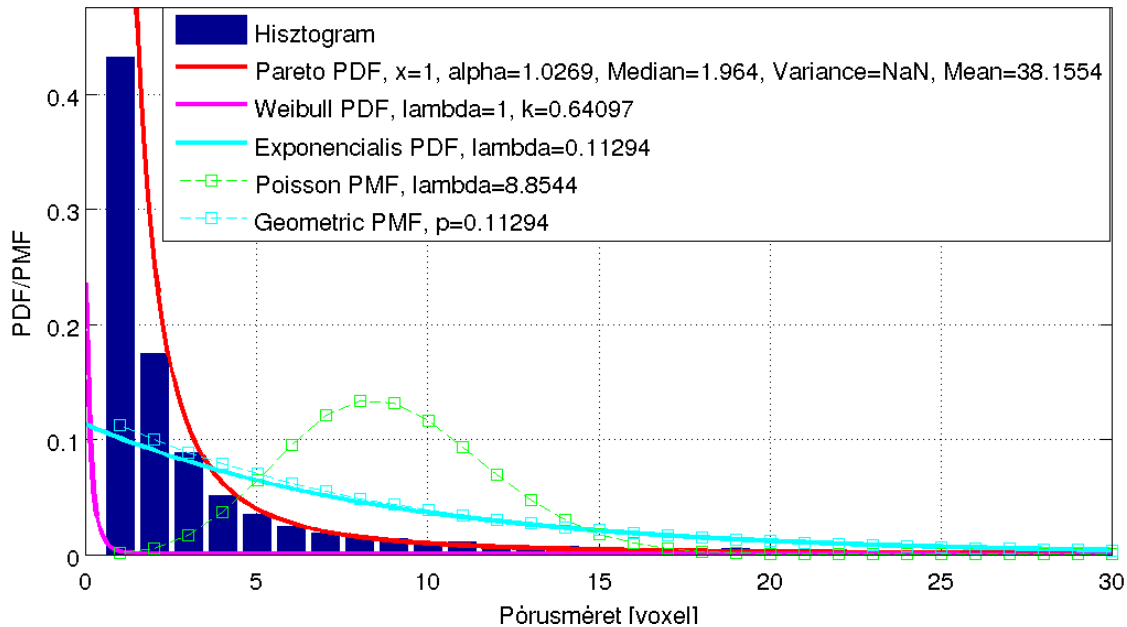
Mindezek alapján úgy gondolom, hogy ha a statisztikai mutatók a POM (100%) és egyéb talajparaméterek között, minden esetben közel azonos eredményre vezettek volna, akkor a két változó közötti regresszió jelenlétét megalapozottnak tekinteném. Viszont jelen esetben, a mintaszám növelése nélkül, ezek a kapcsolatok, habár bizonyos esetben szignifikánsak, mégsem állnak egyértelműen leírható viszonyban, amelyre alapozni lehetne például egy diffúziós modellfejlesztés esetén a porozitásból becsült POM (100%) értékének paraméterként való beépítését.

α :

A 3. táblázatban található alfa (α), egy általunk tesztelésre javasolt paraméter, amely a következőképpen állítható elő:

A jelölő algoritmus segítségével a már bemutatott módon kaptam pontos képet egyesével az összporozitást alkotó voxelcsoportok térfogatáról, amelynek sorba rendezése egyúttal az adott

talajra vonatkozó pórustér méret szerinti eloszlását mutatja. Erre számos eloszlásfüggvényt teszteltem, amelyek közül a Pareto eloszlás (Grimshaw 1993) illeszkedett a legjobban. Ezt példázza a 9. ábra, amelyben csak pár illesztés képe látható, továbbá a 6. mellékletben megtalálható az illesztésre vonatkozó Matlab program.



9. ábra: Egy 13347 voxelcsoportból álló minta hisztogramjának releváns része. Az illesztett függvény típusától függően: PDF-sűrűségfüggvény (probability density function)/PMF-valószínűségi eloszlás (probability mass function)

A Pareto eloszlás maximum likelihood függvénye (legnagyobb valószínűség elve) (Grimshaw 1993):

$$L(\alpha, x_m) = \prod_{i=1}^n \alpha \frac{x_m^\alpha}{x_i^{\alpha+1}} = \alpha^n x_m^{n\alpha} \prod_{i=1}^n \frac{1}{x_i^{\alpha+1}} \quad (41)$$

amelyben α és x_m a becslés paraméterei az x_1, x_2, \dots, x_n elemű mintának.

$$x_m = \min_i x_i \quad (42)$$

ahol x_i a i . pórus méretét jelenti, ezért x_m a legkisebb pórus térfogata, vagyis egy darab voxel térfogatával egyenlő, amely természetesen minden mintánál egyező lesz, mivel a CT képek felbontása talajonként egységes.

α értéke a következők alapján lett számolva:

$$\alpha = \frac{n_p}{\sum_{i=1}^n (\ln x_i - \ln x_m)}, \quad (43)$$

amely kifejezésben n_p a pórusok számát jelenti. Ennek értelmében az α a talaj pórusméret

eloszlására jellemző paraméter, amely a diffúziós modelleknél kap nagyobb hangsúlyt.

Alfa paraméter és az eddig bemutatott talajparaméterek között, csak Th_2 és Th_3 esetén találhatunk szignifikáns összefüggéseket. α jól korrelál a POM (100%) értékekkel ($r_{Th2} = 0,800$, $p < 0,990$; $r_{Th3} = 0,771$, $p < 0,975$). A szemcseméret és a pórusméret eloszlás kapcsolatát vizsgálva azt vártam, hogy α paraméter és az agyagtartalom szoros kapcsolatban állnak, azonban ez a feltételezés nem bizonyosodott be. Dewhurst et al. (1998, 1999) és Kwon (2004) kapcsolódó kutatásai, arra az eredményre vezettek, hogy az agyagtartalom szignifikánsan változik a pórusméret eloszlással, azonban csak 40-67%-os agyagtartalom tartományban. Jelen kutatás keretében LA-T minta tartalmaz legmagasabb százalékban agyag frakciót, amely 5%-ban marad el a szignifikánsnak tartott tartomány alsó küszöbétől. Ezért az α és a szemcseméret-eloszlás közötti kapcsolat elvetésére vagy megerősítésére további, többféle talajtextúrát megnövelt számban képviselő vizsgálatok szükségesek.

Hosszsűrűség:

Ez az adat a talajvázból számolt maximális makropórus hosszúságok egy m^3 talajra átszámolt értékét mutatja be km-ben. Talajonként a két küszöbérték közötti eltérés átlagosan $9,75 \text{ km m}^{-3}$. Mivel minden voxelcsoportban húzódik egy vázalkotó tengely, amely hozzájárul a hosszúsűrűség értékéhez, ezért várható volt szignifikáns kapcsolat a voxelcsoportok számával, amely Th_1 esetén igen meggyőző ($r = 0,934$, $p < 0,990$). A kapcsolat szorossága csökken Th_2 esetén ($r = 0,767$, $p < 0,950$), amely azért még természetesen szignifikáns (pontos szignifikancia szintje egy ezreddel marad el a $p < 0,975$ határtól). A makroporozitás₂ értékei is szorosan korrelálnak a hosszúsűrűséggel ($r_{Th1} = 0,817$, $p < 0,975$; $r_{Th2} = 0,856$, $p < 0,990$). Szintén várható volt, hogy a teljes pórusfelület nagyon magasan korrelál a hosszúsűrűséggel, mivel a váz mentén futó pórusok voxelei adják a felületet ($r_{Th1} = 0,983$, $p < 0,999$ és $r_{Th2} = 0,950$, $p < 0,999$). Ugyan ilyen megfontolás alapján, mivel a hálózati sűrűség egy származtatott érték, ezért a voxelcsoportokkal azonos módon korrelál ($r_{Th1} = 0,930$, $p < 0,999$ és $r_{Th2} = 0,768$, $p < 0,950$).

Ez a paraméter kapcsolatban áll még az agyagtartalommal ($r_{Th1} = 0,795$, $p < 0,975$; $r_{Th2} = 0,733$, $p < 0,950$).

Elágazások sűrűsége:

Az elágazások, vagy kapcsolódási pontok sűrűsége az egy m^3 -re átszámolt voxelek mennyisége, amelyeknek kettőnél több 1 értékkel rendelkező szomszédja van a vázrendszerben. A póruskapcsolatok száma jelentős kihatással van az egy- vagy multifázisú talajtranszport folyamatokra (Lowry és Miller 1995).

Ugyan úgy, mint az előzőeknél, ennek a paraméternek is, természeténél fogva, korrelálni kell a voxelcsoportok számával, amely mint előző esetben Th_1 -nél ($r = 0,814$, $p < 0,975$) sokkal szorosabb kapcsolatot mutat, míg Th_2 esetén az első fajú hiba már 10,2%-ra nőtt ($r = 0,619$, $p < 0,800$). Az újrantedvesített állapothoz kapcsolható makroporozitással nagyon szoros kapcsolat látható mindkét esetben ($r_{Th1} = 0,710$, $p < 0,950$; $r_{Th2} = 0,922$, $p < 0,995$). Érdekes módon a teljes pórusfelülettel sokkal meghatározóbb ennek a paraméternek a kapcsolata, mint például az voxelcsoportok számával vagy a makropórus ($r_{Th1} = 0,902$, $p < 0,995$; $r_{Th2} = 0,980$, $p < 0,995$). Míg Th_1 esetében szignifikáns kapcsolat lesz érthető módon a hálózati sűrűséggel ($r = 0,802$, $p < 0,975$), addig Th_2 az α paraméterrel korrelál ($r = 0,812$, $p < 0,975$). A hossz sűrűséggel való kapcsolat, szintén logikus, hogy minél hosszabb a pórusok váza által összesített úthossz, annál valószínűbb, hogy a hosszúsággal nő a kapcsolatok száma is ($r_{Th1} = 0,920$, $p < 0,995$; $r_{Th2} = 0,958$, $p < 0,995$). A szemcseméret-eloszlás tekintetében a frakciók közül itt is az agyagtartalom lesz meghatározó, azonban ezek a kapcsolatok viszonylag alacsony valószínűségi szint mellett mutatnak korrelációt ($r_{Th1} = 0,663$, $p < 0,900$; $r_{Th2} = 0,686$, $p < 0,900$).

Tekervényesség (tortuozitás), τ :

Amint már említettem, hogy a talaj tekervényessége számos esetben szerepel modell paraméterként, hiszen minél finomabb szövettel rendelkezik egy talaj, annál többféle út áll a transzportfolyamatok rendelkezésére. Azonban ennek a paraméternek a becslése elég körülményes, ezért a tekervényességet tartalmazó munkákban jelentős eltérés található a meghatározás tekintetében.

Jelen munkában a tekervényesség meghatározását arra a gondolatmenetre alapoztam, hogy a 100 mm-nél rövidebb hosszúsággal rendelkező pórusváz, azokhoz a pórusokhoz kapcsolhatók, amelyek például vízhártyával elzárt, holt tereket alkotnak, vagy csak a CT felbontás alá eső pórusméretekkel kapcsolódnak más pórusokhoz. Ezért ez a paraméter a 100 mm-nél nagyobb pórusvázak átlaghosszúságának aránya a teljes talajhosszhoz képest, így ez egy mértékegység nélküli szám.

A két adatsort összehasonlítva, míg első esetben az értékek alig szórnak ($SD_{Th1} = 0,661$), addig a második küszöbérték mellett jelentősen megemelkedik az adatsor szórása $SD_{Th2} = 27,170$, amely, LA-T (81,682) mintánál tapasztalható értéknek köszönhető. Dixon-féle Q tesz alapján, LA-T tekervényességi tényezője a legmagasabb valószínűségi szint mellett is kiugró értéknek számít, amelyet azért érdemes kihangsúlyozni, mert Th_1 szerinti értékelés esetében csak a harmadik legnagyobb tekervényességgel rendelkező talaj. A τ többi paraméterrel való kapcsolatáról az mondható el, hogy Th_1 esetén csak α -val korrelál pozitívan ($r = 0,716$, $p < 0,950$). Th_2 féle eredmény interpretációban a makroporozitással ($r = 0,725$; $p < 0,950$), az átlagpórus mérettel ($r = 0,727$, $p < 0,950$) és a teljes pórusfelülettel ($r = 0,672$, $p < 0,900$) van szorosabb kapcsolata. Érdekes

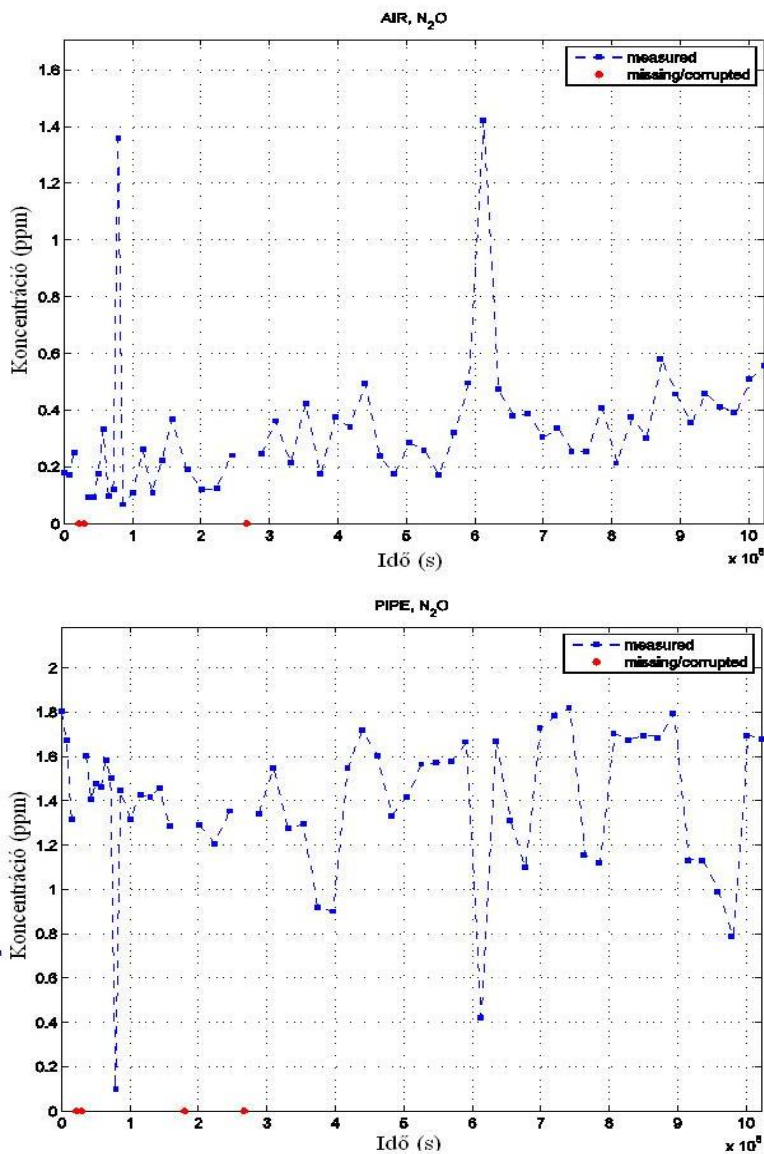
módon az agyagtartalommal kimondottan gyengén korrelál mindkét esetben, és a kapcsolat semmi esetre sem szignifikáns.

Az itt tárgyalt paraméterek egymáshoz viszonyított kapcsolatuk feltárására azért volt szükség, mert a diffúziós kísérlet kiértékelése során kapott eredményeknél megkíséreltem a diffúziót szignifikánsan befolyásoló paraméterek beazonosítását.

4.2. A diffúziós kísérlet eredménye

A talajokhoz kapcsolható D_g érték meghatározásának eredménye:

A kiértékelés mindent átfogó, részletes eredmény sorozatát egy több száz oldalas mérési jegyzőkönyv tartalmazza, amelyből tartalmi korlátok miatt a jelen dolgozatomban csak egy mintára vonatkozó eredmény kivonatolt ábráját mutatom be egy gáz esetén. A példaként a dinitrogén-

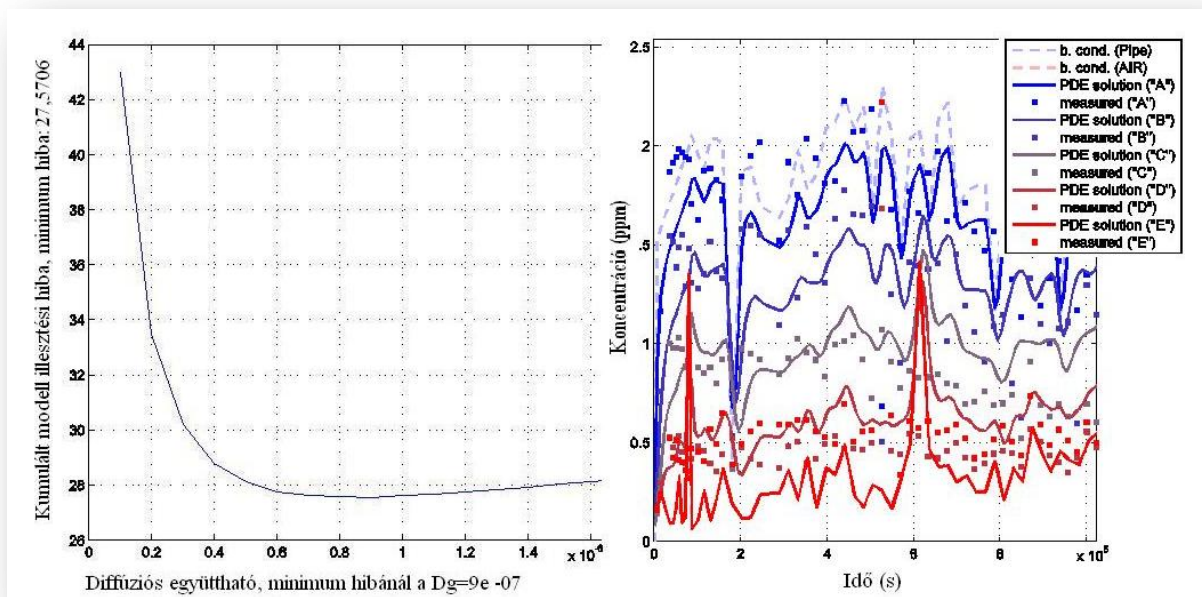


10. ábra: A légtér (AIR) és gázcső (PIPE) mintavételi pontokban mért koncentrációváltozás

pontok koncentráció változásaiban két jelentősen kiugró mérési érték látható, azonban ezeket a pontokat nem minősíthetem egyértelműen hibás mérési adatoknak, mivel a különböző szinteken mért koncentrációértékek követik ezt a változást, azaz a mérési adat valós értéket tartalmaz.

oxid gáz diffúziójának kiértékelését választottam, amit MO-T minta segítségével mutatok be. A 10. ábra a talaj felett lévő légtér („AIR”) és a gáztartály csövéből („PIPE”) vett minták koncentrációértékeit ábrázolja az idő függvényében. A mért értékekre mindenhol egységesen a kék (téglalap) jelölést használtam. Az x tengelyen megjelenő piros kör alakú jelek mérési hibákat vagy hiányzó mérési adatokat jelentenek, ezzel helyenként szakadást okozva a mért értékeket összekötő, szaggatott vonalú görbében, amely a következő érvényes mérés értékétől folytatódik. Mint azt később látni fogjuk, a kiugró mérési értékek komoly kihatással vannak az eredményekre. A „PIPE” és az „AIR” mérési

Tehát az „AIR” és „PIPE” adatait peremfeltételnek használtam a 32. egyenlet megoldásában, amely után következett D_g értékével való iteráció segítségével annak a pontnak a definiálása, ahol a hibanégyzetek összege eléri minimumát (11. ábra). Ennek eredményeként minden talajmintára megkaptam az adott gázhoz tartozó diffúziós együttható értékét (D_g), amely jelen esetben MO-T mintára $9 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$. A kiértékelés összefoglalását az 5. táblázat tartalmazza. ID-T taljoszlop gázmintáinak koncentráció mérése során rendszer hiba lépett fel, az adatok egyértelmű helytelensége miatt ezt a mintát kizártam a további kiértékelési folyamatból.

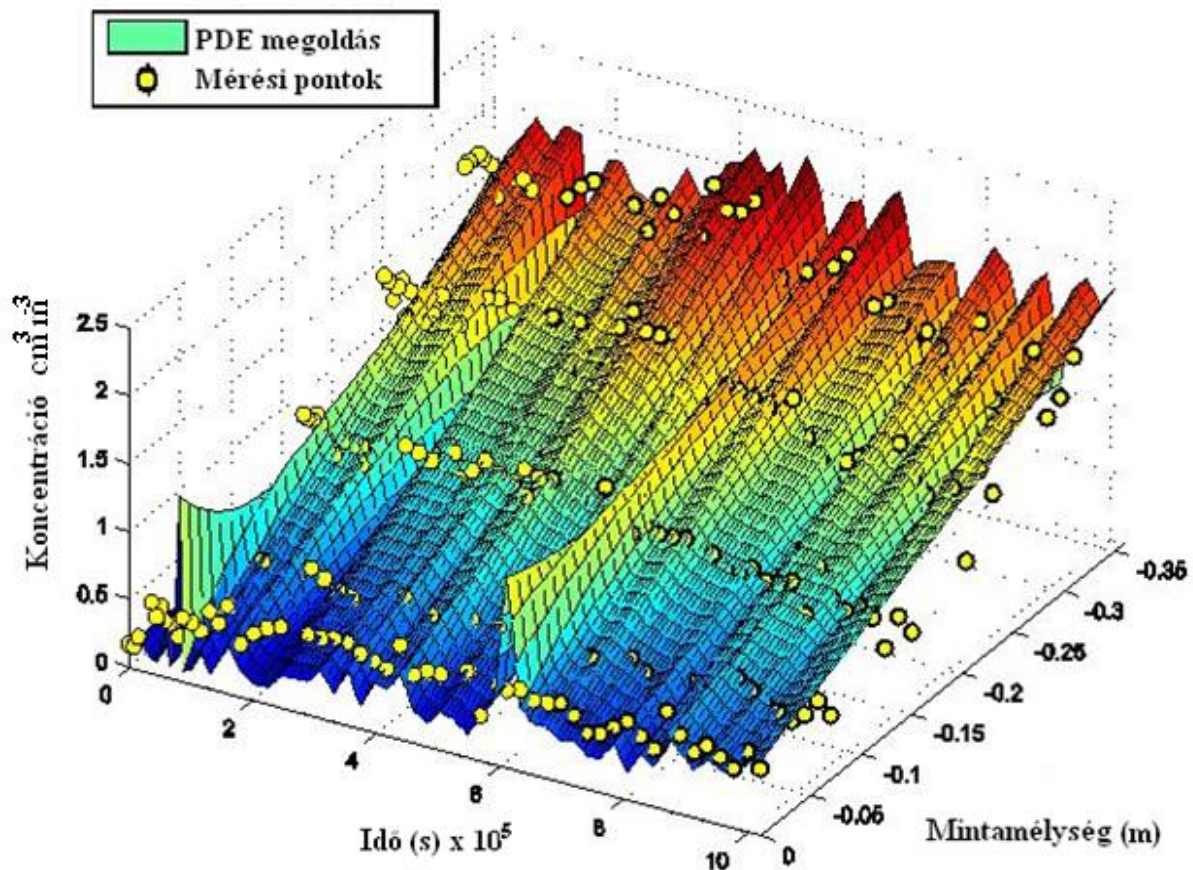


11. ábra: Modell illesztés hiba MO-T talajoszlopnál N_2O gáz esetén: jobb oldalt A, B, C, D, E mérési szintekhez kapcsolható parciális differenciálegyenlet megoldása (32. egyenlet), bal oldalt D_g értékének változása a hiba függvényében

Az egyes talajokra kapott gázdifúziós értékeket normalizáltam az adott gázra vonatkozó azonos nyomáson és hőmérsékleten, szabad levegőben mért diffúziós együtthatóval, hogy megkapjam a talajt jellemző relatív diffúziós tényezőt (Tuli 2002, Lange et al. 2009). Az általam használt diffúziós együtthatók standard körülmények között: (D_0) CO_2 -re szabad levegőn $1,39 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ (Gaudinski et al. 2000), N_2O -ra $1,43 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ (Pritchard and Currie 1982), CH_4 -ra (Khvorostyanov et al. 2008, von Fischer et al. 2009) és SF_6 -ra $9,63 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ (Santella et al. 2003).

5. táblázat: A talajmintáknál mért diffúziós együtthatók (D_g) és a relatív diffúziós együtthatók (D_g/D_0) különböző gázok esetén

Minta ID	CO ₂		N ₂ O		CH ₄		SF ₆	
	D_g	D_g/D_0	D_g	D_g/D_0	D_g	D_g/D_0	D_g	D_g/D_0
DU-T	$1,4 \times 10^{-07}$	0,0101	2×10^{-07}	0,0140	$2,7 \times 10^{-07}$	0,015864	$1,9 \times 10^{-06}$	0,197308
EL-T	6×10^{-08}	0,0043	4×10^{-07}	0,0280	$3,1 \times 10^{-07}$	0,018214	$1,3 \times 10^{-08}$	0,00135
ID-T	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
KI-T	9×10^{-08}	0,0065	6×10^{-08}	0,0042	4×10^{-09}	0,000235	$1,8 \times 10^{-06}$	0,186923
KO-T	$1,1 \times 10^{-08}$	0,0008	$1,5 \times 10^{-08}$	0,0010	7×10^{-07}	0,041128	$1,7 \times 10^{-13}$	$1,77 \times 10^{-08}$
LA-T	5×10^{-07}	0,0360	3×10^{-07}	0,0210	8×10^{-08}	0,0047	2×10^{-06}	0,207692
LI-T	4×10^{-08}	0,0029	$1,2 \times 10^{-07}$	0,0084	$3,1 \times 10^{-06}$	0,182139	8×10^{-09}	0,000831
MO-T	2×10^{-07}	0,0144	9×10^{-07}	0,0629	$2,1 \times 10^{-07}$	0,012338	5×10^{-06}	0,519231



12. ábra: MO-T talajoszlop numerikus adatillesztése minimum hiba mellett, a modellillesztés hibája

N_2O gázra: $Err_A = 13,83\%$

Végül, ahogy azt a 12. ábra is mutatja a koncentráció, idő és mélység adattérben, minden gázra

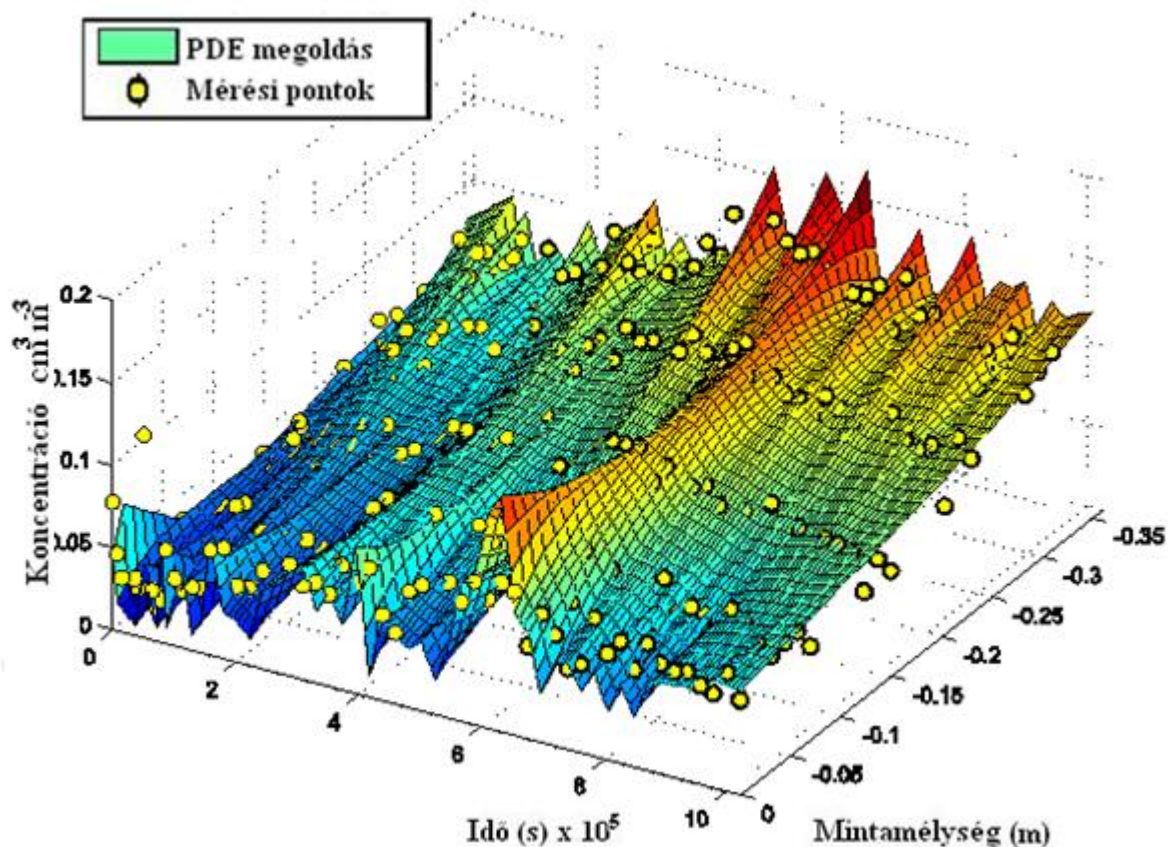
elvégeztem újra a 32. differenciálegyenlet megoldását az előbb definiált talajra jellemző D_g érték felhasználásával. A következőekben ezekre az eredményekre és az alkalmazott gázok általános tulajdonságaira támaszkodva végeztem el a gázkoncentráció változásának kiértékelését a tíznapos vizsgálati periódusra vonatkozólag.

Széndioxid:

A CO₂ emisszió a globális klímaváltozás miatt jelenleg az egyik legaktívabban kutatott terület a talajgázok gázkibocsátását tekintve (Trumbore et al. 1996, Liski et al. 1999, Cox et al. 2000, Tang et al. 2003, Jianwu et al. 2003, Bálint et al. 2010, Shi et al. 2012). A legtöbb talajmodell a széndioxid kibocsátást a talaj hőmérséklete és talajnedvesség-tartalom függvényében vizsgálja (Treonis et al. 2002, Tang et al, 2003), azonban az eltérő mérési módszereknek és a nem egységes parametrizációnak következtében jelentős eltérések találhatók a kibocsátásra vonatkozó eredmények, megállapítások és becslések között.

A széndioxid moláris tömege 44,01 g mol⁻¹, sűrűsége 0,145 g 100 cm⁻³ (293 K; 0,1 mPa) és oldhatósága 0,1688 g 100 g vízben (293 K; 0,1 mPa). A levegő moláris tömege 29 g mol⁻¹ és sűrűsége 1,1843 kg m⁻³ standard körülmények között.

A legtöbb mintánál a talaj főtengelyére vett koncentráció gradiens megközelítőleg egyenletes volt. Habár a sterilizáció miatt a mikrobiális eredetű CO₂ hatásokat nem kellett figyelembe vennem, azonban a talajok nedvességtartalma szerepet játszott a kibocsátásnál. A különböző nedvességtartalmak a három küszöbérték mellett eltérnek. Th₁ mellett átlagosan 0,066 m³_{talajvíz} m⁻³_{talaj} ($SD=0,0169$), Th₂-nél 0,095 m³_{talajvíz} m⁻³_{talaj} ($SD= 0,033$) és Th₃-nál 0,129 m³_{talajvíz} m⁻³_{talaj} ($SD= 0,067$) a talajok becsült víztartalma, azonban egyik becslési mód mellett sincs szignifikánsnak nevezhető kapcsolat a víztartalom és a talajok D_g/D_0 értéke között. A laboratórium légkondicionáló készülékének köszönhetően a CO₂ háttérkoncentráció körülbelül 500-1100 cm³ m⁻³ kötött változott a kiugró értékektől eltekintve. Például a KI-T minta mérésorozatánál 30. órával a mérés indítását követően a levegőben mért érték egy mérés erejéig megközelítette a 3000 cm³ m⁻³ koncentrációt, majd lecsökkent az átlagos, normál szintre. Ezek az extrém magas, levegőben mért CO₂ értékek valószínűleg a laboratóriumban folyó más kísérletek miatt alakultak ki. MO-T mintánál is látható, hogy amint megemelkedik a háttér koncentrációban a széndioxid tartalom, a rendszer gyorsan reagál a változásra: mivel a potenciál különbség lecsökken, a diffúziós folyamat lelassul, amelynek eredményeként a talaj „A” szintjén mért koncentráció ugrásszerűen megemelkedik (13. ábra) az előzőekben tapasztalt koncentrációnövekedésekhez képest. A széndioxidra vonatkozó leggyorsabb gázdifúziót LA-T mintánál ($D_g/D_0= 0,0360$, $Err_A= 3,17\%$) , a leglassabbat KO-T ($D_g/D_0= 0,008$, $Err_A= 1,29\%$) mértem.



13. ábra: A széndioxid koncentrációjának változása MO-T talajoszlopnál. A mintához tartozó diffúziós együttható $D_g = 2 \times 10^{-07} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ($\text{Err}_A = 1,67\%$).

Dinitrogén-oxid:

A talajok denitrifikációs és nitrifikációs folyamatának eredményeképpen keletkező dinitrogén-oxid, amelynek moláris tömege $44,0128 \text{ g mol}^{-1}$, és a levegőnél szintén nehezebb ($1,8 \text{ kg m}^{-3}$; 298 K ; $0,1 \text{ mPa}$), vízben oldódó gáz ($0,1211 \text{ g}$ 100 g vízben; $0,1 \text{ mPa}$; 293 K)

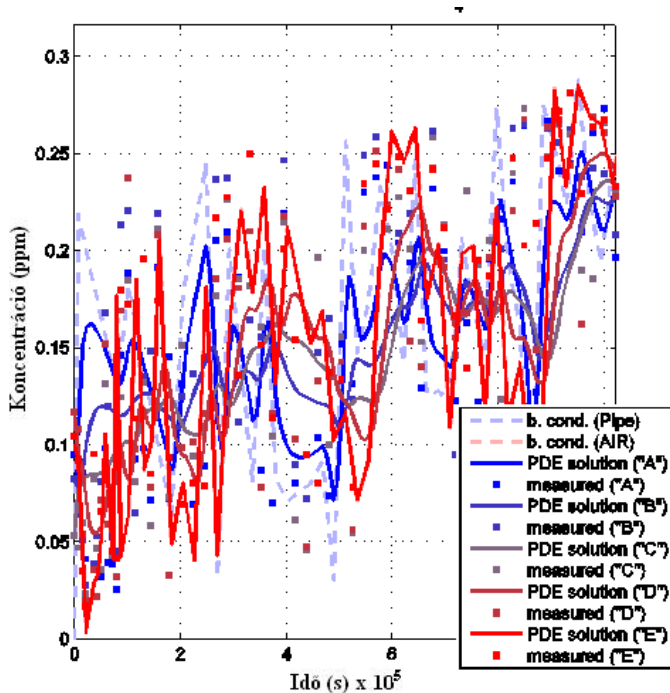
Ennek a gáznak a vizsgálata szintén kiemelten fontos, mivel a mezőgazdasági eredetű dinitrogén-oxid kibocsátás jelentős százalékát teszi ki a teljes antropogén eredetű N_2O emisszióknak. Számos modell létezik a dinitrogén-oxid emisszió leírására, amelyek a nitrogénciklus egyes alciklusai bevonásának mértékében különböznek (Bálint et al. 2004, Hárshgyi et al. 2008, Gyarmati et al. 2011). Laudone et al. (2011) szerint a különböző szerkezettel rendelkező talajok diffúziós transzport szimulációja hozzájárulhat az anaerob zónák, vagy területek azonosításához a vizsgált talajmátrixban, amely talajmikrobiológiai kutatásokat segíthet elő. Azok a kutatások, amelyek a talajprofil függvényében vizsgálták a dinitrogén-oxid koncentráció változását különböző ökoszisztémák esetén, több esetben arra jutottak mérési eredményeik alapján, hogy a talaj nedvességtartalma és a talajmikrobiális biomassza denitrifikáló tevékenysége folytán a dinitrogén-oxid nem érte el a talaj-levegő határfelületet (Chapuis-Lardy et al. 2007). Ezek alapján, illetve a

levegő dinitrogén-oxid között lévő sűrűségkülönbséget figyelembe véve azt feltételeztem, hogy lényegesen nagyobb lesz a talaj tengelye mentén tapasztalható szintenkénti koncentráció emelkedése az idővel. Ez azonban nem bizonyosodott be. A diffúzió időben kiegyensúlyozott lefutású, mint ahogy az MO-T példáján is látszik (12. ábra), mivel akkumuláció esetén az „A” pontban mért koncentrációértékek a kísérlet végén lényegesen magasabb értéket kellene mutatniuk, azaz a mérési adatokra illesztett felület az idő múlásával a magasabb koncentráció felé megdőlné.

Eredményeim alapján MO-T mintánál volt a dinitrogén-oxid gáz relatív diffúziós tényezője a legnagyobb ($D_g/D_0 = 0,0629$, $Err_A = 13,83\%$). Míg hat talaj esetén a modellillesztés hibája elfogadható, addig EL-T mintánál kiugró $Err_A = 44,18\%$ volt. A becsült talajnedvesség tartalommal való kapcsolattól csak Th_1 esetén N_2O relatív diffúziós hányados értékeknél lehet beszélni, ahol negatív korreláció tapasztalható, ($r = -0,670$, $p < 0,900$).

Metán:

A metángáz emisszió az anaerob szerves anyag lebomlásán keresztül kapcsolódik a talajhoz. Ilyen feltételek csak magas telítettség esetén keletkeznek, amely feltételek tartósan például belvíz esetén,



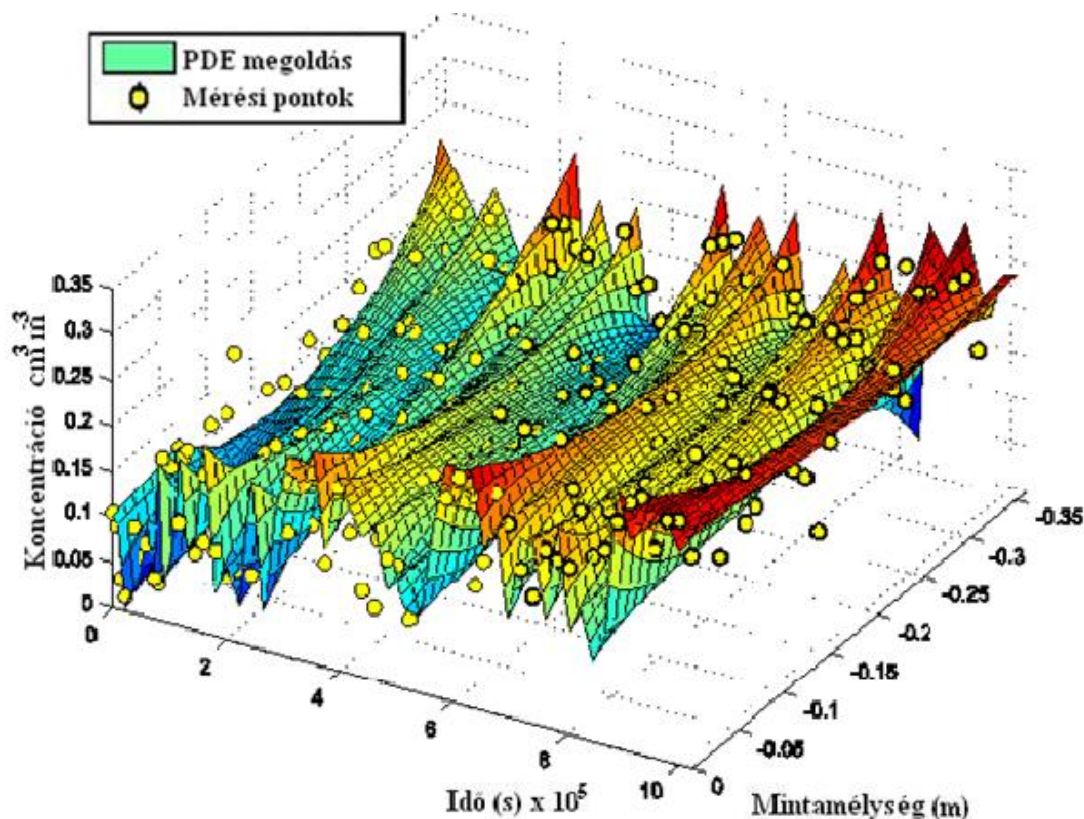
14. ábra: MO-T mintánál mért CH_4 koncentráció változása az időben

vízoldhatósága miatt is vártam. A metán gyors diffúzióját jelzi, hogy a mérési pontok között nem alakul ki jelentős koncentráció különbség, mint amely az előző gázoknál megfigyelhető volt. A diffúzió pontosabb megfigyeléséhez ezt a tapasztalatot felhasználva, emelni kell a mérések

mocsaras területeken, vagy rizsföldeken vannak. A kapcsolódó kutatások ennek megfelelően többnyire a felszín mentén vizsgálják a kibocsátás mértékét.

A metán a levegőnél könnyebb ($16,0425 \text{ g mol}^{-1}$), légköri nyomáson alig oldódik vízben ($0,002091 \text{ g 100 g vízben (298 K; 0,1 mPa)}$) és sűrűsége $0,648 \text{ kg m}^{-3}$ (298 K; 0,1 mPa). A kísérlet során a kibocsátásra illesztett felület lényegesen eltér az előző két gázétól, amelyet MO-T minta 14. és 15. ábrája is jól szemléltet. A lefutás sokkal egyenetlenebb. A mérési pontokban lassan, de folyamatosan nő a metánkoncentráció az idő múltával, amit a molekula apoláros jellege és ebből következően alacsony

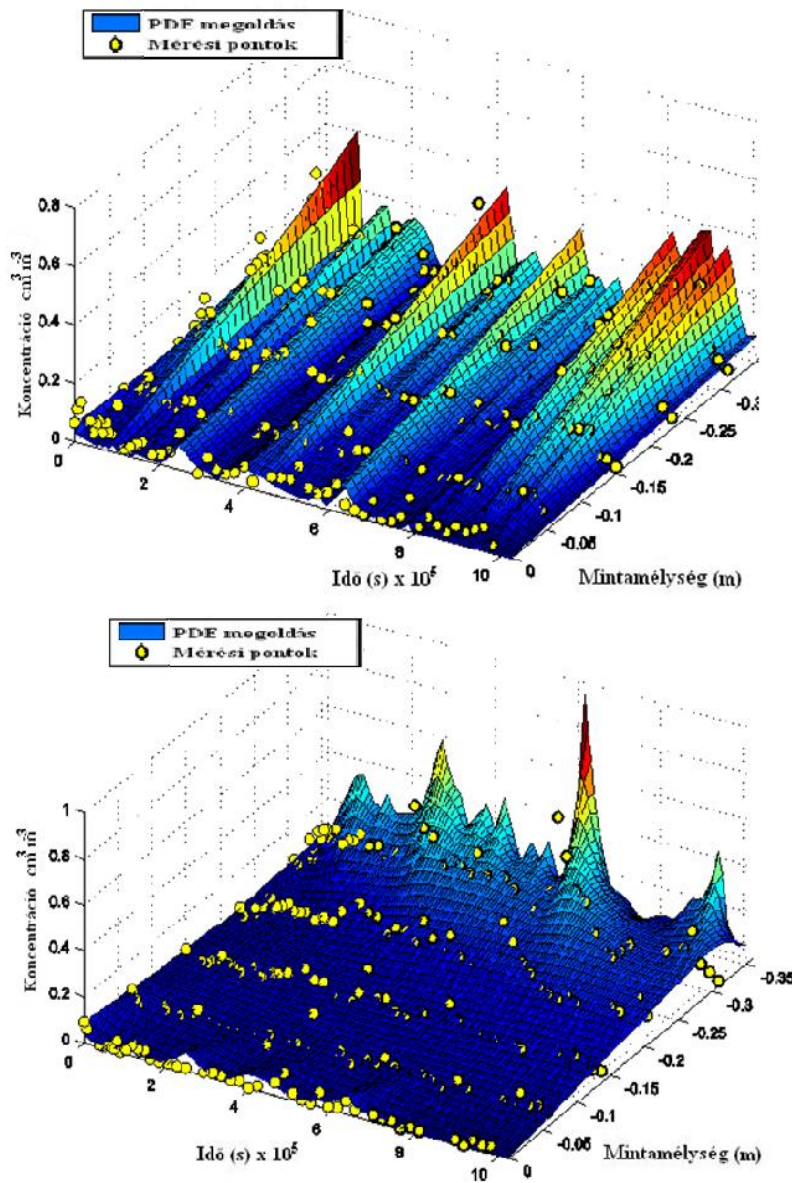
gyakoriságát apolárisabb jellegű és vízben nem oldódó gázok esetében.



15. ábra: CH_4 gázra vonatkozó numerikus adatillesztés eredménye MO-T, $\text{Err}_A = 4,91\%$

Kén-hexafluorid:

A SF_6 egy, a levegőnél ötször nagyobb sűrűségű gáz, melynek moláris tömege $146,06 \text{ g mol}^{-1}$, sűrűsége $6,164 \text{ kg m}^{-3}$ ($0,1 \text{ mPa}$; 293 K) Mint azt már a mérési módszernél említettem, ezt a gázt külön kapcsoltam a rendszerre 6 órás periódusokban. Eltekintve a szabad levegőre vonatkozó diffúziós együttható értékétől, ennél a kísérletnél a nagy sűrűségere való tekintettel, illetve a kísérleti rendszer alul zárt jellege miatt, minden esetben arra számítottam, hogy a kén-hexafluorid „leül” a talaj aljára, és jól megfigyelhető lesz a transzportfolyamat jellege. Ez a feltételezés első pillantásra helyénvalónak is tűnt a képek alapján (16. ábra), azonban alaposabban megnézve a mérési eredményeket arra jutottam, hogy ha a gáz alul a rendszerben maradt volna, akkor legalább „A” mérési szinten folyamatos koncentrációnövekedést kellett volna tapasztalnom az idő múlásával, amely egyetlen minta esetén sem volt megfigyelhető. Ebből következően szintén meglepő, hogy minden minta esetén a legtöbb mintavételezés alkalmával azt tapasztaltam, „C”, „D”, „E” mérési pontokban már nem vagy alig tudtam mérni az SF_6 jelenlétét, mint ahogy ezt MO-T (fent) és EL-T



16. ábra: SF₆ gázra vonatkozó numerikus adatillesztés eredménye MO-T, $Err_A = 3,85\%$ (felül) és EL-T $Err_A = 5,13\%$ mintákra (alul)

(lent) talajoknál is látható a 16. ábrán. Vagyis a gáz vagy kidiffundált, vagy be sem került a kísérleti rendszerbe. Tehát felmerült, hogy a gáztartály nem csatlakozott rendesen a rendszerhez, ami azért nem lehetséges, mert az „A” mérési pontban rendesen kimérhető volt az SF₆ jelenléte, amely szignifikánsan eltért a levegőben mért koncentrációtól. Mivel az SF₆ gázt minden hatodik órában csatlakoztattam a rendszerre, ezért az első napon megfigyelhető, hogy amikor a rákapcsolás nem esett egybe a mintavétel időpontjával, már nem lehetett SF₆-ot kimutatni a rendszerben. Vagyis ebből arra lehet következtetni, hogy a mérési beállítás nem volt elég finomságú ennek a transzportfolyamatnak a kiméréséhez. Ez a probléma a modellillesztés során tovább fokozódott, mivel KI-T és LA-T esetén az illesztés hibája $Err_{A,KI-T} = 486,00\%$ $Err_{A,LA-T} = 257,12\%$.

Ennek értelmében a kapott gázdifúziós együtthatók használhatatlanok. Ezeket a körülményeket figyelembe véve kizártam a kén-hexafluoridot a kiértékelés további lépéseiből.

A teljes kísérlet értékelésével kapcsolatban a következők mondhatók el: Az 5. táblázatban található difúziós együtthatók normalizált értékeinek a transzport közegét kell jellemeznük. Ez egyben azt is magába foglalja, hogy a három gázra kapott érték nagyjából arányosan kellene, hogy változzon, amelyet a jelen mérési adatok nem minden esetben igazolnak. Ez elsősorban a különböző

vízoldhatóságra, a végrehajtott kísérleti beállításra és a kiértékelésben tett egyszerűsítésekre, átlagolásokra vezethető vissza. A bemutatott ábrákon és a hozzá kapcsolható adatok alapján jól végigkövethető, hogy milyen nagy szerepe volt a gáz alapvető fizikokémiai tulajdonságainak, a háttér-koncentrációnak, a talajnak, mint porózus közegnek. Ha ennél pontosabb adatok szükségesek az áramlási kép leírásához, akkor szerepet kell kapjon a transzportfolyamat összetettebb problémaként való kezelése (Abu-El-Sha'r 2007). Ilyen esetben fejlesztési lépés lehet az áramlási irány háromdimenziós kiterjesztése, felületi áramlások hatásainak vizsgálata, adszorpciós folyamatok nyomon követése, Knudsen diffúzió figyelembevétele (Abu-El-Sha'r 2007). Azonban minden vizsgálati tényezőt az adott kutatási célnak megfelelően kell megválasztani, és jelen esetben ezek az adatok minden szempontból megfelelnek az én kutatási céljaimnak.

4.3. A gázdifúzió kapcsolata a talaj paramétereivel

A dolgozatnak ebben a fejezetében a gázdifúziós kísérlet és a CT-s kísérlet eredményeinek összekapcsolását ismertetem. Rendelkezésre áll a talajokra vonatkozó, mérésből származó D_g/D_0 érték három különféle gázra és a komputer tomográfias mérés alapján három szegmentálási módszer szerint előállított adatbázis, amelyek egyenként 12 változót foglalnak magukban, kiegészítve a bolygatatlan szerkezetű nagyminta mellől vett kis minták vizsgálati adataival. Arra a kérdésre kerestem a választ, hogy a talaj mely vizsgált tényezői hatottak szignifikánsan a mérésekkel végigkövetett diffúziós transzportfolyamatokra. Vagyis jelen esetben melyek azok a CT és egyéb mérésből származtatott független változók, amelyek segítségével előre jelezhető a talaj gázáteresztő képessége.

Az irodalom-feldolgozás szerint: a legtöbb modellezési munka alapja az effektív porozitás, amely nem véletlen, mert a levegővel töltött térfogat biztosítja a transzportfolyamat helyét, azonban két porózus tér között ugyanazon effektív porozitás mellett nagymértékű minőségbeli különbség lehet transzporttulajdonságaikat tekintve akár gáz vagy folyadék fázis esetén is. Az átjárható tér, ami jelen esetben a talaj levegővel töltött fázisa, az nemcsak egy térfogatmennyiség, hanem egy rendszer, amelynek alkotó pórusai tekerednek, kiszélesednek, leszűkülnek, elágaznak, egymással kapcsolódnak, nem is beszélve arról, hogy a legcsekélyebb külső hatás esetén is folyamatosan változnak. Ezért nagy kihívás egy ilyen dinamikus rendszer jellemzése.

Olyan alaparányosságokat igaznak gondolva, miszerint magasabb póruster kapcsolatháló mellett jobb a talaj gázáteresztő képessége, a kérdésre többváltozós lineáris regresszió-analízis segítségével kerestem a választ, így a továbbiakban regresszió alatt lineáris regressziót értek. Mivel ennek a módszernek a segítségével több ismerv függő változóra gyakorolt hatását lehet megfigyelni. A regressziós modell részletes tárgyalása a szakirodalomban több helyen megtalálható (Kerékgyártó et al. 2009; Ketskemény és Izsó 2005), itt csak a legfontosabb, megértéshez szükséges elemeket foglalom össze:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_m X_m + \varepsilon \quad (44)$$

A modellben az X tényezők lesznek a mérésekből származó talajtulajdonságok, amelyek befolyásolják Y függő változó alakulását, azaz a relatív diffúziós tényezőt. Az X tényezőkről feltételeztem, hogy nem valószínűségi változók, azaz értékük nem függ a véletlentől. Az X változók hatása Y -ra nem determinisztikus, hanem sztochasztikus, ezt fejezi ki a modell végén szereplő (ε) tényező is.

A többváltozós modell felírása mátrixok segítségével történt:

A regressziós egyenlet paramétereit a többváltozós modell esetében is a legkisebb négyzetek módszerével meg lehet határozni. A minimalizálandó négyzetösszeg ezért:

$$\sum (Y - \hat{Y})^2 = \sum (Y - \beta_0 - \beta_1 X_1 - \beta_2 X_2 - \dots - \beta_m X_m)^2. \quad (45)$$

A többváltozós esetben a becslések és az összefüggések mátrixaritmetikai formában egyszerűbben kezelhetők és sokkal áttekinthetőbbek, így a modell mátrix formában:

$$y = X\beta + \varepsilon, \quad (46)$$

amelyben y a függő változó $(n - 1)$ -es oszlopvektora (gázdifúziós tényező), X a független változók $[n - (m+1)]$ -ed rendű mátrixa (talajtulajdonságok), ε a hibatényező $(n - 1)$ -es oszlopvektora és végül β a becsülni kívánt paraméterek $[(m+1) - 1]$ -es oszlopvektora.

$$Y = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} 1 & X_{11} & \dots & X_{1m} \\ 1 & X_{21} & \dots & X_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & X_{n1} & \dots & X_{nm} \end{bmatrix}. \quad (47)$$

Így a becslés a legkisebb négyzetek elve alapján úgy kaphatom meg, ha a deriváltakat egyenlővé teszem 0-val.

$$\beta = (X'X)^{-1} X'y \quad (48)$$

lesz a paraméterek becslésének általános formulája (Kerékgyártó et al. 2009; Ketskemény és Izsó 2005).

A standard lineáris modell feltételrendszeréhez nem tartozik hozzá, de a modell fontos tulajdonsága kell, hogy legyen a független változók egymástól való lineáris függetlensége. Ezért volt fontos a 4.1. fejezetben tárgyalt talajtulajdonságok közötti kapcsolatok feltárása. Amennyiben ez nem teljesül, multikollinearitás lép fel. Ennek a feltételnek az a magyarázata, hogy a legkisebb négyzetek elve alapján becsült β paraméter meghatározásához szükség van az $X'X$ mátrix inverzére, mint ahogy az a 48. egyenletnél is látszik. Az $X'X$ mátrix csak akkor lesz invertálható, ha az X mátrix és az $X'X$ mátrix rangja $(m+1)$, azaz megegyezik a változók számával. Ha az $X'X$ szinguláris, vagyis az X mátrix rangja kisebb, mint $(m+1)$, a modell együtthatói nem becsülhetők. A jelen vizsgálatban ez akkor fog érvényesülni, ha a független változók egyike kifejezhető a többi független lineáris kombinációjaként (Kerékgyártó et al. 2009).

Vagyis a multikollinearitás elkerülése végett nem tesztelhetem a független tényezők közül egy modell rendszerben például Th_1 esetén az elágazások számát és a detektált voxelcsoportok számát,

mert a kapcsolatukat statisztikailag jól igazolható szorosság jellemzi ($r = 0,851$, $P = 0,015$).

Ebből következik, hogy a vizsgált független változók számát a közöttük lévő kapcsolat alapján kellett szelektálnom, azonban annak az eldöntése nagy körültekintést igényelt, hogy melyik változót tarom meg, illetve hagyom el.

Ezért ezt egy három lépésből álló szelekció segítségével oldottam meg:

Egyrészt figyelembe kellett azt vennem, hogy a három küszöbértéknél számolt változók különbözőképpen írnak le egy talajszerkezetet. A három küszöbérték alapján azonban különböző lesz a lineáris függetlenség sorrendje is. Ezért a teljes korrelációs kapcsolatok feltárása után mátrixba rendeztem az egyes kapcsolatokat jellemző determinációs együtthatókat, majd az adott oszlop összegének értékével osztottam őket. Az így kapott új mátrix sorainak összegét osztottam a változók számával, hasonlóképpen, mint a páros összehasonlítások módszereként ismert eljárásban. Ezáltal egy sorrend alakult ki a változók között a többi változóval való korrelációs kapcsolat szorosságától függően minden küszöbérték esetére (7. melléklet). Ezek után összesítettem a táblázatokat az értékeik átlagolásával. Így kaptam meg a három küszöbértékre vonatkozó összesített sorrendet (7. melléklet), amely alapján egy kiindulási képet kaptam a függőségi viszonyokról. Az összesítés alapján a teljes makropórusfelület értéke függ legerősebben a többi változótól, ami megalapozottnak is tűnik, hiszen minél magasabb egy talaj porozitásértéke annál valószínűbb, hogy nő a pórusok száma, amellyel logikusan nő a felület is. Legkevésbé korreláló független változó a talaj sűrűsége volt.

Második lépésként egyesével végigvettem a változókat, és annak fejében döntöttem el egy független változó bevonását a tesztelésbe, hogy milyen módon mutatja a talajt, és milyen függőségi kapcsolatban áll a többi változóval. Itt nagy szerepet kapott a munka későbbi felhasználhatóságának lehetősége. Vagyis az a cél, hogy megtaláljam azokat a paramétereket, amelyeket később érdemes bevonni a diffúziót leíró további modellfejlesztésekbe, mivel szignifikáns hatást képviselnek a gáztranszport szempontjából. Ha két változó között ezek alapján sem tudtam kiválasztani az egyik elvetését, akkor az utolsó döntési szempont a mérhetőség könnyűsége és költségigénye volt, szintén azt szem előtt tartva, hogy ha egy nagyobb területet kell jellemezni a talaj gázdifúziós képessége szerint, akkor fontos, hogy költséghatékony és könnyen előállíthatóak legyenek a modellbemeneti adatok.

Detektált voxelcsoportok száma: mivel ez az aktuális talajban található pórusszám, amelynek egy köbméter talajra vetített értékéből kaptam meg a hálózati sűrűséget, így nem lehet mindkét független változó megtartása. Ezért a detektált voxelcsoport számot vettem el, a dimenziók egysége miatt, mivel a többi független változó értékek, mint például a porozitás is köbméterre

vetített értékek.

Makroporozitás₁: mivel a diffúzió a teljes makropórus tér egy részében zajlott, és mivel a talajok effektív és teljes makroporozitása közötti elérés típusfüggő, így a tényező jelentőségének vizsgálata indokolt, bár korrelációs kapcsolatai más változókkal szoros, amely az első lépésben létrehozott táblázat alapján is látszik. Ezért ebben a lépésben még megtartottam, mint független változót, azonban a harmadik lépésben figyelembe kellett vennem a bennmaradt változókkal való kapcsolatait, a lineáris függetlenség megőrzése végett.

Makroporozitás₂: korrelációs kapcsolatai más független változókkal egyértelműen szoros, a legtöbb relatív diffúziós együtthatót becsülő modell alapja, ezért szignifikáns hatása már bizonyított és mivel célom azoknak a paramétereknek a hatásvizsgálata, amelyekkel még tovább lehetne fejleszteni és finomítani a modelleket, ezért ennek a független változónak a hatásvizsgálata jelenleg nem indokolt.

Átlagos makropórus méret: minden szempontból megfelelő paraméter, vizsgálatának elvetését semmi nem indokolja.

Összes makropórus-felület: nagyon szoros és szignifikáns kapcsolata van érthető módon minden olyan változóval, amely mennyiségileg tükrözi a talajpórusok számát. Elvetése indokolt.

α és POM (100%), a két érték korrelál egymással, hiszen fizikai tartalmukat tekintve részlegesen fedésbe hozhatók. Míg a POM (100%) az extra nagy pórusok százalékos arányát mutatja, addig α a Pareto eloszlással a teljes minta pórusméret eloszlásáról ad információt. Figyelembe véve, hogy a tekervényesség meghatározási módjából adódóan szintén összefüggésbe hozható POM (100%) tényezővel, így ezt a változót vetettem el.

Hosszsűrűség: a talaj vázszerkezet felépítése után kapható adat, előállítása körülményes, költséges, sok időt igényel, különösen nagy differenciáltsággal rendelkező talajok esetén. Arról az úthosszról ad információt, amely a pórusok középpontjába húzható, ennek megfelelően a már kiválasztott hálózati sűrűséggel a pórusok száma miatt abszolút szorosan korrelál, így elvetése indokolt.

Elágazások száma: nagyon fontos információval bír, azonban egyes változókkal korrelál, ebben a lépésben szelekciója még nem indokolt. A változók lineáris függőségét (például, Th₂ esetén α -val) azonban a következő szelekciós lépésben kezelni kell.

Tekervényesség (τ): a komputer tomográfias kiértékelésben megadott definíciója szerint a 100 mm-nél hosszabb középvonallal rendelkező pórusok határozzák meg. A szakirodalom szerint (Epstein, 1989, Moldrup et al. 2001, Kristensen et al. 2010), maga a tekervényesség rendkívül meghatározó szerepet tölt be, és mivel jelen esetben meghatározási módja eltér az általánosan használt módszerektől, továbbá az első lépésben számolt táblázat alapján a többi változótól függése is alacsony, ezért tesztelése érdemes.

Agyag, vályog- és homoktartalom: a három frakció együttes vizsgálata nem lehetséges. A talajok szemcseméret frakcióit tekintve, a vályog- és homoktartalom nagyon erősen korrelál. A homok frakció alacsony kapcsolatot mutat a diffúziós együtthatókkal, míg az agyag nem, ezért ezt a frakciót választottam.

Sűrűség: a szelekciós folyamat első lépésben összeállított táblázat (7. melléklet) alapján nem indokolja semmi ennek a változónak az elvetését.

Tehát a szelekció után mind a három küszöbérték esetén a hálózati sűrűséget, a makroporozitás₁-et, az átlag pórusméretet, α -t, az elágazások számát, a tekervényességet, a homok frakciót és a sűrűségértéket választottam ki, mint független változókat.

A függő változókról:

A függő változó hét megfigyelésből áll (ID-T kivonása miatt), amelyek azonban gázonként különbözőek. Talajonként egymással nem arányosan eltérő relatív gázdifúziós értékeket kaptam, annak ellenére, hogy feltételezhető egy adott talajoszlopról, hogy minden esetben ugyan olyan mértékben és minőségben biztosított teret a gázok transzportjához. Így a talajok három gázra vonatkozó relatív diffúziós együttható értékében megjelenő különbség elsősorban nem a független változókra vezethetőek vissza, hanem például a laboratórium levegőjében lévő eltérő koncentrációértékekre. Ezért a függő változókat összesíteni kellett, azonban itt se az átlagolás sem egyéb más összegzési mód nem jelent megoldást, mivel az nem tudható, hogy az adott gáz relatív diffúziósértékénél milyen százalékban gyakoroltak hatást ténylegesen a független változók. Ezért a többváltozós korrelációs modellt csak úgy tudtam megvalósítani, hogy mind a három gáz esetére kapott diffúziósértéket egyszerre tesztelem (ezzel egyben megnövelve a függő változóhoz köthető megfigyelések számát 21-re). Külön hangsúlyoznám, hogy jelen lépésben nem az a cél, hogy a talaj gázáteresztő képességét minél tökéletesebben leíró modellt alkossak. Hiszen ebben az esetben a makroporozitás₂ értékének kihagyása hibás lépés lenne, hanem hogy megállapítsam azokat a

további paramétereket, amelyek még fontos szerepet játszottak a folyamatban. Ezért a modell variancia analízisét tekintve, a modell jóságát csak akkor érdemes újra vizsgálni, amikor a már statisztikailag is indokoltan kiválasztott paraméterek, már szétválasztott, gázonkénti regressziós modelljét értékelem.

Harmadik lépés: a független változók szűkítése regressziós modellek alapján.

Az itt következő lépéseket részletesen csak Th_1 esetében tárgyalom a megértés és átláthatóság kedvéért, a többi esetben ugyanezeket a műveleteket hajtottam végre, de már csak a végeredmények elemzését közlöm.

A modellek felállításához MINITAB[®] (v.15.1.0.0.) programot használtam (MINITAB[®], Minitab Inc., 2006)

Az első tesztmodell felállítása:

A modell részletes eredményét a 8. melléklet tartalmazza.

Össz = - 0,137 + 0,185 Hálózati sűrűség - 2,02 Makroporozitás₁ + 0,00265 Átlag makropórus méret + 0,104 α - 0,000000 Elágazás + 0,0704 τ

A modell magyarázata: a kapott eredmény modellben a (parciális) korrelációs együttható alapján jellemezhető az egyes független változók hatásának erőssége, tehát a változó előtt álló érték azt mondja meg, hogy egy adott független változó milyen szoros kapcsolatban áll a függő változóval, jelen esetben az összes gáz diffúziós együtthatójával, miután a többi független változó hatása mind a vizsgált magyarázóból, mind pedig a függő változóból kiszűrésre került. Ebben a modellben a makroporozitás₁ értékei magyarázzák legjobban a gázdifúziót, amely adat jól összeegyeztethető az eddig elvártakkal, hiszen a száraz állapotban mért porozitásértékek az aktuális porozitás után a leggyakoribb modell bemenetiérték, mint már többször említettem. A (parciális) korreláció négyzete a (parciális) determinációs együttható. A többszörös korrelációs együttható a tényezőváltozók és a függő változók közötti kapcsolat szorosságát jellemzi. A többszörös determinációs együttható azt mutatja meg, hogy a független változók a függő változó varianciájának hány százalékát magyarázzák meg, amely jelen esetben igen alacsony 22,5%. S értéke a regresszió standard hibáját mutatja, amelynek alapja a tényleges változó értékének távolsága a regressziós egyenestől.

Az eredményekből látható, hogy a homok és a sűrűségértékei még mindig függenek a többi változótól (8. melléklet). A változók értékelésének tekintetében a szignifikanciát jelző P és t értékek a mérvadók. A t teszt eloszlását ismerve minden olyan érték, amelynek abszolút értéke 0 és 1 közé esik, nem lesz releváns a folyamat szempontjából. Ennek értelmében látható, hogy sem α sem az

átlagos makropórus méret nem szignifikáns, így a következő tesztlépésből ezeket a paramétereket már kiszűrtem.

Hasonlóképpen, a második tesztmodell felállítása után az állapítható meg, hogy a sűrűség sem lesz szignifikáns hatást kiváltó tényező (9. melléklet).

A harmadik tesztmodell eredménye (10. melléklet) arra vezetett, hogy a benne szereplő változók magas elsőfajú hiba mellett ugyan, de mindegyike szignifikánsan szerepet játszott a függő változó alakulásában t értékük alapján. Tulajdonképpen ez az a pont, ahol elmondható, hogy mind a három gáz szempontjából befolyásoló tényezőket egyformán figyelembe vettem. Így újra szét lehet választani a függő változókat.

A következő lépés annak a megállapításáról szól, hogy valóban szükséges-e az összes változó figyelembevétele. Tehát ki kellett választanom a legjobb részhalmazt, amely természetesen gázonként valamennyire eltérő lesz.

Összegyűjtöttem a változók különböző mennyiségű kombinációi alapján azokat az egyetlenkombinációkat, amelyek legjobban jellemezték a függő változót, azaz egy gáz diffúzióját.

Ezeknek a felépítéseit a 6. táblázat tartalmazza (a változók száma a további táblázatokban Vars, a többszörös determinációs együttható pedig R -Sq, illetve korrigált értéke $R_{(adj)}$). A kombinációk jellemzésére négy mutató volt mérvadó: a determinációs együttható értéke, amely az előzőeknek megfelelően itt is az adott változókkal adható magyarázatot jelenti százalékban kifejezve, ennek korrigált értéke, és a már korábban bemutatott S érték. Negyedik mutatóként a Mallows-féle CP értéket (Mallows 1973) vettem figyelembe a legjobb magyarázómodell megállapításához (49. egyenlet). A Mallows-féle CP értéket (Mallows 1973) azért volt érdemes bevonni a statisztikai értékelésbe, mert R értéke természeténél fogva nőni fog a független változók mennyiségének bevonásával. A megfelelő számú független változók megválasztásával csökkenthető a szórás, így annak ellenére, hogy a torzítás romlik a becslés mégis pontosabb lesz. Erre példa a 6. táblázatban található hatodik és a hetedik sorban szereplő egyenlet variációk, ahol a makroporozitás₁ bevonása hiába növeli a determinációs együttható értékét a modell standard hibája mégis nagyobb lesz, mint az a modellkombináció, amelyben nem szerepel.

6. táblázat: A vizsgált független változókból kapható legjobb lineáris regressziós modellek statisztikai paraméterei ($R\text{-Sq}$: determinációs együttható; $R_{(adj)}$: korrigált determinációs együttható; S : lineáris regresszió standard hibája; $H.\text{sür.}$: hálózatisűrűség; $Por.$: makroporozitás₁; $Elág.$: elágazások száma; τ : tekervényesség) a CO₂-ra vonatkozóan

Változók száma	$R\text{-Sq}$	$R_{(adj)}$	Mallows CP	S	$H.\text{sür.}$	$Por.$	$Elág.$	τ	Homok
1	34,5	21,4	0	0,010680			X		
1	32,6	19,2	0,1	0,010829	X				
2	64,2	46,3	0,7	0,0088281			X	X	
2	60,2	40,3	0,8	0,0093041	X	X			
3	76,5	53,0	2,1	0,0082586		X	X	X	
3	75,5	50,8	2,1	0,0084527	X		X	X	
4	77,7	33,0	4,0	0,0098622	X	X	X	X	
4	76,9	30,6	4,1	0,010033		X	X	X	X
5	78,5	0,0	6,0	0,013693	X	X	X	X	X

Tehát a Mallows-féle CP érték, szintén segítséget nyújt a regressziós modellek esetén a legmegfelelőbb kiválasztásában, mivel alapvetően ez a statisztikai mutató arra szolgál, hogy elkerülhető legyen a túlzott mennyiségű független változó bevonása a regressziós modellbe. Számítása pedig a

$$CP = \frac{\sum_{i=1}^N (Y_i - Y_{bi})^2}{S^2} - N + 2M \quad (49)$$

egyenlettel történik, ahol az összes független változót tartalmazó K elemű halmazból M ($K > M$) elemszámú részhalmaz kiválasztása alapján történik a regressziós egyenes meghatározása. A 49. számlálójában a négyzetes eltérések összegét az i . megfigyelés értéke (Y_i) és az arra kapott regressziósérték különbségének (Y_{bi}) négyzete adja. S^2 a K elemű halmazon végzett regresszió során a reziduálisok átlagának négyzete, N pedig a minta mérete. Tehát, ez a statisztika lényegében a becslés hibájára alapszik, ahol a legjobb modellt az a CP érték jelzi, amely minél jobban megközelíti a változók számát, vagyis M -et.

Ennek értelmében CO₂ esetén a 6. táblázat 5. sorában található, makroporozitás₁, elágazások sűrűsége és τ független változókat tartalmazó modell a legmegfelelőbb választás, amelyet mind a három statisztikai vizsgálat alátámaszt mivel S értéke a legkisebb az összes kombináció közül, $R_{(adj)}$ szintén a legmagasabb. A Mallows-féle CP értéket tekintve is ez az egyik legmegfelelőbb választás, habár a 7. és 8. sorban található egyenletkombináció jobb értéket mutat, azonban ezek a többi mutató miatt elvethetőek.

Ezért a választott $Y_{CO_2} = 0,0311 + 0,000000 \text{ Elágazás} - 0,310 \text{ Makroporozitás}_1 - 0,0103 \tau$ –egyenlet

statisztikájából (11. melléklet) kitűnik, hogy az elágazások száma, vagyis a póruster kapcsoltsága kiemelt fontosságú szerepet játszott a talaj CO₂ diffúziójában. Ez az eredmény újabb bizonyíték arra, hogy a korábbi, más kísérleti körülmények között felállított modellekben a talajdiffúzió leírására használt makroporozitás₁ és tekervényességértékek megalapozottak, ha elfogadjuk, hogy Th₁ alapú küszöbérték megválasztás helyes.

Dinitrogén-oxid:

N₂O-ra kapott elemzés alapján (12. melléklet) csak két esetet érdemes említeni, ahol az egyik a csak makroporozitás₁-et tartalmazó regressziós változat, illetve a homoktartalommal kiegészített kétváltozós változatot. Az első esetben lesz S értéke a legalacsonyabb (0,01686) és a korrigált determinációs együttható a legmagasabb (36,5%), azonban CP érték második esetben lényegesen kedvezőbb (0,3), amelyhez viszont magasabb S (0,01784) és alacsonyabb R_(adj) tartozik (29%). Ezek alapján az egy független változót tartalmazó regressziót választottam, amelyből új következtetéseket nem lehet levonni a modellek paraméterbővítésére vonatkozó célkitűzést illetően, de mindenképpen alátámasztja az eddigi modellek makroporozitás₁ alapúságát és összhangban van a széndioxidra kapott eredményekkel is.

A regressziót részletesen jellemző statisztika szintén a 12. mellékletben található.

Metán:

CH₄ kapott minden összeállítás jelentősen rosszabb eredményre vezetett a többi gázhoz képest (13. melléklet), amelyet a többszörösére növekedett hiba és a csak két esetben értékelhető determinációs együttható mutat (20,6 és 49,1%). A Mallows-féle CP érték is csak ebben a négy és öt változót tartalmazó modellek esetében értékelhetőek. Ennek alapján megállapítható, hogy az ötváltozós modellhez képest nem vezet jobb eredményre a homok elhagyásával képzett négyváltozós regresszió, amely minden statisztikai mutató esetében rosszabbul teljesített. A 13. mellékletből kiderül, hogy szintén a makroporozitás₁ kap jelentős szerepet a függő változó magyarázásában.

A független változók szelekciója Th₂ esetén:

Th₂ küszöbérték mellett a három gáz vonatkozásában vett változó szelekció után a 14. mellékletben taglalt öt független változó maradt bent, amely megegyezik Th₁ esetén kapott változókkal egy esetet kivéve. Ebben az esetben a homok frakciónál jelentősebb volt az átlagos makropórus méret hatása, illetve a többi változóhoz képest a tekervényesség gyenge befolyással bír. A gázok elkülönítése után a következő eredményre jutottam.

Széndioxid:

Az analízis elvégzése után azt kaptam (15. melléklet), hogy a széndioxidra mért értékek alakulását, a tortuozitás, átlagos makropórus méret és az elágazások független változóból álló regresszió írja le a legjobban, amit a legalacsonyabb S érték (0,00346), és legmagasabb $R_{(adj)}$, 91,7%-os értéke bizonyít, míg CP értékét tekintve 2,0 a második legjobb érték. Azonban, ha a hálózati sűrűséget fontosabbnak tartom az átlagos makropórus méretnél a CP érték alapján (2,2), akkor enyhén romlik a becslés minősége.

Ezért erre a regresszióra felállított analízis után elmondható, hogy a tekervényesség lesz a legmeghatározóbb változó. Az átlagos pórusméretre kapott P érték alapján felmerülhetne ennek a változónak az elhagyása, amely azonban jelentősen növelné a becslési hibát ($S=0,00452$).

A Th_1 széndioxidra kapott analíziséhez képest lényegesen jobb modellt kaptam. Figyelembe véve a variancia analízist az F értéke 23,24, amely mellett P valószínűségi szintje 0,014.

Dinitrogén-oxid:

A legtöbb szempontból a tekervényességet, elágazások számát és az átlagos makropórus méretet tartalmazó illesztés a legmegfelelőbb, amelynek S értéke a legalacsonyabb (0,00696), $R_{(adj)}$ (89,2%) majdnem ugyanannyi, mint a széndioxid esetében és CP értéke is elfogadható (16. melléklet). Szintén a 16. mellékletben a részletes elemzés található, amelyben a kiválasztott független változók jelentős mértékben játszanak szerepet a célváltozó alakulásában.

Metán:

A metánra vonatkoztatott elemzés alapján jól kitűnik, hogy megint ennek a gáznak a leírására felállított modellek rendelkeznek a legnagyobb eltérésekkel a másik két gázhoz képest (17. melléklet), amelyek a korábban említett gázok közötti tulajdonságokra vezethetők vissza (például különböző vízdoldhatóság). Látható, hogy egy tizedes jeggyel megnőtt a modellek standard hibája, emellett a többi statisztikai mutatót is figyelembe véve néhány modell értékelhetetlen. Ez megfelel az előző esetben kapott eredményekkel, ahol a modellek szinté nem voltak képesek kezelni a metán esetében mért diffúziós értékeket. A legjobb modell mind az öt független változót tartalmazza, amely részletes elemzése után látható (17. melléklet), hogy a tekervényesség rendelkezik a legmagasabb P értékkel (0,291), azonban elhagyása növeli a becslés hibáját, a CP értéket, és csökkenti a modell által a jelenségre adható válasz százalékos értéket.

A független változók szelekciója Th₃ esetén:

Mivel a harmadik küszöbérték mellett nem sikerült a talajváz-szerkezet felállítása, ezért hiányoznak a tekervényességre és elágazási pontok számára vonatkozó adatok. Ezt figyelembe véve, hat független változó maradt, amelyek közül α ($t = -0,01$; $P = 0,996$), hálózati sűrűség ($t = -0,32$; $P = 0,752$) és a sűrűség ($t = 0,52$; $P = 0,610$) szerepelt a leggyengébben (18. melléklet). Ezek leválasztása után mind a három tényező jelentős hatást gyakorolt a relatív diffúziós együtthatók alakulására és ezért a gázok szétválasztása után ezt a maradék három független változó hatását vizsgáltam (19. melléklet).

Széndioxid:

A széndioxid esetén az összes változót tartalmazó modell adta a legjobb magyarázatot (20. melléklet), amely a négy statisztikai mutató szerint a legjobb a modellek közül, azonban a kapcsolatok minden esetben olyan gyengének bizonyultak, hogy megalapozott következtetést nem lehet levonni. Ezt bizonyítja a részletes elemzés táblázata is (20. melléklet).

Dinitrogén-oxid:

Ugyanez a jelenség tapasztalható a dinitrogén-oxid esetén is (21. melléklet). Rendkívül gyenge és nehezen értékelhető kapcsolatok láthatóak minden esetben. Lényegében a független változók nem játszanak szerepet a célváltozó alakulásában. Nincs értelme részletesebben a regresszió analízisével foglalkozni (21. melléklet)

Metán:

Az előzőekhez képest meglepő fordulatot jelent a metán esetében adott modell válasz, ahol a független változók értékelhető módon állnak kapcsolatban a függő változóval (22. melléklet). Mind a három változó szignifikáns, a csak két változót, vagyis a makroporozitás₁-t és homokfrakciót tartalmazó modell a magas CP érték miatt értékelhetetlen.

A részletes analízis (22. melléklet) után elmondható, hogy a modell szignifikáns, amelyben továbbra is dominál a makroporozitás₁ hatása.

Összefoglalva:

A diffúziós tényezők becslése legjobban Th₂ küszöbérték módszerrel megállapított független változók esetén volt a legeredményesebb mind a három gáz esetén, amelyet a másik két küszöbértékhez képest számolt gázonkénti legalacsonyabb standard hiba mutat.

Th₃ esetén az adathiány miatt (vázszerkezet nem volt előállítható) és Th₁ dinitrogén-oxid

modelljétől eltekintve az elágazások száma mindenhol meghatározó független változó volt, ezért eredményeim alapján a diffúziós modellek fejlesztéséhez ennek a változónak a bevonását javaslom, a már meglevő általános paraméterek mellé (makroporozitás₁ és tekervényesség).

Az előbbi kijelentésnek megfelelően az összes porozitást reprezentáló makroporozitás₁ és a tekervényesség alkalmazása szintén a legtöbb esetben megerősödött. Megfigyelhető még a metán esetén megjelenő és szignifikánsan ható homok frakció, ahol tulajdonképpen egy pozitívan korreláló kapcsolatot lehet megállapítani, ha a Dixon-féle Q teszt alapján is kiugró értéknek minősülő Li-T mintára kapott relatív diffúziós együttható értékét kivesszük az analízisből. Tehát metán gázdifúziós vizsgálat kapcsán mindenképpen javaslom a homok frakció figyelembevételét. Ez az eredmény más független kutatási eredményekkel is összhangban van: Sass et al. (1994), Cai et al. (1998) és Huang et al. (2002), akik vizsgálataik alapján szintén megállapították a talajok metánkibocsátása és homoktartalom közötti függő kapcsolatot. Huang (Huang et al. 2002) eredménye szerint a talajok eltérő metán kibocsátását körülbelül 28%-ban magyarázza a homok frakció mennyisége.

A teljes kiértékelés helyességének megállapításánál figyelembe kell venni, hogy az elemezni kívánt változók számához képest kevés a megfigyelt esetek száma. Ennek oka elsősorban a rendkívül költséges mérési folyamatokban keresendő. Ezért további célom, hogy a nyolc nagy minta esetén kidolgozott mérési és kiértékelési eljárásokat több mintára kiterjesszem, amelyek mind fizikai féleségükben mind méretükben nagyobb változatosságot képviselnek.

4.3. A klasszikus egy- és kétparaméteres relatív diffúziós tényezőt előrejelző modellek tesztelése

A következő fejezetben a leggyakrabban alkalmazott, klasszikus modellek becslését mutatom be, ahol a bemeneti értékeket a három küszöbérték mellett számolt makroporozitás adatok adják. A tesztelt modellek listáját és jelöléseiket az itt következő 7. táblázat tartalmazza:

7. táblázat: A klasszikus relatív diffúziós együtthatót becslő modellek gyűjteménye:

Szerzők:	Jelölés:	Modell:
Buckingham 1904	Buckingham	$\frac{D_g}{D_o} = (\theta_{\text{levegő}})^2$
Penman 1940	Penman	$\frac{D_g}{D_o} = 0,66\theta_{\text{levegő}}$
Van Bavel 1952	Van Bavel	$\frac{D_g}{D_o} = 0,61\theta_{\text{levegő}}$
Marshall 1958	Marshall	$\frac{D_g}{D_o} = (\theta_{\text{levegő}})^{\frac{3}{2}}$
Grable és Siemer 1968	GS	$\frac{D_g}{D_o} = 10^{-6} \theta_{\text{levegő}}^{3,36}$
Lai et al. 1976	Lai	$\frac{D_g}{D_o} = \theta_{\text{levegő}}^{\frac{5}{3}}$
Xu et al. 1992	Xu	$\frac{D_g}{D_o} = \frac{(\theta_{\text{levegő}})^{2,51}}{\phi^2}$
Millington és Quirk 1960	MQ ₁	$\frac{D_g}{D_o} = \frac{(\theta_{\text{levegő}})^2}{\phi^{\frac{2}{3}}}$
Millington és Quirk 1961	MQ ₂	$\frac{D_g}{D_o} = \frac{(\theta_{\text{levegő}})^{\frac{10}{3}}}{\phi^2}$
Moldrup et al. 1997	PQM	$\frac{D_g}{D_o} = 0,66\phi \left(\frac{\theta_{\text{levegő}}}{\phi} \right)^{\frac{12-d}{3}}$
Moldrup et al. 2005	Moldrup	$\frac{D_g}{D_o} = \phi^2 \left(\frac{\theta_{\text{levegő}}}{\phi} \right)^{\left(2 + \frac{\log(\theta_{\text{levegő}100}^{\frac{1}{4}})}{\log(\frac{\theta_{\text{levegő}100}}{\phi})} \right)}$

8. táblázat: A modellbecslések eredményeinek statisztikai értékelései

	RMSE/bias	Buckingham	Penman	Van Bavel	Marshall	GS	Lai	XU	MQ ₁	MQ ₂	PMQ	Moldrup
Th ₁	RMSE _{CO2}	0,0145	0,0108	0,0100	0,0110	0,0155	0,0128	0,0107	0,0111	0,0139	0,0141	0,0150
	bias _{CO2}	-0,0099	0,0073	0,0059	-0,0060	-0,0107	-0,0080	0,0061	-0,0066	-0,0096	-0,0098	-0,0103
	RMSE _{N2O}	0,0274	0,0211	0,0211	0,0250	0,0279	0,0262	0,0236	0,0253	0,0272	0,0273	0,0277
	bias _{N2O}	-0,0191	-0,0020	-0,0033	-0,0152	-0,0199	-0,0173	-0,0031	-0,0159	-0,0188	-0,0191	-0,0196
	RMSE _{CH4}	0,0709	0,0639	0,0643	0,0691	0,0713	0,0701	0,0673	0,0695	0,0709	0,0711	0,0712
	bias _{CH4}	-0,0384	-0,0213	-0,0226	-0,0345	-0,0392	-0,0366	-0,0224	-0,0352	-0,0381	-0,0384	-0,0389
Th ₂		Buckingham	Penman	Van Bavel	Marshall	GS	Lai	XU	MQ ₁	MQ ₂	PMQ	Moldrup
	RMSE _{CO2}	0,0098	0,0431	0,0391	0,0153	0,0155	0,0097	0,0585	0,0138	0,0084	0,0096	0,0119
	bias _{CO2}	-0,0040	0,0405	0,0366	0,0118	-0,0107	0,0042	0,0526	0,0103	-0,0023	-0,0042	-0,0071
	RMSE _{N2O}	0,0253	0,0450	0,0415	0,0265	0,0279	0,0246	0,0615	0,0264	0,0253	0,0258	0,0263
	bias _{N2O}	-0,0133	0,0313	0,0274	0,0025	-0,0199	-0,0050	0,0433	0,0011	-0,0115	-0,0135	-0,0163
	RMSE _{CH4}	0,0681	0,0620	0,0611	0,0625	0,0713	0,0647	0,0796	0,0644	0,0688	0,0696	0,0695
	bias _{CH4}	-0,0326	0,0120	0,0081	-0,0168	-0,0392	-0,0243	0,0240	-0,0182	-0,0308	-0,0328	-0,0356
Th ₃		Buckingham	Penman	Van Bavel	Marshall	GS	Lai	XU	MQ ₁	MQ ₂	PMQ	Moldrup
	RMSE _{CO2}	0,0143	0,0652	0,0597	0,0333	0,0155	0,0234	0,0886	0,0297	0,0170	0,0168	0,0131
	bias _{CO2}	0,0020	0,0598	0,0545	0,0257	-0,0107	0,0148	0,0710	0,0215	0,0027	-0,0004	-0,0032
	RMSE _{N2O}	0,0256	0,0634	0,0582	0,0365	0,0279	0,0296	0,0865	0,0337	0,0271	0,0275	0,0257
	bias _{N2O}	-0,0073	0,0506	0,0452	0,0164	-0,0199	0,0056	0,0618	0,0122	-0,0065	-0,0096	-0,0124
	RMSE _{CH4}	0,0594	0,0558	0,0536	0,0475	0,0713	0,0514	0,0808	0,0497	0,0612	0,0653	0,0636
	bias _{CH4}	-0,0266	0,0313	0,0259	-0,0029	-0,0392	-0,0137	0,0425	-0,0071	-0,0258	-0,0289	-0,0317

Arra kerestem választ, hogy mely modellek adnak jó becslést az általam mért kísérleti összeállításban a különböző gázokra, illetve annak megállapítása, hogy melyik küszöbérték meghatározási mód biztosítja a legmegfelelőbb bemeneti paramétereket. A modellek értékelésénél az átlagos négyzetes hiba gyökét (*RMSE*) és az alá vagy fölé becslés mértékét mutató *bias* értékeket vettem alapul.

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i^2} \quad (50)$$

$$bias = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i \quad , \quad (51)$$

ahol a korábbi jelöléseknek megfelelően d_i a modell által becsült és a mért érték differenciája és n a mérések számát jelöli. A modellek által adott relatív diffúziós együtthatóértékeket és a három gázra számolt *RMSE* és *bias* értékeket a 8. táblázat tartalmazza.

A három gáz közül a széndioxidra kapott relatív diffúziós együtthatóértékét becsülték meg legjobban a modellek. Ha teljesen általános értékelést végzek, amelyben minden modellválaszt figyelembe veszek, akkor a széndioxid és dinitrogén-oxid esetében a Th₁, vagyis a hisztogramban a levegő és talajt reprezentáló görbék minimumpontjaként definiált érték és Th₂, vagyis a

közéértékek átlagaként kapott küszöbérték alapján történt leválasztás adott pontosabb bemeneti adatokat. Ennek teljesen ellentmond a metán diffúziójára adott globális modellbecslések minősége, ahol Th_3 mellett számolt porozitásértékek teljesítettek jobban, azaz kumulált *RMSE*-ra vetítve átlagosan egy tizeddel esnek közelebb a becsült értékek Th_1 -hez képest.

Széndioxid:

A 17. ábra mutatja a modellbecslések átlagos négyzetes hibáját a három küszöbérték szerint összesítve, amelyből kiderül, hogy Th_2 melletti relatív diffúziós együttható becslések esetén MQ_2 ($RMSE= 0,00844$), és Buckingham ($RMSE= 0,00984$) modellek adják a legjobb közelítést, amely globálisan is, azaz minden küszöbérték melletti becslést figyelembe véve is igaz lesz.

MQ_2 modell DU-T ($d= -0,0003$) és EL-T ($d= -0,0006$) mintáknál szinte tökéletes becslést adott, emellett biasa alapján enyhe alulbecslés figyelhető meg ($bias= -0,0027$).

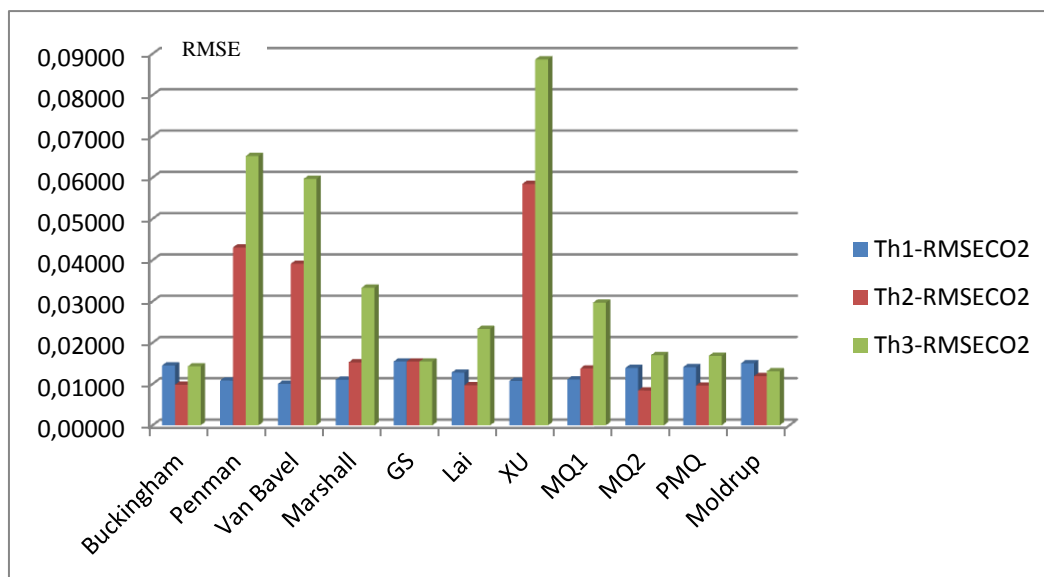
Meglepő, hogy az egy paramétert igénylő Buckingham modell szintén alacsony hibával becsülte meg a CO_2 diffúziót. Minden modellre összevetve a három küszöbérték mellett számolt hibák átlagát, ennek a modellnek a becslése rendelkezik a legkisebb eltéréssel ($RMSE= 0,01287$).

Csak Th_1 küszöbértéket figyelembe véve Van Bavel modell becsült a legjobban ($RMSE= 0,01004$). Az eltérések alapján ez a modell a hét esetből ötször háromtizedes pontossággal becsülte meg helyesen a relatív diffúziós értékeket, EL-T ($d= 0,0169$) és LI-T ($d= 0,0143$) minta esetében pedig század pontosságú az eltérés. A modell bias-át tekintve gyenge túlbecslés figyelhető meg ($bias= 0,00591$), és csak két esetben, LA-T ($d= -0,0065$) és MO-T ($d= -0,0040$) minta diffúzióját illetően történt alulbecslés. Jó becslést adott még Xu et al. ($RMSE= 0,01075$) és Penman modellje ($RMSE= 0,01084$). Ennél a három modellnél figyelhető meg, hogy míg Th_1 mellett kiváló becslést adtak, addig a küszöbérték eltolásával ugrásszerűen nő a becslés pontatlansága, olyannyira, hogy Th_3 mellett már a legrosszabb becslést produkálják az összes modell közül.

Th_3 mellett a Moldrup modell közelítette meg legjobban a mért értékeket, amely modellbecslés a többi küszöbérték mellett csak átlagosnak mondható ($RMSE= 0,01306$). Azonban azt is észre kell venni, hogy négy minta esetén igen pontos becslést adott ($d_{DU-T}= -0,0021$; $d_{EL-T}= 0,0010$; $d_{KI-T}= 0,0002$; $d_{KO-T}= -0,0025$), és a maradék három mintára adott becslés pontatlansága lerontja a modell összteljesítményét.

A modellbecslések hibáinak szórását tekintve $SD_{Th1}= 0,00188$ a legalacsonyabb, míg $SD_{Th2}= 0,01681$ és $SD_{Th3}= 0,02465$ lesz. Ennek értelmében elmondható, hogy az első küszöbérték mellett kiegyensúlyozottabban becsülnek a modellek. Viszont ha a legjobban becsülő modell kiválasztása a cél, akkor a széndioxidra vonatkoztatott érték alapján az állapítható meg, hogy ha az azonos valószínűségi ponton meghúzott küszöbérték alapján lettek a porozitásértékek számolva, akkor az

egy paramétert igénylő klasszikus modelleket érdemes tesztelni, míg a csúcok alapján számolt Th_2 küszöbérték esetén az effektív és teljes porozitás adatokat igénylő modellek további tesztelése javasolt.



17. ábra: Modellbecslés hibák széndioxid esetén (RMSE- átlagos négyzetes hibagyök)

Dinitrogén-oxid:

A 18. ábra a modellbecslések átlagos négyzetes hibáját mutatja a három féle küszöbérték mellett dinitrogén-oxid esetén. Th_1 küszöbérték mellett található a két legjobb becslés, amelyet Van Bavel ($RMSE= 0,02112$) és Penman ($RMSE= 0,02113$) modellje alapján számoltam. Mind a két modell LA-T és MO-T mintánál becsülnek alul. A bemeneti adatok és a modellek természetének következtében, itt is ugyanaz a jelenség figyelhető meg, mint a széndioxid esetében, miszerint Th_2 és Th_3 -nál ugrásszerűen emelkedik a pontatlanság.

Ennél a küszöbértéknél globálisan megfigyelhető a dinitrogén-oxid relatív diffúziós együtthatójának alulbecslése, mivel minden modell esetében minden bias érték negatív.

Ugyanez Th_2 mellett ez már csak hét modellre lesz igaz és ebben az esetben Lai ($RMSE= 0,0245$) és Buckingham ($RMSE= 0,02529$) modellek becslése volt pontos.

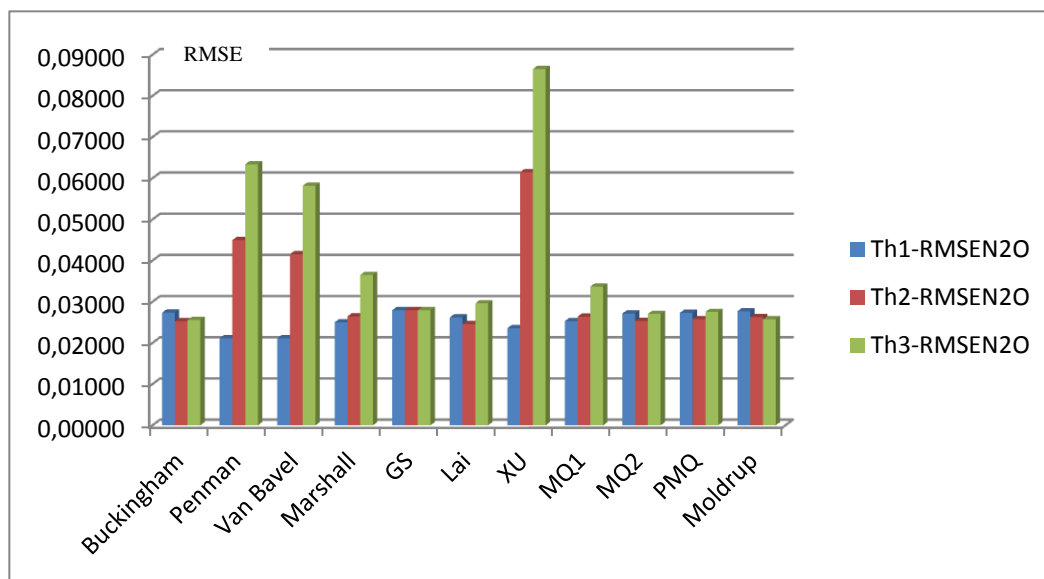
Általánosan elmondható, hogy MQ_2 , PQM és Moldrup modellek diffúzió becslése mind a három küszöbérték esetén közel esik egymáshoz, azonban a legjobb közelítést mindig Th_2 esetén adják, ahol a legtöbb mintára kis eltéréssel becsülnek (kivéve EL-T és MO-T mintákat).

GS modell ($RMSE= 0,02795$), a felépítéséből adódóan mindig lényegesen alábecsüli a talajban zajló diffúzió mértékét ($bias= -0,01993$). A modell által számolt értékek általában a tizenegyedik vagy tizenkettedik tizedes jegyben térnek el, amely köszönhető a modellben szereplő 10^{-6}

szorzónak.

Th₃ mellett újfent Buckingham modellje hozta a legjobb közelítést ($RMSE= 0,02557$), majd utána Moldrup modell becslése volt a legpontosabb ($RMSE= 0,02574$). Buckingham modellje DU-T mintára majdnem tökéletes becslést adott ($d= 0,0003$), viszont MO-T mintára vonatkozó relatív diffúziós együtthatót jelentősen alábecsülte ($d= -0,0630$), ugyanez igaz Moldrup modell esetén is, ahol hasonló az eltérés MO-T-re ($d= -0,0617$).

Ha minden modell becslését összesítem, akkor a legkisebb eltérést Th₁ mellett kaptam.



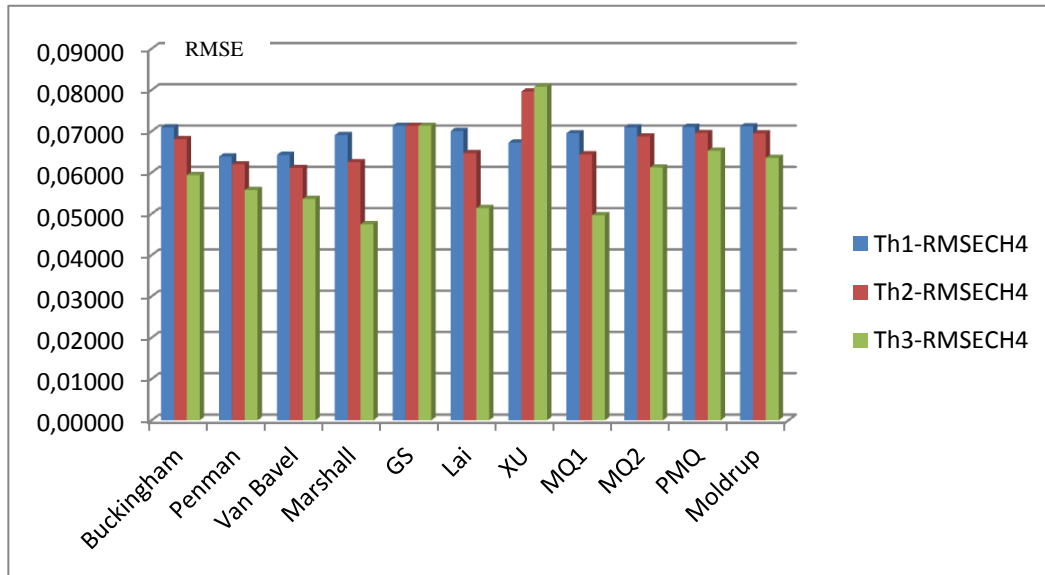
18. ábra: Modellbecslés hibák dinitrogén-oxid esetén ($RMSE$ - átlagos négyzetes hibagyök)

Metán:

A 19. ábra a modell becslések átlagos négyzetes hibáját mutatja a három féle küszöbérték mellett metán gáz esetén. Mint már korábban említettem, a metánra vonatkozó legjobb becslések Th₃ esetén találhatóak, amelyek közül Marshall ($RMSE=0,04748$) és MQ₁ ($RMSE= 0,04965$) modelleket kell kiemelni. Mindkét modell biasa enyhe alulbecslést mutat, ami köszönhető annak, hogy nagyjából fele-fele arányban becsültek túl és alá. A legjobb becslés meg annak köszönhető, hogy ez a két modell tudta a legjobban MO-T minta relatív diffúziós együtthatójának értékét megközelíteni, ahol az eltérés Marshallnál csak $d= -0,0008$ és MQ₁-nél $d= -0,0007$. Th₂ esetén Van Bavel ($RMSE= 0,06112$) Penman ($RMSE= 0,6201$) Marshall ($RMSE= 0,6253$) modellek becsültek a legjobban, amelyek azonban lényegesen rosszabb becslések, mint Th₃ esetén. Penman ($bias= 0,01195$) és Van Bavel ($bias= 0,00808$) biasa pozitív, míg Marshall modellje esetében átlagos alábecslésről lehet beszélni ($bias= -0,01675$). A Marshall modell kiválóan becsülte EL-T minta diffúzióját, ahol $d=$

0,0004.

Th₁ mellett már csak Van Bavel ($RMSE= 0,06430$) és Penman ($RMSE= 0,06390$) becslési hibája lesz relative alacsony. Penman modellje ennél a küszöbértéknél DU-T minta relatív diffúziós együtthatóját öt tizedesjegy pontossággal becsülte helyesen ($d= 0,000028$). LI-T minta metánra vonatkozó diffúzióját minden modell nagyon rosszul kezelte, így az átlagos eltérés $d= -0,1767$.



19. ábra: Modellbecslés hibák metán esetén (RMSE- átlagos négyzetes hibagyök)

Összefoglaló értékelésként az mondható el, hogy a megalapozott véleménynyilvánításhoz, azaz ahhoz, hogy biztosabban lehessen a modellek által adott becslést értékelni lényegesen több megfigyelésre van szükség, továbbá nem elhanyagolható, hogy a felállított modelleket más-más szerkezetű talajokon eltérő nedvességtartalom mellett tesztelték. Például a legáltalánosabban elfogadott és gyakorlatban széles körben használt Penman modellt üveggömbökön és széles porozitás tartományban ($0.15-0.921 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$) tesztelték (Aachib et al. 2004), míg Grable és Siemer (1968) modell transzport közege agyagos vályog talaj volt, ahol áramoltatott oxigén mikrodifúzióját tesztelték. Viszont az megállapítható, hogy az egyparaméteres, egyszerű lineáris vagy exponenciális összefüggésre alapuló modellek ugyan olyan jól teljesítettek, mint a teljes porozitást is tartalmazó modellek.

Ha minden modell hibamutatóját küszöbértékenként összegezzük, akkor a legpontosabb becslések Th₁, majd Th₂ küszöbérték mellett figyelhetők meg, ezért ezt a két küszöbérték meghatározási módot javaslom további vizsgálatra. A modellek minden küszöbértéken vett összteljesítményét értékelve Buckingham, Lai és MQ₂ modellek teljesítettek a modellek közül a legjobban.

Javaslat modellfejlesztésre:

A PQM modellt az egyik leggyakrabban alkalmazott modellek között tartják számon, amely pontos becslésének köszönhető. Ez ebben az esetben is megerősítést nyert, mivel a modell közepesen jól teljesített a többi modellhez képest az *RMSE* értékek alapján. Mint az a névből is látszik, a modell két korábbi modellből épül össze. A modell MQ felében Moldrup et al. (1997) által javasolt tekervényességet reprezentáló szerkezettől függően választható érték, vagyis az *m*, amely bolygatatlan talajok esetén 3 és szitált vagy struktúrával nem rendelkező talajok esetén 6, ellentmond a logikusan elvárható eredményeknek. Mivel, ha feltételezem, hogy egy újrarakott talajmintában megszüntették a természetes vázat, ezáltal a makropórus rendszert, akkor a pórustér elsősorban szitált talajszemcsék közötti rész fogja alkotni, amelynek lényegesen tekervényesebbnek kell lennie, amelyhez magasabb tekervényesség érték tartozik. Ennek alapján először az eredeti PMQ modell *m* változójának a felcserélését javaslom a Moldrup et al. (1997) munkájában leírtakkal ellentétben. Penman modelljéből származó 0,66 érték, amely a tekervényességet hivatott reprezentálni, rugalmatlanná teszi a modellt, amely a jelen minták esetében is jól látható volt. Ezért javaslom ennek az értéknek cseréjét a Pareto eloszlás legnagyobb valószínűség elve alapján számolt és 4.1. pontban bemutatott α paraméterre.

A javaslat eredménye és értékelése:

Ezzel a módszerrel látható, hogy megszünt a Penman modellből származó rugalmatlanság és bevonásra került a talajok pórustér eloszlására jellemző érték.

Az új modell által adott becslések *RMSE* értékét és bias-át a 9. táblázat tartalmazza.

Th₁ mellett széndioxid esetén *RMSE*-re vetítve több mint egy ezreddel javult a modellbecslés minősége az eredeti PQM modellhez képest és KO-T mintára szinte tökéletes becslést adott ($d = -0,0002$). Azonban a minták közül LA-T értékét pontatlanul becsülte ($d = -0,0292$). Bias-át minden minta esetén átlagban enyhe alulbecslés jellemzi Th₁-nél, míg Th₂ esetében már csak LA-T és MO-T mintát becsülte alul. Th₂-nél kapott hiba alapján MQ₂ modell után a második legjobb becslést adta az összes modell közül. Az eredeti PQM modellhez képest csak Th₃ mellett teljesít rosszabbul, azonban még így alacsonyabb az *RMSE* értéke 6 modellnél.

Dinitrogén-oxidra vonatkozó becslést megfigyelve szintén Th₁ és Th₂ esetében jobban teljesít az eredeti modellhez képest. Az alulbecslés mértéke a küszöbérték emeléssel csökken. Th₂ esetén megint a harmadik legjobban becslést adó modell lesz, amelynél DU-T ($d = 0,0006$) és LI-T ($d = -0,0016$) mintákra adta a legjobb megközelítést.

Th₃-nál romlik a becslés minősége, amely elsősorban MO-T ($d = -0,0555$) és KI-T ($d = 0,0391$)

minták adataira vezethetők vissza, de ezenkívül még másik három minta becslése is pontatlan.

A metán esetére számolt hibaértékek alapján elmondható, hogy a küszöbérték emelésével csökken a becslés pontatlansága. Th_1 esetén 0,00667 a legjobb és a javasolt modell közötti hibaértékek különbség, mivel a metán esetén az egy paramétert igénylő modellek teljesítettek jobban. Viszont a kétparaméteresek közül a harmadik legjobb becslést adja, ebbe beleértve, hogy az eredeti PQM modellnél 0,7%-kal jobb becslést adott. Míg az előző két gáz esetén a küszöbérték eltolása Th_2 -re jelentős változást okozott a modellbecslések szórását tekintve, addig a metán esetén tapasztalt változás nem annyira szembetűnő, amelyet a javasolt modell becslése is tovább erősít azzal, hogy kétparaméteres modellbecslésekkel kiegyenlítetten becsül, azonban továbbra is jobban, mint az eredeti modell. Amely Th_3 mellett is igaz lesz, mivel ennél a küszöbértéknél meghatározott bemeneti adatoknál volt tapasztalható a PQM modellhez képest a legnagyobb mértékű 8,53%-os modellbecslés javulás.

9. táblázat: A javasolt modell becslésének minősítése

Th₁	RMSE_{CO2}	0,0129	Th₂	RMSE_{CO2}	0,0088	Th₃	RMSE_{CO2}	0,0211
	bias_{CO2}	-0,0088		bias_{CO2}	0,0015		bias_{CO2}	0,0079
	RMSE_{N2O}	0,0266		RMSE_{N2O}	0,0253		RMSE_{N2O}	0,0290
	bias_{N2O}	-0,0180		bias_{N2O}	-0,0077		bias_{N2O}	-0,0013
	RMSE_{CH4}	0,0706		RMSE_{CH4}	0,0679		RMSE_{CH4}	0,0598
	bias_{CH4}	-0,0373		bias_{CH4}	-0,0270		bias_{CH4}	-0,0206

Összesítve a három gázra kapott *RMSE* értékeket a különböző küszöbértékek mellett, a javasolt modell Th_2 szegmentálási módszerrel képzett bemeneti adataival a kétparaméteres modellek közül a legjobb, valamint az összes modellt figyelembe véve a második legjobb becslést adta, amelyet a 10. összesítő táblázat mutat. Ezek alapján a modelljavaslatot ígéretesnek tartom, és bővített mintaszám és talajtípus mellett kívánom tovább vizsgálni.

10. táblázat: A Th_2 küszöbérték mellett a három vizsgált gázra összesített *RMSE* érték

NÉV	Buck.	Penm.	Van B.	Marsh.	GS	Lai	XU	MQ ₁	MQ ₂	PMQ	Moldr.	Javasolt
RMSE_Σ	0,103	0,150	0,142	0,104	0,115	0,099	0,199	0,105	0,103	0,105	0,108	0,102
PARAMÉTEREK SZÁMA	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2	2

5. ÚJ EREDMÉNYEK

A talajokban történő gázdifúzió és a talajszerkezet közötti kapcsolat megismerésére irányuló kutatásaim legfontosabbnak ítélt eredményei a következők:

- Dolgozatomban új kísérleti felépítést mutattam be, amely alkalmas bolygatott és bolygatatlan talajminták gázdifúziójának nyomonkövetésére. A kísérleti felépítés és a korszerű komputer tomográfias vizsgálat kombinációjának köszönhetően eddig nehezen vagy nem vizsgálható talajstruktúra jellemzők (például a talaj pórusrendszerének kapcsoltsága) vizsgálatára nyílt lehetőség a talaj relatív diffúziós együtthatójának függvényében.
- A komputer tomográfias adatok feldolgozásánál a szegmentációs küszöbérték megválasztása kulcsfontosságú. Az erre vonatkozó vizsgálataim alapján a többváltozós lineáris regresszióanalízis eredményeként megállapítottam, hogy a relatív gázdifúziós együtthatók becslése legjobban Th_2 küszöbértéket adó szegmentációs módszerrel meghatározott független változók esetén volt a legeredményesebb mind a három gázra vonatkozólag. Ezt a másik két küszöbértékhez képest számolt gázonkénti legalacsonyabb standard hiba bizonyította. A relatív diffúziós tényezőt becselő modellek hibamutatóját küszöbértékeként összegezve, az volt megállapítható, hogy legpontosabb becsléseket Th_1 , majd Th_2 küszöbérték mellett kaptam. Ebből arra a következtetésre jutottam, hogy a jelen kísérleti munka szempontjából a helyes szegmentációs küszöbérték Th_1 és Th_2 között helyezkedik el.
- Megállapítottam, hogy a talajjellemzők közül az elágazások száma egy esetet kivéve mindenhol meghatározó független változó volt, ezért eredményeim alapján a relatív diffúziós együtthatót becselő modellek fejlesztéséhez ennek a változónak a bevonását javaslom, a már meglévő általános makroporozitás₁ és tekervényesség paraméterek mellé, amelyeknek szignifikáns hatása szintén megerősítést nyert az analízis során.
- Az általam tesztelt relatív diffúziós együtthatót becselő modellek közül a PQM modell (Moldrup et al. 1997) kétféle módosítását javasoltam: amely egyrészt a Penman modellből származó állandó (0,66) az általam javasolt α paraméterre történő cseréjéből áll, amivel megszüntethető volt a modell rugalmatlansága, illetve a szerkezetfüggő és tekervényességet

reprezentáló m paraméter értékének 6-ra történő módosításából. Az új modell becslésének hibáját összevetve az eredeti PQM modellel, megállapítottam, hogy a minden küszöbértéken vett három gázhoz tartozó kilenc megfigyelésből hét alkalommal adott pontosabb becslést. Emellett a javasolt modell Th_2 szegmentálási módszerrel képzett bemeneti adatokkal a kétparaméteres modellek közül a legjobb, valamint az összes modellt figyelembe véve a második legjobb becslést adta. Ezek alapján a módosításokat a saját kísérletemre vetítve eredményesnek nyilvánítottam és a modell további tesztelését javaslom.

- A munkához szorosan kapcsolódóan kiemelt eredménynek tartom a konvekciós transzportfolyamat elméleti vizsgálatából született eredményünket, amelyet a *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* (2007, 40, 1-9. p) folyóiratban közzétettük.
- Végül kiemelkedő eredménynek tartom a munka gyakorlati alkalmazhatóságát, amelynek jelenleg komoly elméleti és gyakorlati vonatkozásai vannak kilátásban:
 - o lehetőség nyílik Mészáros et al. (2011) munkájában javasolt Riccati-féle közönséges differenciálegyenlet újszerű alkalmazásának kísérleti tesztelésére.
 - o a munka alapján felállítható kísérleti rendszerrel a teljes talajgenetikai spektrumot lefedő, vagy akár fizikai féleség szerint csoportosított adatbázis hozható létre.

6. JAVASLATOK

Az eddig elért eredmények alapján a következő pontokban látom a munka javításának, fejlesztésének lehetőségeit és más kutatásokkal való összekapcsolását:

A jelen kísérleti beállítások mellett szükséges bővítési javaslatok:

- A munka érvényességét leginkább korlátozó tény, hogy kevés a megfigyelések száma, amely miatt nem lehetséges általános következtetések levonása. Ezért a munka folytatásának céljaként tűztem ki mind a diffúziós kísérlet, mind pedig a komputer tomográfias vizsgálatok mintaszámának növelését, ahol a minták méretben, fizikai összetételben és a beállított víztartalom szinteken is szélesebb spektrumot kell lefedniük.
- Javaslom még ehhez kapcsolódóan a kísérleti eszközök mágnesesrezonancia-képkalkotással (MR) való bővítését is, amely alkalmazása lehetővé tenné a komputer tomográfiával nem elkülöníthető víz és talajtartalmú voxelek elválasztását. Ezzel kiküszöbölhető lenne a száradás során bekövetkező szerkezetváltozás hatása, ha a minta lemérése közvetlenül a kísérlet előtt és után is megoldható.
- Fontosnak tartom annak a tesztelését, hogy a talajfelszíntől fokozatosan megszabott mélység melletti porozitásértékek milyen kapcsolatban állnak a relatív diffúziós tényező becslésével. A munka elvégzésével képet kapunk arról, hogy milyen méretű talajminta vétele optimális a talaj gázáteresztő képességének becslésére. A gazdasági oldalát tekintve a helyes mintaméret megállapításával nagy területek jellemzése esetén jelentősen csökkenthető a kiadás.
- Javaslom a komputer tomográfias kiértékelés során meghatározott talajváz összekapcsolását az elágazási pontoknál detektált pórustorok mérettel, amely modell segítségével különböző telítettségi szintek mellett lehetne vizsgálni és szimulálni a holtterek keletkezését.
- Kiemelten fontosnak tartom az orvosi gyakorlathoz hasonlóan, a talajmintákra vonatkozó típus- és telítettségfüggő egységesített képfelvételezési és szegmentálási gyakorlat bevezetését.

A komplex folyadék és gáz fázisú csatolt transzportfolyamatok elméleti és kísérleti vizsgálatára vonatkozó tervezetek és javaslatok:

- Dolgozatomban a talajgázok transzportjának vizsgálatát a diffúzióra korlátozva mutattam be, amely természetes körülmények között két meghatározó folyamathoz, a konvekcióhoz és a diffúzióhoz köthető. Az ismertetett kísérleti beállításban az alacsony hőmérsékleti gradiensnek köszönhetően makroszkopikus méretű konvektív áramok nem alakultak ki, de ettől még ez a jelenség nem kezelhető külön a diffúziós transzportfolyamatoktól (Kirchner et al. 2006). Ha a talajban, vagy talaj feletti légrétegben hőmérsékletkülönbség alakul ki, az hajtóerőként hat a magasabb kinetikai energiával rendelkező gázhalmazállapotú részecskék elmozdulására és keveredésére, amely során megtörténik a hőátadás. A konvekciós áramlás látványos természeti jelenségeket produkál: például a fagymintás talaj kifejezés a kövek, a talajtakaró természetes módon kialakuló kör, sáv vagy sokszög alakú, szabályos elrendeződését jelenti, amelyben megfigyelhető a klasszikus Rayleigh–Bénard-féle áramlási kép (Gyarmati 2005, Mészáros et al. 2007). Közvetlenül a talaj-atmoszféra határfelület felett kialakuló konvekciós hőáramok jól megfigyelhetők infrakamera segítségével (Vital et al. 2007, Nagy et al. 2011).

Ehhez kapcsolódóan korábbi kutatásaink eredményeként kidolgoztunk egy elméleti modellt (Gyarmati 2005, Mészáros et al. 2007, Kirchner et al. 2007) konvektív instabilitások (Gyarmati et al. 2007) és transzport leírására hengeres rendszerekben, amelyben az Ostroumov probléma (Ostroumov 1958) alapján került a sebességfüggvény felírásra. A sebesség sugárirányú függését leíró negyedrendű közönséges differenciálegyenlet szimbolikus számításra is képes matematikai programcsomag segítségével oldottuk meg, amelynek eredményeként kapott sebességfüggvény jó egyezést mutat korábbi szimulációs eredményekkel (Kirchner et al. 2007, Gyarmati et al. 2007). Azonban a modell kísérlet alapú validálása még nem történt meg. Ennek értelmében a jelen kísérleti munka megismétlését javaslom a konvekciós áramok kialakulását elősegítő beállításokkal, így az újramérés lehetőséget ad az elméleti modell érvényességének vizsgálatára talajmintákra vonatkozó kísérleti adatokkal.

- Tervezem még a kísérleti eredmények hasznosítását a korábbi nitrogén transzformációs reakció kinetikai kutatásaim összekapcsolásával (Gyarmati et al. 2011, Hárshgyi et al. 2008). Emellett még - lehetőség esetén - talajok mesterséges nehézfém szennyezése során a mobilizáció összefüggéseinek vizsgálatát a talajszerkezet függvényében (Szaniszló et al.

2008, Törő et al. 2008) növényi borítottság nélkül és esetén (Bálint et al. 2007, Gyarmati et al. 2008, Bernvalner et al. 2011, Bernvalner et al. 2012).

7. ÖSSZEFOGLALÁS

A földkéreg legkülső, laza rétegeiben és a talaj-atmoszféra határfelületen a gázok áramlásáért elsősorban a konvekciós és diffúziós transzportfolyamatok felelősek.

Dolgozatom témájának a diffúzió alakulásának vizsgálatát és modellezését választottam bolygatatlan szerkezettel rendelkező talajoszlopokban.

A vizsgálathoz szükséges adatok előállítása dolgozatom első lépése és egyben első célkitűzése is volt. Ehhez először nyolc, különböző textúrával rendelkező, 180 mm átmérőjű és 350 mm hosszúságú talaj monolitot vettem. Legáltalánosabb paraméterek meghatározása, sterilizálás, és kísérleti előkészítés után saját tervezésű, más kísérleti rendszerrel is kompatibilis (pl: MSO rendszer), folyamatos gázellátással működő gázdifúziós rendszerrel kapcsoltam össze. Ennek segítségével nyomon követtem a CO₂, N₂O, CH₄ és SF₆ gázkoncentráció változást, illetve az adott talajból eltávozó gázmennyiséget a tíznapos kísérleti ciklus alatt. A kísérlet eredményeiből meghatároztam a talajra jellemző relatív gázdifúziós együtthatókat.

Ezek után komputer tomográfias (CT) vizsgálat segítségével nagyfelbontású vékonyréteg felvételek készültek a talajszerkezetről, amelyek segítségével több szempont alapján jellemeztem a talaj szerkezetet a három eltérő szegmentációs módszer alapján (a binarizációhoz használt küszöbértékek: Th₁, Th₂, Th₃). A munka eredményeként 0,39 x 0,39 x 1,2 mm³ (1 voxel méret) felbontáson alapuló adatbázist kaptam a mintákról szegmentációs eljárásoként, amely többek között tartalmazza a teljes és effektív porozitásértékeket, a detektált makropórusok számát, az átlagos makropórus méretet és felületet, a hálózati sűrűséget, elágazások számát és tekervényességet.

A tomográfias vizsgálatból származó adatokat felhasználva vizsgáltam a talajjellemzők és a relatív diffúziós együtthatók közötti kapcsolatokat többváltozós lineáris regresszió-analízis segítségével, ahol a diffúzió alakulására szignifikánsan ható talajtulajdonságokat kerestem. Ezek után tizenegy egy, és két paraméter igényű, diffúziót előrejelző modellt teszteltem a három küszöbérték függvényében előállított bemeneti adatokkal.

Az többváltozós lineáris regresszió-analízis eredményeként megállapítottam, hogy a gázdifúzió értékeinek becslése legjobban Th₂ küszöbérték módszerrel meghatározott független változók esetén volt a legeredményesebb mind a három gázra vonatkozólag, amelyet a másik két küszöbértékhez képest számolt gázonkénti legalacsonyabb standard hiba bizonyított.

A relatív gázdifúziós együtthatót becslő modellek hibamutatóját küszöbértékeként összegezve, az volt megállapítható, hogy legpontosabb becsléseket Th_1 , majd Th_2 küszöbérték mellett kaptam.

Ezek alapján arra a következtetésre jutottam, hogy a jelen kísérleti munka szempontjából a helyes szegmentációs küszöbérték Th_1 és Th_2 között helyezkedett el.

Megállapítottam, hogy a talajjellemzők közül az elágazások száma egy esetet kivéve mindenhol meghatározó független változó volt, ezért eredményeim alapján a talaj porózus közegében zajló diffúziót leíró modellek fejlesztéséhez ennek a változónak a bevonását javaslom, a már meglévő általános paraméterek, vagyis a makroporozitás₁ és tekervényesség (tortuozitás) mellé, amely változók szignifikáns hatását szintén kimutatta az analízis.

A komputer tomográfiás bemeneti adatokkal tesztelt prediktív modellek minden küszöbértéken vett összteljesítményét értékelve Buckingham (Buckingham 1904), Lai (Lai et al. 1976) és MQ_2 modellek (Millington és Quirk 1961) teljesítettek a legjobban.

A modellbecslések eredményeként javaslatot tettem, az egyik leggyakrabban alkalmazott modell, vagyis a PQM modell (Moldrup et al. 1997) kétirányú módosítására. Először javasoltam a Penman modellből származó szorzó cseréjét az általam javasolt, Pareto eloszlás legnagyobb valószínűség elve alapján számolt α paraméterre (a teljes talajmintára vonatkozó pórusok darabszámának

hányadosa a $\sum_{i=1}^n (\ln x_i - \ln x_m)$ -el, ahol x_i az i . pórus mérete és x_m , a legkisebb méretű pórus, vagyis 1

voxel). Ezzel megszüntethető volt a modell rugalmatlansága. Ezt kiegészítettem a szerkezettől függő és tekervényességet reprezentáló m paraméter értékének 3-ról 6-ra történő módosításával.

Az új modell becslésének hibáját összevetve az eredeti PQM modellével, megállapítottam, hogy a minden küszöbértéken vett három gázhoz tartozó 9 megfigyelésből hét alkalommal adott pontosabb becslést. Emellett a javasolt modell Th_2 szegmentálási módszerrel képzett bemeneti adatokkal a kétparaméteres modellek közül a legjobb, valamint az összes modellt figyelembe véve a második legjobb becslést adta. Ezek alapján a jelen kísérletet alapul véve a módosításokat eredményesnek nyilvánítottam és a modell további tesztelését javasoltam.

Mindent összefoglalva: dolgozatomban olyan új kísérleti felépítést mutattam be, amely alkalmas bolygatott és bolygatatlan talajmintákban történő gázdifúzió nyomonkövetésére. A kísérleti felépítés és a korszerű komputer tomográfiás vizsgálat sikeres kombinációjának köszönhetően eddig nehezen vagy nem vizsgálható talajstruktúra jellemzők (például a talajpórusrendszer kapcsoltága) vizsgálatára nyílt lehetőség a talaj relatív diffúziós együtthatójának függvényében. Kiemelkedő eredményének tartom az eredmények sokoldalú felhasználhatóságát és a munka gyakorlati alkalmazhatóságát. Például munkám folytatásaként a bemutatott vizsgálati rendszerrel olyan

kísérleti beállítást tervezek, amelyek segítségével az általam korábban felállított, hengeres rendszerekben konvektív instabilitásokra vonatkozó elméleti modell (Gyarmati 2005, Kirschner et al. 2007) validálását teszi lehetővé. A bemutatott és a tervezett konvektív kísérlet összekapcsolásával Mészáros et al. (2010) és Mészáros et al. (2011) munkájában tárgyalt porózus közegekben egyidejű diffúzív és konvektív transzportfolyamatokat leíró parciális differenciálegyenlet kísérleti adatokra történő alkalmazása is megvalósulhatna.

8. SUMMARY

Convection and diffusion are responsible for the gas transport processes in the outermost loose layer of Earth's crust and through the soil-atmosphere interface.

The subject of my study was the examination of the diffusion process in undisturbed soil columns.

The first step as well as the first goal at the same time was to generate adequate data for the examination. In the first part of my work, I collected eight soil monoliths with different texture, 350 mm in height and 180 mm in diameter. After determination of the general soil properties, sterilization and sample preparation, they were connected to the (MSO compatible) gas diffusion experimental system with continuous gas supply. Thus the emission and changes of CO₂, N₂O, CH₄ and SF₆ gas concentration were followed during ten day long experiments. Due to the experimental results the relative gas diffusion coefficients were determined.

Afterwards samples were scanned in high resolution by computed tomography (CT). By the help of thin-layer records characterization of soil structure was completed based on three different segmentation methods (wherein the applied threshold by binarization were Th₁, Th₂, Th₃).

As the results of this work I created a soil structure database built upon 0.39 x 0.39 x 1.2 mm³ (1 voxel) resolution CT image series, which contains data on total and effective porosity, the number of the macropores detected, average macropore size and area, network density, nodes and tortuosity. Utilizing these data I revealed the correlations between the soil attributes. These results were applied in multiple linear regression analysis using the three threshold values, by which I searched for soil properties significantly affecting the evolvement of diffusion. After this, eleven gaseous diffusion models, requiring one or two parameters, were tested with the input data created in function of the three threshold values.

Based on multiple linear regression analysis the most accurate prediction of relative gas diffusion coefficients was found in the case of independent variables determined by Th₂ threshold regarding all gases. This was proven by the lowest standard error compared to the error results counted by other threshold values. By summarizing the prediction error of the diffusion models per threshold values it can be concluded that the most accurate predictions was found by threshold value Th₁, then by Th₂, which also indicated that the proper segmentation threshold value was between Th₁ and Th₂ for the ongoing experimental work. It is also established that among the soil attributes the amount of pore connection (nodes) was significant independent variable in all but one case. Based

on that result I suggested the implementation of this variable for model development describing gaseous diffusion taking place in the porous medium of soil together with the already used ordinary parameters, macroporosity₁ and tortuosity, which were also indicated as significant variables by the analysis.

Evaluating the summarized performance of all tested models the Buckingham (Buckingham 1904), Lai (Lai et al. 1976) and MQ₂ models (Millington and Quirk 1961) produced the best results.

As the result of this investigation I made a suggestion for modifications of the widely used PQM model (Moldrup et al. 1997) by changing the multiplier from Penman model to the α parameter which based on maximum likelihood estimation function of the Pareto distribution, (the ratio of the

pore number and $\sum_{i=1}^n (\ln x_i - \ln x_m)$, where x_i is the size of i^{th} pore and x_m , is the smallest pore size,

which is 1 voxel). It dissolved the inflexibility of the PQM model. Second recommendation was the change of the structure dependant m parameter representing the tortuosity from 3 to 6 for soil with intact structure.

Comparing the prediction errors of the new model with the original PQM model's I found that from 7 out of 9 cases it performed more accurately. Beside this, the proposed model with the input data from Th₂ segmentation method was the best among the two parameter models and it gave the second best prediction taking into account all models. Based on these results and I declared these modifications efficient and recommended more extent model testing.

As a summarisation of my work I have presented a new experimental setup capable to measure the soil gas diffusion of disturbed and/or intact soil samples. The successful combination of the gas diffusion experiment with modern computed tomography opened the way toward soil structural attributes (such as the number and the place of connecting pores, nodes) examination in function of relative gaseous diffusivity. Without non-destructive technique determinations of these parameters were either complicated or impossible.

The multi-faceted usability of results and the practical applicability of the work need to be emphasized. For example as a future step of this work I am planning an experimental setup which helps to validate our previous theoretic model of convective instability in cylindrical system (Gyarmati 2005, Kirschner et al. 2007). Furthermore, by connecting these two experiments the validation of partial differential equation describing the simultaneous diffusive and convective transport processes in porous media discussed in the works of Mészáros et al. (2010) and Mészáros et al. (2011) can be realized.

9. KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Ezúton szeretnék köszönetet mondani mindazoknak a kedves tanárainknak, kollégáimnak és barátainknak, akik támogattak tanulmányaimban és a disszertáció megírásában.

Külön köszönettel tartozom két témavezetőmnek **Dr. Mészárosné Dr. habil. Bálint Ágnesnek**, és **Dr. habil. Mészáros Csabának**, akik nem csak szívvel-lélekkel, de baráti szeretettel is egyengették utam.

Köszönöm **Dr. Heltai György professzor úrnak**, hogy biztosította számomra a tanszéken a dolgozat elkészítésének feltételeit.

Hálásan köszönöm **Kampf Györgyinek** a rengeteg segítséget, amit a diffúziós kísérletek felépítésénél és mérésénél kaptam.

Köszönettel tartozom **Dr. Papp Zoltánnak** a talajminták gamma besugárzásáért, továbbá **Dr. Hafner Józsefnek**, **Földes Tamásnak** és **Tokai Richárdnak**, amiért lehetővé tették a talajminták komputer tomográfiás felvételezését a Kaposvári Egyetem Diagnosztikai és Onkoradiológiai Intézetében.

Szeretnék köszönetet mondani **Kuslits Mártonnak**, amiért megannyi teendője mellett időt és energiát szentelt nekem és ennek a munkának.

Köszönettel tartozom az Eötvös Ösztöndíjért a **Magyar Ösztöndíj Bizottságnak** és a hosszú kutatói programom támogatásáért a Német DAAD Ösztöndíj Bizottságnak (**Deutscher Akademischer Austausch Dienst**), továbbá szeretnék köszönetet mondani a Kocsis Károly Ösztöndíjért is (**TÁMOP-4.2.2.B-10/1-2010-011**).

Végül köszönöm **családomnak** türelmüket, a rengeteg biztatást és támogatást.

10. MELLÉKLETEK

1. MELLÉKLET: Irodalomjegyzék

AACHIB, A., MBONIMPA, M., AUBERTIN, M. (2004): Measurement and prediction of the oxygen diffusion coefficient in unsaturated media, with applications to soil covers. *Water, Air & Soil Pollution*, 156, 163-193. p.

ABU-EL-SHA'R W.Y. (2007): Framework for estimating vapour transport parameters through intact geomembranes by the dusty gas model (DGM). *Jordan Journal of Civil Engineering*, 1, 357-365. p.

AKINS, S., KOVSCEK, A.R. (2003): Computed tomography in petroleum engineering research. In: MEES, F., SWENNEN, R., VAN GEET, M., JACOBS, P. (Szerk) *Applications of X-ray Computed Tomography in the Geosciences*, London: Geological Society Special Publication, 23-38. p.

AMALI, S., ROLSTON, D.E., YAMAGUCHI, T. (1996): Transient multicomponent gas-phase transport of volatile organic chemicals in porous media, *Journal of Environmental Quality*, 25 (5) 1041-1047. p.

ANDERSON, S. H., PEYTON, R. L., GANTZER, C. J. (1990): Evaluation of constructed and natural soil macropores using X-ray computed tomography. *Geoderma*, 46, 13-29. p.

ARAH, J. R. M., BALL, B. C. (1994): A functional model of soil porosity used to interpret measurements of gas diffusion. *European Journal of Soil Science*, 45, 135-144. p.

BÁLINT, Á., KAMPFL, G., NÓTÁS, E., HOFFMANN, S., BERECZ, K., KRISTÓF, K., ANTON, A., SZILI-KOVÁCS, T., HELTAI, G. (2009): The formation of nitrogen oxides and the carbon dioxide in soil and the greenhouse effect. In: GRIGNANI, C., ACUTIS, M., ZAVATTARO, L., BECHINI, L., BERTORA, C., MARINO P., GALLINA, SACCO, D. (szerk.) *Proceedings of the 16th Nitrogen Workshop: Connecting different scales of nitrogen use in agriculture* Torino: Facolta di Agraria, Universita degli Studi di Torino 123-124. p. (ISBN:978-88-902754-2-5)

BÁLINT, Á., KAMPFL, GY., NÓTÁS, E., HOFFMANN, S., BERECZ, K., KRISTÓF, K., ANTON, A., SZILI-KOVÁCS, T., GYARMATI, B., HELTAI GY., (2010): Az üvegházhatású nitrogén oxidok és széndioxid képződése a talajban. In: LUKÁCS, G. (szerk.) *52nd Georgikon Scientific Conference : conference abstracts* Keszthely: Pannon Agrártudományi Egyetem Georgikon Mezőgazdaságtudományi Kar, 1-10. p.

BÁLINT, Á., MÉSZÁROS, CS., HELTAI, GY., NÓTÁS, E., JUNG, K. (2004): Modelling of N-cycle in soil using variational principles of the irreversible thermodynamics II. the concrete

- experimental and modeling results, In: ZHU Z.L., MINAMI, K., XING G. (szerk.) *3rd International Nitrogen Conference*. Beijing: Science Press, 882-886. p.
- BÁLINT, Á., GYARMATI, B., FODOR, I., KISS, R. (2007): Examination of several heavy metals in plants and soil of a shelter-belt, *Cereal Research Communications*, 35 (2) 193-196. p.
- BALL, B.C. (1981): Modeling of soil pores as tubes using gas permeabilities, gas diffusivities, and water release. *Journal of Soil Science*, 32, 465-481. p.
- BEAR, J. (1972): Dynamics of fluids in porous media, New York: Dover Publications 784 p.
- BERNVALNER, G., SZANISZLÓ, A., GYARMATI, B., HORVÁTH, M., BÁLINT, Á. (2012): The effect of acid rain and heavy metal on garden cress (*lepidium sativum*), *Növénytermelés*, 61, 93-96. p.
- BERNVALNER, G., GYARMATI, B., TÖRŐ, B., ERDŐSI, K., BÁLINT, Á. (2011): Investigation of the effect of zinc and copper on *Lepidium Sativum* in pot experiment, *Növénytermelés*, 60, 223-226. p.
- BERNVALNER, G., GYARMATI, B., BÁLINT, Á. (2010): Kerosene and cadmium contamination and their effect on garden cress (*Lepidium sativum*) In: FARKAS. I., (Szerk.) *16th Workshop on Energy and Environment: Book of Abstracts*. Gödöllő, Magyarország
- BÁLINT, Á., GYARMATI, B., GOTTSCHALK, K., MÉSZÁROS, CS. (2005): Convective instabilities in cylindrical systems, In: FARKAS. I., (Szerk.) *11th Workshop on Energy and Environment: Book of Abstracts*. Gödöllő, Magyarország, 2005.11.07-2005.11.08.
- BLAIRA, J.M., FALCONERA, R. E., MILNEB, A. C., YOUNGA, I.M., CRAWFORD, J. W. (2007): Modeling three-dimensional microstructure in heterogeneous media, *Soil Science Society of America Journal*, 71 (6) 1807-1812. p.
- BLAKE, G.R., HARTGE, K.H. (1986): Bulk Density. In: KLUTE, A. (Szerk) *Methods of Soil Analysis, Part I. Physical and Mineralogical Methods: Agronomy Monograph no. 9*, Madison, WI: 2nd edn. Am Soc Agron, 363-375. p.
- BUCKINGHAM, E. (1904): Contributions to our knowledge of the aeration of soils. *Bulletin 25. U.S. Department of Agriculture Bureau of Soils*, Washington DC
- CAI, Z., SHEN, G., YAN, X., TSURUTA, H., YAGI, K., MINAMI, K. (1998): Effects of soil texture, soil temperature and Eh on methane emissions from rice paddy fields (in Chinese with English abstract), *Acta Pedologica Sinica*, 35 (2) 145–154. p.
- CAMPBELL, G.S. (1974.): A simple method for determining unsaturated conductivity from moisture retention data. *Soil Science*, 117, 311–314. p.

- CAPOWIEZ, Y., PIERRET, A., DANIEL, O., MONESTIEZ, P. (1998): 3D skeleton reconstruction of natural earthworm burrow systems using CAT scan images of soil cores. *Biology and Fertility of Soils*, 27, 51-59. p.
- CARLSON, W.D., ROWE, T., KETCHAM, R.A., COLBERT, M.W. (2003): Applications of high-resolution X-ray computed tomography in petrology, meteoritics, and palaeontology. 7-23. p. In: MEES, F., SWENNEN, R., VAN GEET, M., JACOBS, P. (Szerk) *Applications of X-ray computed Tomography in the Geosciences*, Bath:The Geological Society Publishing House 253 p.
- CARMAN, P.C. (1937): Fluid flow through a granular bed. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, 15, 150-156. p.
- CARMAN, P.C. (1956): Flow of gases through porous media. London: Butterworths Scientific Publications
- CHAPUIS-LARDY, L., WRAGE, N., METAY, A., CHOTTES, J.L., BERNOUXS, M. (2007): Soils, a sink for N₂O?. *Global Change Biology*, 13, 1-17. p.
- CLAUSNITZER, V., HOPMANS, J. W. (2000): Pore-scale measurements of solute breakthrough using microfocus X-ray computed tomography. *Water Resources Research*, 36, 2067-2079. p.
- CLOTHIER, B.E., GREEN S.R., DEURER, M. (2008): Preferential flow and transport in soil: progress and prognosis. *European Journal of Soil Science*, 59, 2-13. p.
- CNUDE, V., MASSCHAELE, B., DIERICK, M., VLASSENBROECK, J., VAN HOOREBEKE, L., JACOBS, P. (2006): Recent progress in X-ray CT as a geosciences tool. *Applied Geochemistry*, 21, 826-832. p.
- COLLIN, M., RASMUSON, A. (1988): Comparison of gas diffusivity models for unsaturated porous media. *Soil Science Society of America Journal*, 52, 1559-1565. p.
- COX, P.M., BETTS, R.A., JONES, C.D., SPALL, S.A., TOTTERDELL, I.J. (2000): Acceleration of global warming due to carbon-cycle feedbacks in a coupled climate model. *Nature* 408, 750–750. p.
- CURRIE, J. A. (1960): Gaseous diffusion in porous media. Part1. - A non-steady state method. *British Journal of Applied Physics*, 11, 314-317. p.
- CURRIE, J.A. (1960): Gaseous diffusion in porous media. Part 2.- Dry granular materials. *British Journal of Applied Physics*, 11, 318-324. p.
- CURRIE, J.A. (1961): Gaseous diffusion in porous media. Part 3. Wet granular materials. *British Journal of Applied Physics*, 12, 275-281. p.
- DAI, S., SHEN, F., YU, A. (2008): Granule size distribution and porosity of granule packing, *Journal of Iron and Steel Research International*, 15 (5) 1-5. p.

- DENISON, C., CARLSON, W. D. (1997): Three-dimensional quantitative textural analysis of metamorphic rocks using high-resolution computed X-ray tomography: Part II. Application to natural samples. *Journal of Metamorphic Geology*, 15, 45-57. p.
- DENISON, C., CARLSON, W. D., KETCHAM, R. A. (1997): Threedimensional quantitative textural analysis of metamorphic rocks using high-resolution computed X-ray tomography: Part I. Methods and techniques. *Journal of Metamorphic Geology*, 15, 29-44. p.
- DETMER, D.M. (1995): Permeability, porosity, and grain-size distribution of selected Pliocene and Quaternary sediments in the Albuquerque Basin, *New Mexico Geology*
- DEWHURST, C.N., APLIN, A.C., SARDA, J.P. (1999): Influence of clay fraction on pore-scale properties and hydraulic conductivity of experimentally compacted mudstones. *Journal of Geophysical Research*, 261-274. p.
- DEWHURST, C.N., APLIN, A.C., SARDA, J.P., YANG, Y. (1998): Compaction driven evolution of porosity and permeability in natural mudstones: An experimental study. *Journal of Geophysical Research*, 103, 651-661. p.
- DEZA, E., DEZA, M. M. (2009): Encyclopedia of Distances, Berlin: Springer-Verlag, 94. p.
- DULLIEN, F.A.L. (1992): Porous Media, London: Academic Press, Inc 575 p.
- E DIN ISO 11277:1994 Bodenbeschaffenheit. Bestimmung der Partikelgrößenverteilung in Mineralböden. Verfahren durch Sieben und Sedimentation nach Entfernen der löslichen Salze der organischen Substanz und der Carbonate. Beuth-Verlag, Berlin
- ELEK B. (2009): Talajok szerves folyadékviszatarató- és folyadékvezető-képessége. Doktori értekezés. Pannon Egyetem Georgikon Mezőgazdaságtudományi Kar. 24. p.
- EPSTEIN, N. (1989): On tortuosity and the tortuosity factor in flow and diffusion through porous media. *Chemical Engineering Science*, 44, 777-779. p.
- FICK, A. E. (1855): Über Diffusion. *Annalen der Physik*, 94 59-86. p.
- FÖLDES T., KISS B., ÁRGYELÁN G., BOGNER P., REPA I., HIPS K. (2004): Application of medical computer tomography measurements in 3D reservoir characterization. *Acta Geologica Hungarica*, 47 (1) 63-73. p.
- FREIJER, I. J. (1994): Calibration of jointed tube model for the gas diffusion coefficient in soil. *Soil Science Society of America Journal*, 58, 1067-1076. p.
- GAUDINSKY, J.B., TRUMBORE, S.E., DAVIDSON, E.A., ZHENG, S.H. (2000): Soil carbon cycling in a temperate forest: Radiocarbon based estimates of residence times, sequestration rates and partitioning of fluxes. *Biogeochemistry*, 51 (1) 33-69. p. doi: 10.1023/A:1006301010014

- GARCIA-BENGOCHEA, I., ALTSCHAEFFL, A.G., LOVELL, C.W. (1979): Pore Distribution and Permeability of Silty Clays. *Journal of Geotechnical Engineering Division*, ASCE. 105, 839-856. p.
- GOTTSCHALK, K., MÉSZÁROS, CS., FÖLDI, A., GYARMATI, B., FARKAS, I., BÁLINT, Á. (2008): Transient Character of Transport Processes in Binary Mixtures, *Mechanical Engineering Letters : R&D : Research & Development*, 1, 200-212. p.
- GRABLE, A.R., SIEMER, E. G. (1968): Effects of Bulk Density, Aggregate Size, and Soil Water Suction on Oxygen Diffusion, Redox Potentials, and Elongation of Corn Roots, *Soil Science Society of America Journal*, 32 (2) 180-186. p.
- GRAHAM, T. (1850): On the diffusion of liquids. *Philosophical Transactions of the Royal Society*, 140, 1-46. p.
- GREVERS, M. C. J., DE JONG, E., ST. ARNAUD, R. J. (1989): The characterization of soil macroporosity with CT scanning. *Canadian Journal of Soil Science*, 69, 629-637. p.
- GRIMSHAW, S.D. (1993): Computing maximum likelihood estimates for generalized Pareto distribution. *Technometrics*, 35, 185-191. p.
- GYARMATI, B. (2005): Konvektív instabilitások hengeres rendszerekben, Gödöllő
- GYARMATI, B., HÁRSHEGYI, ZS., HELTAI, GY., MÉSZÁROS, CS., BÁLINT Á. (2011): Inkubációs talajoszlop kísérlet nitrogén transzformációs folyamatainak reakciókinetikai modellezése, *Agrokémia és Talajtan*, 60 (1) 119-131. p.
- GYARMATI, B., KAMPFL, GY., KUSLITS, M., FÖLDES, T., STANGE, C.F., BÁLINT, Á. (2010): Study on vertical distribution of N₂O and SF₆ gases in quasi-undisturbed soil, Farkas I (szerk.) 16th Workshop on Energy and Environment: Book of Abstracts, Gödöllő, Magyarország 13 p.
- GYARMATI, B., BÁLINT, Á., GOTTSCHALK, K., FARKAS, I., MÉSZÁROS, CS. (2007): An analytical solution for convective instability flows in vertical cylindrical tubes, *Book of abstract*, 13th Workshop on Energy and Environment, Gödöllő, Magyarország, 19 p.
- GYARMATI, B., MÉSZÁROS, CS., HÁRSHEGYI, ZS., KAMPFL, GY, BÁLINT, A. (2008): Effect of different nitrogen fertilizer on physiological parameters of garden cress (*Lepidium sativum*), *Cereal Research Communications*, 36 (3 Suppl. 5) 1683-1686 p.
- HAINSWORTH, J. M., AYLMOORE, L. A. G. (1983): The use of computer-assisted tomography to determine spatial distribution of soil water content. *Australian Journal of Soil Research*, 21, 435-443. p.

- HARSHEGYI, Z., GYARMATI, B., HELTAI, G., MESZAROS, C., BALINT, A. (2008): Modelling with kinetic equations of transformation of different nitrogen fertilizer in a soil core incubation and a pot experiment. *Cereal Research Communications* 36 (3) 1679-1682. p.
- HAZEWINKEL, M. (2001) "Student test", Encyclopedia of Mathematics, Berlin: Springer-Verlag
- HEERAMAN, D. A., HOPMANS, J. W., CLAUSNITZER, V. (1997): Three dimensional imaging of plant roots in situ with X-ray computed tomography. *Plant Soil*, 189, 167-179. p.
- HILLEL, D. (1982): Introduction to soil physics. New York: Academic Press, Inc. 364 p.
- HILLEL, D. (1998): Environmental soil physics. San Diego: Academic Press, Inc. 772 p.
- HOUNSFIELD, G. N. (1973): Computerized transverse axial scanning (tomography): Description of system. *British Journal of Radiology*, 46 (552) 1016-1022. p.
- HUANG, Y., JIAO, J., ZONG, L., ZHENG, X., SASS, R.L., FRANK, M. (2002): Quantitative dependence of methane emission on soil properties, *Nutrient Cycling in Agroecosystems*, 64, 157-167. p.
- JABRO, J. D. (2009): Water vapor diffusion through soil as affected by temperature and aggregate size. *Transport in Porous Media*, 77, 417-428. p.
- JAYNES, D. B., ROGOWSKI, A. S. (1983): Applicability of Fick's law to gas diffusion. *Soil Science Society of America Journal*, 47, 425-430. p.
- JARVIS, N. J. (2007): A review of non-equilibrium water flow and solute transport in soil macropores: principles, controlling factors and consequences for water quality. *Eur. J. Soil Sci.* 58, 523-546. p.
- JE'GOU, D., HALLAIRE, V., CLUZEAU, D. AND TRE'HEN, P. (1999): Characterization of the burrow system of the earthworms *Lumbricus terrestris* and *Aporrectodea giardi* using X-ray computed tomography and image analysis. *Biology and Fertility of Soils*, 29, 314-318. p.
- JIANWU, T., BALDOCCHI, D.D., YE, Q., XU, L. (2003): Assessing soil CO₂ efflux using continuous measurements of CO₂ profiles in soils with small solid-state sensors, *Agricultural and Forest Meteorology*, 118, 207-220. p.
- JIN, Y., JURY, W. A. (1996): Characterizing the dependence of gas diffusion coefficient on soil properties. *Soil Science Society of America Journal*, 60, 66-71. p.
- JOSCHKO, M., GRAFF, O., MÜLLER, P. C., KOTZKE, K., LINDNER, P., PRETSCHNER, D. P., LARINK, O. (1991): A non-destructive method for the morphological assessment of earthworm burrow systems in three dimensions by X-ray computed tomography. *Biology and Fertility of Soils*, 11, 88-92. p.

- JOSCHKO, M., MÜLLER, P. C., KOTZKE, K., DOHRING, W., LARINK, O. (1993): Earthworm burrow system development assessed by means of X-ray computed tomography. *Geoderma*, 56, 209-221. p.
- KAK, A.C., SLANEY M. (1988): Principles of computerized tomographic imaging. IEEE Press, online elérhető: <http://www.slaney.org/pct/pct-toc.html>
- KAMPICHLER, C., HAUSER, M. (1993): Roughness of soil pore surface and its effect on available habitat space of microarthropods, *Geoderma*, 56, 223-232. p.
- KERÉKGYÁRTÓ GY. et al. (2009): Statisztikai módszerek és alkalmazásuk a gazdasági és társadalmi elemzésekben, Budapest: Aula Kiadó Kft. 446 p.
- KETCHAM, R. A. (2005): Computational methods for quantitative analysis of three-dimensional features in geological specimens. *Geosphere*, 1, 32-41. p.
- KETCHAM, R. A. (2005): Three-dimensional grain fabric measurements using high-resolution X-ray computed tomography. *Journal of Structural Geology*, 27, 1217-1228. p.
- KETCHAM, R. A., CARLSON, W. D. (2001): Acquisition, optimization and interpretation of X-ray computed tomographic imagery: applications to the geosciences. *Computers Geosciences*, 27, 381-400. p.
- KETSKEMÉTY, L., IZSÓ, L. (2005): Bevezetés az SPSS programrendszerbe: módszertani útmutató és feladatgyűjtemény statisztikai elemzésekhez, Budapest: ELTE Eötvös Kiadó
- KHVOROSTYANOV, D. V., CIAIS, P., KRINNER, G., ZIMOV, S.A. (2008): Vulnerability of east Siberia's frozen carbon stores to future warming, *Geophysical Research Letters*, 35, 5. p. L10703, doi: 10.1029/2008GL033639.
- KIRSCHNER, I, BÁLINT, Á., CSIKJA, R., GYARMATI, B., BALOGH, A., MÉSZÁROS, CS. (2007): An approximate symbolic solution for convective instability flows in vertical cylindrical tubes, *J. Phys. A: Math. Theor.* 40, 1-9. p.
- KIRSCHNER, I., BÁLINT, Á., MÉSZÁROS, CS., GOTTSCHALK, K., GYARMATI, B., FARKAS, I. (2006): Percolation and fractal models in coupled heat and mass transfer through porous media, In: Farkas I (szerk.) *Drying 2006 Vol A-C. Proceedings of the 15th International Symposium*, Budapest, Magyarország, 163-168 p.
- KOEKKOEK, E.J.W., BOOLTINK, H. (1999): Neural network models to predict soil water retention *European Journal of Soil Science*, 50 (3) 489–495.p.
- KOVÁCS B. (1998): Szennyezőanyag-terjedési számítások környezetvédelmi alkalmazásai, kézirat, PhD értekezés, online elérhető: <http://www.gama-geo.hu/kb/cikk/kbphd.pdf>

- KRISTENSEN, A. H., THORBJØRN, A., JENSEN, M. P., PEDERSEN, M., MOLDRUP, P. (2010): Gas-phase diffusivity and tortuosity of structured soils. *Journal of Contaminant Hydrology*, 115 (1-4) 26-33. p.
- KRUSE, C. W., MOLDRUP, P., IVERSEN, N. (1996): Modeling diffusion and reaction in soils: II. Atmospheric methane diffusion and consumption in a forest soil. *Soil Science*, 161, 355-365. p.
- KWON. O., KRONENBERG, A.K., GANGI, A.F., JOHNSON, B., HERBERT, B.E. (2004): Permeability of illite-bearing shale: Anisotropy and effects of clay content and loading. *Journal of Geophysical Research*, 109 19. p. doi:10.1029/2004JB003052.
- LAI, S., TIEDJE J.M., ERICKSON. A.E. (1976): In situ measurement of gas diffusion coefficient in soils. *Soil Science Society of America Journal*, 40, 3–6. p.
- LANGE, S. F., ALLAIRE, S. E., ROLSTON, D. E. (2009): Soil-gas diffusivity in large soil monoliths. *European Journal of Soil Science*, 60, 1065-1077. p.
- LANGMAACK, M., SCHRADER, S., RAPP-BERNARDT, U., KOTZKE, K. (1999): Quantitative analysis of earthworm burrow systems with respect to biological soil-structure regeneration after soil compaction. *Biology and Fertility of Soils*, 28, 219-229. p.
- LAUDONE, G.M., MATTHEWS, G.P., BIRD, N.R.A., WHALLEY, W.R., CARDENAS, L.M., GREGORY, A.S. (2011): A model to predict the effects of soil structure on denitrification and N₂O emission, *Journal of Hydrology*, 409 (1-2), 283-290. p.
- LISKI, J., ILVESNIEMI, H., MAKELA, A., WESTMAN, C.J. (1999): CO₂ emissions from soil in response to climatic warming are overestimated—the decomposition of old soil organic matter is tolerant of temperature. *Ambio*, 28, 171–174. p.
- LIU, G., LI, B., HU, K., VAN GENUCHTEN, M.TH. (2006): Simulating the gas diffusion coefficient in macropore network images: influence of soil pore morphology, *Soil Science Society of America Journal*, 70, 1252-1261. p.
- LOWRY, M.I., MILLER, C.T. (1995): Pore-scale modeling of nonwetting-phase residual in porous media, *Water Resources Research*, 31 (3) 455-473. p.
- LUO, L., LIN, H., LI, S. (2010): Quantification of 3 D soil macropore networks in different types and land uses using computed tomography. *Journal of Hydrology*, 393, 53-64. p.
- LUXMOORE, R.J. (1981): Micro-, meso-, and macroporosity of soil. *Soil Science Society of America Journal*, 45, 671-672. p.
- MALLOWS, C.L. (1973). "Some comments on CP". *Technometrics* 15 (4) 661–675. p. doi:10.2307/1267380. JSTOR 1267380
- MARSHALL, T. J. (1958): A relation between permeability and size distribution of pores. *Journal of Soil Science*, 9, 1-8. p.

- MARSHALL, T. J. (1959): The diffusion of gases through porous media. *Journal of Soil Science*, 10, 79-82. p.
- MathWorks-ref1, www.mathworks.com/help/techdoc/ref/pdepe.html
- MathWorks-ref2, www.mathworks.com/help/techdoc/ref/fminsearch.html
- MECKE, K.R., STOYAN, D. (Szerk.) (2002): Topological Characterization of Porous Media LNP 600, Berlin: Springer-Verlag, 75–92. p.
- MEES, F., SWENNEN, R., VAN GEET, M., JACOBS, P. (Szerk.) (2003): Applications of X-ray computed Tomography in the Geosciences, Bath: The Geological Society Publishing House 253 p.
- MEIJERING, E.H.W., NIESSEN, W.J., PLUIM, J.P.W., VIERGEVER, M.A. (1999): Quantitative comparison of sinc-approximating kernels for medical image interpolation in medical image computing and computer-assisted intervention In: TAYLOR, C., COLCHESTER, A. (Szerk.), *vol. 1679 of Lecture Notes in Computer Science, MICCAI 1999.*, Berlin: Springer-Verlag, 210-217. p.
- MÉSZÁROS, CS., GOTTSCHALK, K., FARKAS, I., GYARMATI, B., BÁLINT, Á. (2011): Surface Waves at Convection-diffusion Processes through Porous Media, *Mechanical Engineering Letters: R&D: Research & Development* 6, 95-102 p.
- MÉSZÁROS, CS., GOTTSCHALK, K., JESZENŐI, G., GYARMATI, B., FÖLDI, A., BÁLINT, Á. (2008): Transient character of transport processes in binary mixtures In: Farkas I (szerk.), 14th Workshop on Energy and Environment: Book of Abstracts. Konferencia helye, ideje: Gödöllő, Magyarország
- MÉSZÁROS, CS., GYARMATI, B., BÁLINT, Á. (2007): Asymptotic Solution for Convective Instability Flows in Vertical Cylindrical Tubes, In: Conference of Research and Teaching of Physics in the Context of University Education, Nitra, Szlovákia, (ISBN:978-80-8069.898-0) Slovak Agricultural University, 49-52 p.
- MÉSZÁROS, CS., BÁLINT, Á., GOTTSCHALK, K., GYARMATI, B., FARKAS, I. (2006): Convective flow patterns in vertical cylindrical tubes: 12th Workshop on Energy and Environment, Gödöllő, Farkas I (szerk.) 11 p.
- MÉSZÁROS, CS., KIRSCHNER, I., GOTTSCHALK, K., SZÉKELY, L., BÁLINT, Á. (2010): Symbolic solutions of ordinary differential equation systems used for coupled transport processes, *Mechanical Engineering Letters: R&D: Research & Development* 4, 121-140 p.
- MÉSZÁROS, CS., GYARMATI, B., BÁLINT, Á. (2007): Asymptotic Solution for Convective Instability Flows in Vertical Cylindrical Tubes In: Conference of Research and Teaching of Physics in the Context of University Education, (ISBN:978-80-8069.898-0) Slovak Agricultural University 49-52 p.
- MILLINGTON, R. J. (1959): Gas diffusion in porous media. *Science*, 130, 100-102. p.

- MILLINGTON, R. J., QUIRK, J. P. (1959): Permeability of porous media. *Nature*, 183, 387-388. p.
- MILLINGTON, R.J., QUIRK, J.M. (1960): Transport in porous media. In: VAN BUREN, F.A. et al. (Szerk.) *Transactions of the International Congress of Soil Science, 7th, Madison, WI*, Amsterdam: Elsevier, 97-106. p.
- MILLINGTON, R.J., QUIRK, J.M. (1961): Permeability of porous solids. *Transactions of the Faraday Society*, 57, 1200-1207. p.
- MOLDRUP, P., KRUSE, C. W., ROLSTON, D.E., YAMAGUCHI, T. (1996): Modeling diffusion and reaction in soils: III. Predicting gas diffusivity from the Campbell soil-water retention model. *Soil Science*, 161, 366-375. p.
- MOLDRUP, P., OLESEN, T., GAMST, J., SCHJØNNING, P., YAMAGUCHI, T., ROLSTON, D.E, (2000): Predicting the gas diffusion coefficient in repacked soil: Water-induced linear reduction model. *Soil Science Society of America Journal*, 64 1588-1594. p.
- MOLDRUP, P., OLESEN, T., KOMATSU, T., SCHJØNNING, P., ROLSTON, D. E. (2001): Tortuosity, diffusivity, and permeability in the soil liquid and gaseous phases. *Soil Science Society of America Journal*, 65, 613-623. p.
- MOLDRUP, P., OLESEN, T., ROLSTON, D.E., YAMAGUCHI, T. (1997): Modelling diffusion and reaction in soils: VII. Predicting gas and ion diffusivity in undisturbed and sieved soils. *Soil Science*, 162, 632-640. p.
- MOLDRUP, P., OLESEN, T., SCHJØNNING, P., YAMAGUCHI, T., ROLSTON, D. E. (2000): Predicting the gas diffusion coefficient in undisturbed soil from soil water characteristics. *Soil Science Society of America Journal*, 64, 94-100. p.
- MOLDRUP, P., OLESEN, T., YAMAGUCHI, T., SCHJØNNING, P., ROLSTON, D.E. (1999): modeling diffusion and reaction in soils: VIII. Gas diffusion predicted from single-potential diffusivity or permeability measurements, *Soil Science*, 164 (2) 75-81. p.
- MOLDRUP, P., OLESEN, T., YOSHIKAWA, S., KOMATSU, T., ROLSTON, D.E. (2004): Three-porosity model for predicting the gas diffusion coefficient in undisturbed soil. *Soil Science Society of America Journal*, 68, 750-759. p.
- MOLDRUP, P., OLESEN, T., YOSHIKAWA, S., KOMATSU, T., ROLSTON, D.E. (2005) Predictive-descriptive models for gas and solute diffusion coefficients in variably saturated porous media coupled to pore-size distribution: II. Gas diffusivity in undisturbed soil. *Soil Science*, 170, 854-866. p.
- MURTY, V.R.K., DEVAN, K.R.S. (1997): Atomic photoeffect below 100 keV: an overview and future scope. *Applied Radiation and Isotopes*, 48, 1501-1506. p.

- NAGY, N., GYARMATI, B., MÉSZÁROS, CS., GOTTSCHALK, K., BÁLINT, Á. (2011): Konvekció hengeres talaj rendszerekben, In: Bodnár Ákos (szerk.), Tehetségnap, SZIE MKK Tudományos Diákköri Rendezvény, Gödöllő, Magyarország, (ISBN:978-963-269-235-7) Gödöllő: Szent István Egyetem, 26-29 p.
- NAGY, N., GYARMATI, B., MÉSZÁROS, CS., GOTTSCHALK, K., BÁLINT, Á. (2011): Konvekció hengeres talaj rendszerekben *GÉP LXII.*: (6.) 36-40. p.
- NIMMO, J. R., LANDA, E. R. (2005): The Soil Physics Contributions of Edgar Buckingham. *Soil Science Society of America Journal*, 69, 328-342. p.
- OSTROUMOV, G. A. (1958): Free convection under the conditions of internal problem. *NACA Technical memorandum*, 1407 p.
- ØYGARDEN, L., KVÆRNER, J., JENSSEN, P. D. (1997): Soil erosion via preferential flow to drainage systems in clay soils. *Geoderma*, 76, 65-86. p.
- PACHEPSKY, Y.A., POLUBESOVA, T. A., HAJNOS, M., SOKOLOWSKA, Z., JÓZEFACIUK, Z. (1995): Fractal Parameters of Pore Surface Area as Influenced by Simulated Soil *Degradation* *Soil Science Society of America Journal*, 59 (1) 68-75. p.
- PENMAN, H. L. (1940): Gas and vapor movements in the soil. I. The diffusion of vapours through porous solids. *The Journal of Agricultural Science*, 30, 437-462. p.
- PERRET, J., PRASHER, S.O., KANTZAS, A., LANGFORD, C. (1999): Three-dimensional quantification of macropore networks in undisturbed soil cores. *Soil Science Society of America Journal*, 63, 1530-1543. p.
- PETERSEN, L. W., EL-FARHAN, Y. H., MOLDRUP, P., ROLSTON, D. E., YAMAGUCHI, T. (1996): Transient diffusion, adsorption, and emission of volatile organic vapors in soils with fluctuating low water contents. *Journal of Environmental Quality*, 25, 1054-1063. p.
- PETERSEN, L.W., MOLDRUP, P., ROLSTON, D.E., YAMAGUCHI, T. (1994): Volatile organic vapor diffusion and adsorption in soils. *Journal of Environmental Quality* 23, 799-805. p.
- PETROVIĆ, A. M., SIEBERT, J. E., RIEKE, P. E. (1982): Soil bulk density analysis in three dimensions by computed tomographic scanning. *Soil Science Society of America Journal*, 46, 445-450. p.
- PIERRET, A., CAPOWIEZ, Y., BELZUNCES, L., MORAN, C. J. (2002): 3D reconstruction and quantification of macropores using computed tomography and image analysis. *Geoderma*, 106, 247-271. p.
- POHLMEIER, A., VERGELDT, F., GERKEMA, E., VAN AS, H., VAN DUSSCHOTEN, D., VERECKEN, D. (2010): MRI in Soils: Determination of Water Content Changes Due to Root

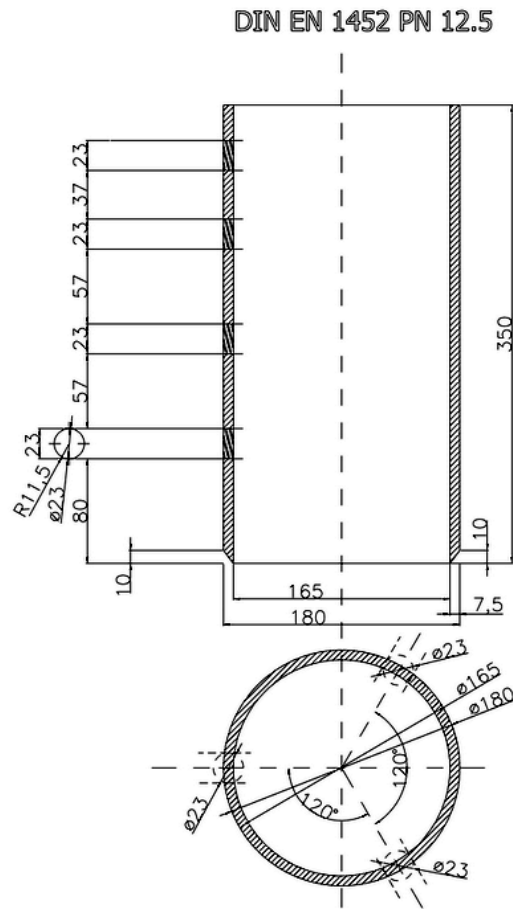
- Water Uptake by Means of a Multi-Slice-Multi-Echo Sequence (MSME). *The Open Magnetic Resonance Journal*, 3, 69-74. p.
- PRITCHARD, D.T., CURRIE, J.A. (1982): Diffusion coefficients of carbon dioxide, nitrous oxide, ethylene and ethane in air and their measurement. *Journal of Soil Science*, 33, 175-184. p.
- RAJKAI K., KABOS S. (1999): A talaj víztartókéesség-függvény (pF-görbe) talajtulajdonságok alapján történő becslésének továbbfejlesztése. *Agrokémia és Talajtan*, 48, 15-33. p.
- REMEYSEN, K., SWENNEN, R. (2006): Beam hardening artifact reduction in microfocus computed tomography for improved quantitative coal characterization. *International Journal of Coal Geology*, 67, 101-111. p.
- RICHTER, J., KERSEBAUM, K., WILLENBOCKEL, I. (1991): Gaseous diffusion reflecting soil structure. *Z Pflanzenernähr Boden*, 154, 13-19. p.
- ROGASIK, H., ONASCH, I., BRUNOTTE, J., JEGOU, D., WENDROTH, O. (2003): Assessment of soil structure using X-ray computed tomography. *Geological Society*, 215, 151-165. p. doi: 10.1144/GSL.SP.2003.215.01.14
- ROSE, A. W., GUO, W. (1995): Thermal convection of soil air on hillsides. *Environmental Geology*, 25, 258-262. p.
- SALLAM, A., JURY, W. A., LETEY, J. (1984): Measurement of gas diffusion coefficient under relatively low air-filled porosity. *Soil Science Society of America Journal*, 48, 3-6. p.
- SANTELLA, N., SCHLOSSER, P., HO, D.T., STUTE, M (2003): Distribution of atmospheric SF₆ near a large urban area as recorded in the vadose zone. *Environ. Sci. Technol.*, 37 (6) 1069–1074. p.
- SASS, R.L., FISHER, F.M., LEWIS, S.T., JUND, M.F., TURNER, F.T. (1994): Methane emission from rice fields: effect of soil properties. *Global Biogeochem Cycles*, 8, 135–140. p.
- SATO, M., BITTER, I., BENDER, M.A., KAUFMAN, A.E., NAKAJIMA, M. (2000): TEASAR: tree-structure extraction algorithm for accurate and robust skeletons. *Proceedings of The Eighth Pacific Conference on Computer Graphics and Applications*, 281, 449. p.
- SCHAAP, M.G., LEBRON, I. (2001): Using microscope observations of thin sections to estimate soil permeability with the Kozeny-Carman equation. *J. Hydro.*, 251, 186-201. p.
- SCHEIDEGGER, A.E. (1974): The physics of flow through porous media, 3rd ed. Toronto, Canada: University of Toronto Press 353 p.
- SCHUMACHER, B.A. (2002): Methods for the determination of total organic carbon (TOC) in soils and sediments. NCEA-C-1282 EMASC-001 online elérhető: <http://epa.gov/nerlesd1/cmb/research/papers/bs116.pdf>

- SHI, X., ZHANG, X., YANG, X., DRURY, C.F., MCLAUGHLIN, N.B., LIANG, A., FAN, R., JIA, S. (2012): Contribution of winter soil respiration to annual soil CO₂ emission in a Mollisol under different tillage practices in northeast China, *Global Biogeochemical Cycles*, 26, 11. p. GB2007, doi:10.1029/2011GB004054.
- SHIMAMURA, K. (1992): Gas diffusion through compacted sands. *Soil Science*, 153, 274-279. p.
- SIMONS, F. J., VERHELST, F., SWENNEN, R. (1997): Quantitative characterization of coal by means of microfocal X-ray computed microtomography (CMT) and color image analysis (CIA). *International Journal of Coal Geology*, 34, 69-88. p.
- SMITH, K. A., BALL, T., CONEN, F., DOBBIE, K. E., MASSHEDER, J., REY, A. (2003): Exchange of greenhouse gases between soil and atmosphere: interactions of soil physical factors and biological processes. *European Journal of Soil Science*, 54 (4) 779-791. p.
- STEFANOVITS, P., FILEP, GY., FÜLEKY GY. (1999): Talajtan. Budapest: Mezőgazda Kiadó, 131-150. p.
- STOLF, R., THURLER, Á., OLIVEIRA, O., BACCHI, S., REICHARDT, K. (2011) Method to estimate soil macroporosity and microporosity based on sand content and bulk density. *R. Bras. Ci. Solo*, 35 447-459. p.
- SZANISZLÓ, A., TÖRŐ, B., GYARMATI, B., HORVÁTH, M., BÁLINT Á. (2008): The examination of the heavy metal concentration of soil, sediment and water in "Rétköz" Water-Reservoir I, In: Farkas I (szerk.)14th Workshop on Energy and Environment: *Book of Abstracts*: Gödöllő, Magyarország, 13 p.
- TAINA, I.A., HECK, R.J., ELLIOT, T.R. (2007): Application of X-ray computed tomography to soil science: A literature review. *Canadian Journal of Soil Science*, 88, 1-20. p.
- TANG, J., et al. (2003): Assessing soil CO₂ efflux using continuous measurements of CO₂ profiles in soils with small solid-state sensors. *Agricultural and Forest Meteorology*, 118, 207-220. p.
- TARQUIS, A.M., HECK, R.J., GRAU, J.B., FABREGAT, J., SANCHEZ, M.E., ANTÓN, J.M. (2008): Influence of thresholding in mass and entropy dimension of 3-D soil images. *Nonlinear Processes in Geophysics*, 15, 881-891.p. doi:10.5194/npg-15-881-2008
- TAUD, H., MARTINEZ-ANGELES, R., PARROT, J. F., HERNANDEZ-ESCOBEDO, L. (2005): Porosity estimation method by X-ray computed tomography. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 47, 209-217. p.
- THORSTENSON, D.C., POLLOCK, D.W. (1989): Gas transport in unsaturated zones: multi-component systems and the adequacy of Fick's laws. *Water Resources Research* 25, 477-507. p.
- TÖRŐ, B., SZANISZLÓ, A., HORVÁTH, M., GYARMATI, B., BÁLINT Á. (2008): The examination of the heavy metal concentration of soil, sediment and water in "Rétköz" Water-

- Reservoir II. In: Farkas I (szerk.) 14th Workshop on Energy and Environment: *Book of Abstracts*: Gödöllő, Magyarország, 14 p.
- TREONIS, A.M., WALL, D.H., VIRGINIA, R.A., (2002): Field and microcosm studies of decomposition and soil biota in a cold desert soil. *Ecosystems* 5, 159–170.
- TROEH, F.R., JABRO, J.D., KIRKHAM, D. (1982): Gaseous diffusion equations for porous materials. *Geoderma*, 27, 239-253. p.
- TRUMBORE, S.E., CHADWICK, O.A., AMUNDSON, R. (1996): Rapid exchange between soil carbon and atmospheric carbon dioxide driven by temperature change, *Science*, 272, 393–396. p.
- TULI, A. (2002): PHD thesis: Pore geometry effect on gaseous diffusion and convective fluid flow in soils. University of California at Davis, Dept. of Land, Air and Water Resources, U.S.A.
- TULI, A., HOPMANS, J.W., ROLSTON, D.E., MOLDRUP, P. (2005): Comparison of Air and Water Permeability between Disturbed and Undisturbed Soils, *Soil Science Society of America Journal*, 69 (5) 1361-1371. p.
- VAN BAVEL, C.H.M. (1952): Gaseous diffusion and porosity in porous media. *Soil Science* 73, 91–104. p.
- VAN GEET, M., SWENNEN, R., DAVID, P. (2001): Quantitative coal characterization by means of microfocus X-ray computer tomography, colour image analysis and back scatter scanning electron microscopy. *International Journal of Coal Geology*, 46, 11-25. p.
- VAN GEET, M., SWENNEN, R., WEVERS, M. (2000): Quantitative analysis of reservoir rocks by microfocus X-ray computerised tomography. *Sedimentary Geology*, 132, 25-36. p.
- VAN MILLIGEN, B.P., BONIS, P.D., CARRERAS, B.A. (2005): On the applicability of Fick's law to diffusion in inhomogeneous systems. *European Journal of Physics*, 26, 913-925. p.
- VÁRKONYI J. (főszerk.) (1983): Természettudományi Kisenciklopédia. Budapest: Gondolat Kiadó, 560 p.
- VITÁL, V., GYARMATI, B., BÁLINT, Á., MÉSZÁROS, CS. (2007): Stacionáriusan körüláramlott gömb alakú szilárd test felületi hőmérsékletváltozásai, Tóth L, Magó L (szerk.) Magyar Tudományos Akadémia Agrártudományok Osztálya Agrárműszaki Bizottság Kutatási és Fejlesztési Tanácskozás Nr. 31, FVM Mezőgazdasági Gépesítési Intézet, (ISBN:978 963 611 4465) 128-132 p.
- VOGEL, H. J. (1997): Digital unbiased estimation of the Euler-Poincare characteristic in different dimensions, *Acta Stereol*, 16 (2) 97–104. p.
- VOGEL, H.J. (2000): A numerical experiment on pore size, pore connectivity, water retention, permeability, and solute transport using network models, *European Journal of Soil Science*, 51, 99-105. p.

- VOGEL, H.J., ROTH, K. (2001): Quantitative morphology and network presentation of soil pore structure, *Advances in Water Resources*, 24 (3-4) 233-242. p.
- VON FISCHER, J.C., BUTTERS, G., DUCHATEAU, P.C., THELWELL, P.J., SILLER, R. (2009): In situ measures of methanotroph activity in upland soils: A reaction-diffusion model and field observation of water stress, *Journal of Geophysical Research*, 114 G01015, doi:10.1029/2008JG000731,
- WANG, G., RECKHORN, S.B.F., GRATHWOHL, P. (2003): Volatile organic compounds volatilization from multicomponent organic liquids and diffusion in unsaturated porous media. *Vadose Zone Journal*, 2, 692-701. p.
- WASHINGTON, J.W., ROSE, A.W., CIOLKOSZ, E.J., DOBOS, R.R. (1994): Gaseous diffusion and permeability in four soil profiles in central Pennsylvania. *Soil Science*, 157, 65-76. p.
- WEBB, W.S., PRUESS, K. (2003): The use of Fick's law for modeling trace gas diffusion. *Transport in Porous Media*, 51 (3) 327-341. p.
- WELLER, U., IPPISCH, O., KÖHNE, M., VOGEL, H.J. (2011): Direct Measurement of Unsaturated Conductivity including Hydraulic Nonequilibrium and Hysteresis. *Vadose Zone Journal*, 10 (2) 654-661. p.
- WUEST, S.B., ALBRECHT, S.L., SKIRVIN, K.W. (1999): Vapor transport vs. seed-soil contact in wheat germination. *Agronomy Journal*, 91, 783-787. p.
- XU, X., NIEBER, J.L., GUPTA, S.C. (1992): Compaction effect on the gas diffusion coefficient on soils. *Soil Science Society of America Journal*, 56 1743-1750. p.
- ZHU, L., LI, Y., ZHOU, Q. (2010): A surface fractal dimension research of soil-pore interface based on image analysis, In: DU, Z., LIU, B. (Szerk): *International Conference on Image Processing and Pattern Recognition in Industrial Engineering*. Proceedings of the SPIE, 7820-68. p. DOI: 10.1117/12.866746

2. MELLÉKLET: A tervezett talajmintavevő rajza és a mintavételezés folyamata



3. MELLÉKLET: Mintavételi adatok és kiegészítő vizsgálati eredmények

Minta ID	Kisminta ID	Mintavétel helye	Mintavételi mélység (mm)	Fizikai t. féleség	Talaj t. féleség	Talaj t. féleség	Szervesa. tartalom (%)	Szemcseméret eloszlás (%)							Hiba (%)	
ID	ID	helye	mélység (mm)	t. féleség	t. féleség	t. féleség	(%)	A	F. V.	K. V.	D. V.	F. H.	K. H.	D. H.	Hiba (%)	
				tömege (g cm ⁻³)												
DU-T		N 47° 26' E 19° 28'	0-350	Vályog												
	Du-a		250-350		1,53	2,43	4,5	23,34	4,44	13,54	30,24	19,91	2,52	3,26	2,75	
	Du-b		150-250		1,50	2,65	2,4	24,74	2,16	9,38	29,77	29,59	1,20	0,57	2,59	
	Du-c		50-150		1,49	2,48	3,6	33,59	8,19	9,85	22,26	20,53	1,62	0,56	3,39	
	Du-d		0-50		1,46	2,57	3,6	25,94	6,71	6,91	20,56	24,52	12,29	1,03	2,04	
EL-T		N 47° 31' E 19° 22'	0-350	Iszapos vályog												
	EL-a		250-350		1,45	2,52	2,2	15,10	2,53	11,29	36,76	29,82	1,13	0,94	2,44	
	EL-b		150-250		1,46	2,51	3,3	19,21	1,87	11,52	38,87	22,50	1,08	1,59	3,37	
	EL-c		50-150		1,46	2,52	4	19,14	9,37	3,13	39,39	23,23	2,14	0,63	2,97	
	EL-d		0-50		1,40	2,56	1,8	23,11	2,23	9,63	27,97	28,45	4,59	1,82	2,19	
ID-T		N 51° 24' E 11° 53'	0-350	Iszapos agyagos vályog												
	Id-a		250-350		1,54	2,52	4,5	25,67	5,53	20,55	42,61	2,75	0,88	0,33	1,67	
	Id-b		150-250		1,52	2,42	3,8	26,47	3,75	20,38	39,25	5,41	2,16	0,65	1,93	
	Id-c		50-150		1,48	2,38	4,3	32,17	5,98	17,58	32,35	7,11	1,97	0,66	2,18	
	Id-d		0-50		1,48	2,42	6	28,76	2,51	4,92	48,46	9,48	2,31	0,66	2,90	
KI-T		N 51° 31' E 11° 51'	20-370	Vályog												
	Ki-a		270-370		1,28	2,26	4,6	19,36	2,12	8,16	10,88	31,64	21,83	4,74	1,27	
	Ki-b		170-270		1,31	2,32	3,7	25,76	3,54	10,51	13,65	19,78	21,41	3,57	1,77	
	Ki-c		70-170		1,37	2,25	4,1	11,16	1,75	36,87	0,39	19,09	23,46	4,47	2,81	
	Ki-d		20-70		1,31	2,35	7,2	27,45	0,52	12,15	14,66	16,54	20,95	4,30	3,43	
KO-T		N 51° 32' E 11° 48'	0-350	Homokos vályog												
	Ko-a		250-350		1,37	2,29	3	18,53	8,65	5,87	1,13	17,79	41,56	2,88	3,60	
	Ko-b		150-250		1,36	2,49	4,7	21,70	2,23	4,02	7,95	18,58	39,04	2,99	3,48	
	Ko-c		50-150		1,35	1,19	6,4	27,82	3,42	2,38	5,36	16,32	37,93	2,76	4,02	
	Ko-d		0-50		1,41	1,01	9,2	23,89	6,80	3,66	13,42	19,29	25,57	2,66	4,71	
LA-T		N 47° 33' E 18° 56'	20-370	Agyagos vályog												
	La-a		270-370		1,44	2,34	4,2	43,44	10,47	9,99	8,07	19,16	2,43	3,16	3,27	
	La-b		170-270		1,44	2,44	4,6	37,08	11,42	11,95	4,69	30,16	1,23	0,59	2,88	
	La-c		70-170		1,54	2,38	4,8	27,75	7,45	13,84	25,96	20,89	1,61	0,56	1,93	
	La-d		20-70		1,44	2,39	4,4	32,53	9,84	14,43	4,67	23,97	11,73	0,98	1,85	
LI-T		N 51° 22' E 11° 57'	10-360	Vályog												
	Li-a		260-360		1,54	2,40	3,5	28,77	8,31	13,37	17,38	18,62	9,58	2,05	1,93	
	Li-b		160-260		1,49	2,32	3,7	20,71	4,25	11,18	13,91	24,84	14,58	9,29	1,26	
	Li-c		60-160		1,60	2,35	3,3	21,46	3,56	27,78	21,59	12,41	8,99	1,82	2,39	
	Li-d		10-60		1,50	2,49	3,8	35,75	10,17	16,91	5,76	25,19	0,11	2,91	3,21	
MO-T		N 47° 27' E 19° 21'	0-350	Homokos vályog												
	Mo-a		250-350		1,49	2,59	2,3	18,86	1,52	7,22	11,81	27,87	28,98	0,95	2,78	
	Mo-b		150-250		1,45	2,60	1,8	12,01	0,60	3,98	7,50	27,10	45,38	1,45	1,97	
	Mo-c		50-150		1,49	2,58	3,2	18,30	6,15	6,13	8,31	27,36	30,37	0,44	2,94	
	Mo-d		0-50		1,48	2,61	1,7	20,75	4,20	4,29	8,83	27,09	26,09	6,28	2,48	

A= agyag

V= vályog

H= homok

F= finom

K= közepes

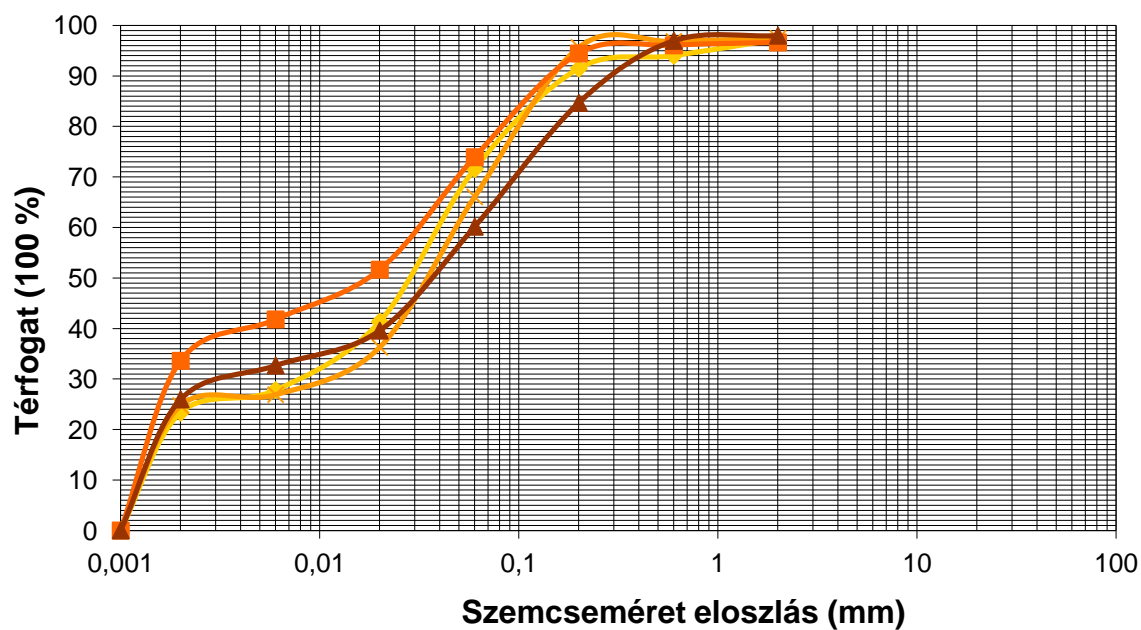
D= durva

* piknométeres meghatározás alapján

4. MELLÉKLET: Részletek DU-T minta szemcseméret-eloszlás elemzésének kiértékeléséből (Sedimat)

ID	M. sorozat ID	Tömeg	Durva F1	Közepes F2	Finom F3	Agyag F4	>0.63	>0.2	>0.063	Total
3A	DU talaj-alminta	Talaj + ü. edény	56,7517	52,7905	54,3973	55,9173	207,3	103,5	102,89	
	3AA	ü. Edény	56,656	52,7355	54,3617	55,8843	207,2	103,2	101,29	
Vakpróba: 0,003525	DU talaj-alminta	Talaj + ü. edény	54,6781	53,8709	56,9591	60,1484	207,9	103,3	103,38	
	3AB	ü. Edény	54,5785	53,8117	56,9167	60,1142	207,2	103,2	101,29	
	DU talaj-alminta	Talaj + ü. edény	56,9271	57,6759	56,9203	59,3512	207,3	103,4	103,24	
	3AC	ü. Edény	56,8358	57,6201	56,8803	59,3179	207,2	103,2	101,29	
	1	talaj	0,0957	0,055	0,0356	0,033	0,08	0,32	1,6	
	2	talaj	0,0996	0,0592	0,0424	0,0342	0,74	0,13	2,09	
	3	talaj	0,0913	0,0558	0,04	0,0333	0,12	0,26	1,95	
	Durva-Finom frakció		0,425287	0,20271682	0,02717	0,3079937				
	Durva-Finom frakció		0,405622	0,1686747	0,08233	0,3079819				
	Durva-Finom frakció		0,388828	0,17305586	0,07338	0,3261227				
	y/3AA						0,008	0,034	0,1681	
	y/3AB						0,076	0,013	0,2153	
	y/3AC						0,013	0,029	0,2139	
	%		0,335919	0,16011865	0,02146	0,2432731	0,008	0,034	0,1681	97,091
	%		0,281954	0,11724804	0,05723	0,2140824	0,076	0,013	0,2153	97,54
	%		0,289464	0,12883174	0,05463	0,2427826	0,013	0,029	0,2139	97,126
	M%		30,245	13,540	4,444	23,338	3,260	2,518	19,908	97,252

ID	0,001	0,002	0,006	0,02	0,06	0,2	0,6	2
		Agyag [%]	Finom v. [%]	Közepes v. [%]	Durva v. [%]	Finom h. [%]	Közepes h. [%]	Durva h. [%]
1A	0	23,34	27,78	41,32	71,57	91,47	93,99	97,25
1B	0	24,74	26,89	36,27	66,04	95,63	96,84	97,41
1C	0	33,59	41,79	51,64	73,90	94,43	96,05	96,61
1D	0	25,94	32,65	39,57	60,13	84,65	96,93	97,96



5. MELLÉKLET: A CT-vel készített felvételek dicom formátumú fájljainak módosításához és a Th₁ küszöbérték meghatározásához írt program

%% PARAMETEREK

```

brd = 0;           % [képpont] a képek szegélyeknek levágása memóriaspórolás céljából
zcut_up = 20;     % [layer] levágandó layerek a minta tetejéről a fals információk és memóriaspórolás miatt
zcut_dwn = 20;   % [layer] levágandó layerek a minta aljáról a fals információk és memóriaspórolás miatt
R_lim = 200;     % [képpont] a kiértékelési zóna sugara
xoffset = 0;     % [képpont] a megvágott minta eltolása x irányban, ha esetleg nem lenne pontosan középen
yoffset = 0;     % [képpont] a megvágott minta eltolása y irányban, ha esetleg nem lenne pontosan középen
trsh = 100;     % kézzel megadható küszöbérték, ha nem akarjuk a gépre bízni a meghatározását.
poroz = 20;     % [%] kézzel megadható porozitásérték. A LEVEGORE vonatkozik.

trsh_mod = 0;    % thresholdszámítási módszer 0: default, 1: kézzel megadott, 2: porozitás alapján

r_se = 1;       % [voxel] a structuring element sugara
montages = [30 90 211]; % melyik layekből legyen montage, ha üres nem csinál, ha kilógnak a megadott értékek a
                    % mintából, akkor az aljából vagy a tetejéből készít
all_bins = 200; % az összes voxelcsoportot tartalmazó hisztogram oszlopainak száma. Ha <= 0 akkor ezt a
                    % hisztogramot nem rajzolja ki.
lim_bins = 500; % a limitált hisztogram oszlopainak száma
hist_lim = 500; % hisztogram limit
hist_disp_lim = 30; % hisztogram megjelenítési limit
fig_ena = 0;    % legyen-e 3D-s megjelenítés, vagy sem
obj_start = 1;  % melyik voxelcsoporttól kezdve jelenítsen meg
obj_end = 'max'; % melyik voxelcsoportig jelenítsen meg
frames = 360*2; % video képkockák száma

```

%% FUTTATAS

```

dicomloader2g;
dicomproc4k;

```

Dicomloader2g:

%% INICIALIZÁLÁS

```

Fajlok = dir;           % fájlnevek "felvétele"
X=[];                 % az összes adatot magába foglaló mátrix inicializálása
j=0;                 % ciklusváltozó inicializálása      %info=[];

```

%% BEOLVASAS

```

for i=1:length(Fajlok)
if j<500
if ~isempty(regexp(Fajlok(i).name, '(s_\d\d\d\d.dcm)$'))
                    % bármilyen karakter 0 vagy többször, .SUM a végén
j=j+1;
X(:,j) = dicomread(Fajlok(i).name);
                    % beolvasás fájlanként egy képbe
infostruct(j).info = dicominfo(Fajlok(i).name);
end
end
end
X=uint16(X);

```

Dicomproc4k:

%% A MINTA ELŐZETES MEGVÁGÁSA

```

xoffset=-1*xoffset;      % offset átfordítása
yoffset=-1*yoffset;      % offset átfordítása
brd=brd+1;
rawsize=size(X;         % a kiindulási méret meghatározása
data_cut=uint16(X((brd+yoffset):512-(brd-1-yoffset),(brd+xoffset):512-(brd-1-xoffset),zcut_dwn:(rawsize(3)-
zcut_up)))
                        % szegélyek levágása
maxdatacut = double(max(max(max(data_cut))));
                        % maximális méretek kiválsztása
cutszize = size(data_cut); % a levágott eredménymátrix méretének meghatározása

```

%% MONTÁZS ELŐKÉSZÍTÉSE

```

montages(montages<(zcut_dwn+1)) = zcut_dwn+1;
montages(montages>(cutszize(3)+zcut_dwn-zcut_up-1)) = cutszize(3)+zcut_dwn-zcut_up-1;
montmtrx = [];
if ~isempty(montages)
for i=1:length(montages)
montmtrx(:,i,:)=uint16((double(data_cut(:,i,:),montages(i)-zcut_dwn)).^1.4);
end
end

```

%% A KIÉRTÉKELÉSI TARTOMÁNY MASZKOLÁSA

```

maxval=max(max(max(data_cut))); % maszk inicializálása
for i=1:cutszize(1)
for j=1:cutszize(2)
if sqrt((i-cutszize(1)/2)^2+(j-cutszize(2)/2)^2)>R_lim
data_cut(i,j,:)=maxval(1);
                        %mask(i,j,:)=10000; % minden maszk sugarán kívül eső képponthoz ez a magas
                        %érték fog hozzáadódni
                        %else
                        %mask(i,j,:)=0;
end
end
end

```

%% A MEGVAGOTT, MASZKOLT ADATOK KIIRASA DICOM-FAJLBA

```

blank = uint16(ones(size(data_cut(:, :, 1))))*maxval(1);
for i=1:cutszize(3)+zcut_dwn
currfilename = ['CUTTED_s_' num2str(i) '.dcm'];
currstruct = infostruct(i).info;
currstruct.FileName = currfilename;
if i <= zcut_dwn
dicomwrite(blank, currfilename, currstruct);
else
dicomwrite((data_cut(:, :, i-zcut_dwn)), currfilename, currstruct);
                        % dicomwrite(data_cut12, ['CUTTED_s_' num2str(i) '.dcm'], 'ObjectType', 'CT
                        %Image Storage');
end
end
clear x_se y_se z_se i j mask
                        % nem használt változók törlése memória spórolás céljából

```

%% KÜSZÖBÉRTÉK SZÁMÍTÁS

```

f1=figure;
subplot(2,1,1)
X2 = reshape(data_cut, prod(size(data_cut)),1); % egy sorvektorba rendezi a képpontokat
X2 = X2(X2<10000);
histax = single(0:10:max(X2));
                                % Létrehozza a hisztogram vízszintes tengelyét 10-es lépésekkel
[n, xout] = hist(single(X2),histax);
                                % visszaadja az oszlopok helyét (xout) és értékeit (n)
bar(xout,n,'b','EdgeColor',[0 0 1]) % megrajzolja a hisztogramot
minloc=find(n==min(n(100<xout<1200))); % az 1500 előtti oszlopok közül kiválasztja legkisebbet (a két csúcs közti
                                % minimum), ami jelen esetben a dolgozat Th1-es küszöbértékének felel meg
                                % a küszöb érték egyenlő az első minimumhellyel (ha esetleg több is volna)

l=length(xout);
maxloc1=find(n==max(n(1:minloc)));
max1=xout(maxloc1(1));
maxloc2=find(n==max(n(minloc:length(n)-10)));
max2=xout(maxloc2(1));
treshold=((max1+max2)/2);
if trsh_mod == 1                % a küszöb értékének felülírása kézzel megadott értékekkel, ha van megadva
treshold = trsh;
end

% CÍMKÉK, FELIRATOK

xlabel('keppontertek')
ylabel('darabszam [db]')
title(['A teljes minta hisztogramja 10-es lepcsőkkel (' num2str(length(X2)) ' db keppont)'])
hold on
maxval=max(n);
plot([treshold treshold],[0 maxval(1)],'r--')
legend('hisztogram','treshold')
subplot(2,1,2)
n_sum = cumsum(n);
poroz_trshloc = length(n_sum(n_sum./n_sum(length(n_sum)) <= poroz/100));
poroz_trsh = xout(poroz_trshloc);
plot(xout, n_sum)
hold on
plot([poroz_trsh poroz_trsh],[0 n_sum(length(n_sum))], 'r--')
xlabel('keppontertek')
ylabel('kumulalt darabszam [db]')
if trsh_mod == 2
treshold = poroz_trsh;
end
saveas(f1,'treshold.png')
clear X2 n xout
disp(treshold)

```

6. MELLÉKLET: A 9. ábrában látható Pareto és a többi eloszlásfüggvény példa programja

```

adat = dlmread('ko_csv.csv', ',', 2, 1);
                                % a pórusméret eloszlást tartalmazó nyersfájl beolvasása

%% PARAMÉTEREK

                                % az alapfájl szerkezete:
                                % 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
                                % Volume3d; Area3d; BaryCenterX; BaryCenterY; BaryCenterZ; Mean;
                                % FirstPointX; FirstPointY; FirstPointZ; index

StatAdat = adat(:,1);
hist_lim = 1000000;              % hisztogram limit, kidobja a limitnél nagyobb értékeket
lim_bins = 1100000;             % oszlopok max. száma a hisztogramban
hist_disp_lim = 50;            % hisztogram megjelenítési határa

%% A 9. ÁBRÁN TALÁLHATÓ PÉLDASZÁMÍTÁSOK

vols=StatAdat(StatAdat<hist_lim);

% EXPONENTIAL
lambda = length(vols)/sum(vols);

% PARETO
x_par = min(vols);
alpha_par = length(vols)/sum(log(vols)-log(x_par));
median_par = x_par*2^(1/alpha_par);
if alpha_par > 1
mean_par = alpha_par*x_par/(alpha_par-1);
if alpha_par > 2
var_par = x_par^2*alpha_par/((alpha_par-1)^2*(alpha_par-2));
else
var_par = NaN;
disp('Szorasnegyezt nem szamolhato (alfa<2)')
end
else
mean_par = NaN;
var_par = NaN;
disp('Atlag nem szamolhato (alfa<1)')
end

% POISSON
lambda_po = 1/lambda;

% GEOMETRIC
p_geo = lambda;

% WEIBULL
par_wei = wblfit(vols);
lambda_wei = par_wei(1);
k_wei = par_wei(2);

```


7. MELLÉKLET: A függőségi kapcsolatok feltárásának alaptáblázata**Th₁-re vonatkozólag:**

0,093115	Elágazások sűrűsége
0,092829	Makroporozitás2
0,090322	Homok
0,088983	Teljes makropórus-felület
0,087808	Hosszsűrűség
0,085856	Hálózatok sűrűsége
0,082906	Makroporozitás1
0,076735	α
0,073358	Agyag
0,073055	Vályog
0,060518	Átlagos makropórus méret
0,051074	Sűrűség
0,043441	τ

Th₁, Th₂, Th₃-ra vonatkozólag összesítve:

0,110355	Teljes makropórus-felület
0,100568	Makroporozitás1
0,100512	Makroporozitás2
0,096157	Hosszsűrűség
0,093976	Elágazások sűrűsége
0,09103	Homok
0,08577	α
0,080905	Vályog
0,07566	Agyag
0,070928	Átlagos makropórus méret
0,067244	Hálózatok sűrűsége
0,056075	τ
0,052888	Sűrűség

8. MELLÉKLET: A többváltozós lineáris regressziós analízis Th_1 bemeneti értékekkel, első tesztmodell

Regression Analysis: Össz versus Hálózati sűrűség; Makroporozitás1; ...

* Homok is highly correlated with other X variables

* Homok has been removed from the equation.

* Sűrűség is highly correlated with other X variables

* Sűrűség has been removed from the equation.

The regression equation is

$$\text{Össz} = -0,137 + 0,185 \text{ Hálózati sűrűség} - 2,02 \text{ Makroporozitás1} \\ + 0,00265 \text{ Átlag makropórus méret} + 0,104 \alpha - 0,000000 \text{ Elágazás} + 0,0704 \tau$$

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	-0,1366	0,4245	-0,32	0,752
Hálózati sűrűség	0,1854	0,1066	1,74	0,104
Makroporozitás1	-2,022	1,155	-1,75	0,102
Átlag makropórus méret	0,002645	0,003640	0,73	0,479
α	0,1043	0,5661	0,18	0,857
Elágazás	-0,00000028	0,00000016	-1,75	0,102
τ	0,07042	0,04060	1,73	0,105

S = 0,0416721 R-Sq = 22,5% R-Sq(adj) = 0,0%

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	6	0,007064	0,001177	0,68	0,670
Residual Error	14	0,024312	0,001737		
Total	20	0,031376			

Source	DF	Seq SS
Hálózati sűrűség	1	0,000046
Makroporozitás1	1	0,000815
Átlag makropórus méret	1	0,000079
α	1	0,000033
Elágazás	1	0,000867
τ	1	0,005225

Unusual Observations

Obs	Hálózati sűrűség	Össz	Fit	E Fit	Residual	St Resid
20	1,45	0,18214	0,06447	0,02406	0,11767	3,46R

R denotes an observation with a large standardized residual.

9. MELLÉKLET: A többváltozós lineáris regressziós analízis Th_1 bemeneti értékekkel, második tesztmodell

Regression Analysis: Össz versus Hálózati sűrűség; Makroporozitás1; ...

The regression equation is

$$\text{Össz} = 0,148 + 0,0995 \text{ Hálózati sűrűség} - 2,25 \text{ Makroporozitás1} \\ - 0,000000 \text{ Elágazás} + 0,0556 \tau - 0,00133 \text{ Homok} - 0,0005 \text{ Sűrűség}$$

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,1483	0,2053	0,72	0,482
Hálózati sűrűség	0,09948	0,08511	1,1	0,262
Makroporozitás1	-2,249	1,216	-1,85	0,086
Elágazás	-0,00000017	0,00000013	-1,29	0,217
τ	0,05562	0,03455	1,61	0,130
Homok	-0,001334	0,001378	-0,97	0,350
Sűrűség	-0,00051	0,04235	-0,01	0,991

S = 0,0416721 R-Sq = 22,5% R-Sq(adj) = 0,0%

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	6	0,007064	0,001177	0,68	0,670
Residual Error	14	0,024312	0,001737		
Total	20	0,031376			

Source	DF	Seq SS
Hálózati sűrűség	1	0,000046
Makroporozitás1	1	0,000815
Elágazás	1	0,000135
τ	1	0,003843
Homok	1	0,002224
Sűrűség	1	0,000000

Unusual Observations

Obs	Hálózati sűrűség	Össz	Fit	SE Fit	Residual	St Resid
20	1,45	0,18214	0,06447	0,02406	0,11767	3,46R

R denotes an observation with a large standardized residual.

10. MELLÉKLET: A többváltozós lineáris regressziós analízis Th_1 bemeneti értékekkel, harmadik tesztmodell

Regression Analysis: Össz versus Hálózati sűrűség; Makroporozitás1; ...

The regression equation is

$$\text{Össz} = 0,146 + 0,0997 \text{ Hálózati sűrűség} - 2,25 \text{ Makroporozitás1} \\ - 0,000000 \text{ Elágazás} + 0,0556 \tau - 0,00132 \text{ Homok}$$

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,1463	0,1235	1,18	0,255
Hálózati sűrűség	0,09966	0,08090	1,23	0,237
Makroporozitás1	-2,248	1,171	-1,92	0,074
Elágazás	-0,00000017	0,00000013	-1,34	0,200
τ	0,05564	0,03333	1,67	0,116
Homok	-0,001325	0,001131	-1,17	0,260

S = 0,0402592 R-Sq = 22,5% R-Sq(adj) = 0,0%

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	5	0,007064	0,001413	0,87	0,523
Residual Error	15	0,024312	0,001621		
Total	20	0,031376			

Source	DF	Seq SS
Hálózati sűrűség	1	0,000046
Makroporozitás1	1	0,000815
Elágazás	1	0,000135
τ	1	0,003843
Homok	1	0,002224

Unusual Observations

Obs	Hálózati sűrűség	Össz	Fit	SE Fit	Residual	St Resid
20	1,45	0,18214	0,06444	0,02308	0,11770	3,57R

R denotes an observation with a large standardized residual.

11. MELLÉKLET: A többváltozós lineáris regresszió analízis CO₂-ra Th₁ bemeneti értékekkel

Regression Analysis: CO2 versus Elágazás; Makroporozitás1; τ

The regression equation is

$$\text{CO}_2 = 0,0311 + 0,000000 \text{ Elágazás} - 0,310 \text{ Makroporozitás1} - 0,0103 \tau$$

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,03113	0,01958	1,59	0,210
Elágazás	0,00000005	0,00000002	3,08	0,054
Makroporozitás1	-0,3104	0,2477	-1,25	0,299
τ	-0,010302	0,006049	-1,70	0,187

S = 0,00825859 R-Sq = 76,5% R-Sq(adj) = 53,0%

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	3	0,00066599	0,00022200	3,25	0,179
Residual Error	3	0,00020461	0,00006820		
Total	6	0,00087060			

Source	DF	Seq SS
Elágazás	1	0,00030033
Makroporozitás1	1	0,00016781
τ	1	0,00019785

12. MELLÉKLET: A N₂O-ra Th₁ bemeneti értékekkel kapott legjobb modellkombinációk és a választott többváltozós lineáris regresszió analízise

Best Subsets Regression: N2O versus Hálózati sűr; Makroporozit; ...

Response is N2O

Vars	R-Sq	R-Sq(adj)	Mallows Cp	S	Hálózati sűr	Makroporozit	Hálózati sűr	Makroporozit	Hálózati sűr	Makroporozit
1	47,1	36,5	-1,6	0,016869	X					
1	27,2	12,7	-1,0	0,019776	X					
2	52,6	29,0	0,3	0,017840	X	X				
2	51,9	27,8	0,3	0,017980	X	X				
3	56,9	13,8	2,2	0,019647	X	X	X			
3	56,1	12,1	2,2	0,019842	X	X		X		
4	59,8	0,0	4,1	0,023255	X	X	X	X		
4	57,9	0,0	4,2	0,023779	X	X	X	X		
5	63,5	0,0	6,0	0,031340	X	X	X	X	X	

Regression Analysis: N2O versus Makroporozitás1

The regression equation is
 N2O = 0,0972 - 0,831 Makroporozitás1

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,09720	0,03720	2,61	0,048
Makroporozitás1	-0,8311	0,3942	-2,11	0,089

S = 0,0168695 R-Sq = 47,1% R-Sq(adj) = 36,5%

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	1	0,0012650	0,0012650	4,45	0,089
Residual Error	5	0,0014229	0,0002846		
Total	6	0,0026879			

13. MELLÉKLET: A CH₄-ra Th₁ bemeneti értékekkel kapott legjobb modellkombinációk és a választott többváltozós lineáris regresszió analízise

Best Subsets Regression: CH₄ versus Hálózati sűr; Makroporozit; ...

Response is CH₄

Vars	R-Sq	R-Sq(adj)	Mallows Cp	S	H o r E s o l ú z á r i g H ú t a o s á z m é s á o g l s τ k
1	4,8	0,0	8,2	0,068796	X
1	3,9	0,0	8,3	0,069110	X
2	11,3	0,0	9,5	0,074224	X X
2	11,0	0,0	9,5	0,074365	X X
3	34,8	0,0	8,7	0,073465	X X X
3	33,7	0,0	8,8	0,074130	X X X
4	73,5	20,6	6,1	0,057333	X X X X
4	47,4	0,0	9,2	0,080838	X X X X
5	91,5	49,1	6,0	0,045897	X X X X X

Regression Analysis: CH₄ versus Elágazás; τ; ...

The regression equation is

CH₄ = 0,230 - 0,000001 Elágazás + 0,201 τ - 5,98 Makroporozitás1 - 0,00325 Homok + 0,364 Hálózati sűrűség

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,2299	0,2439	0,94	0,519
Elágazás	-0,00000065	0,00000025	-2,57	0,236
τ	0,20086	0,06581	3,05	0,202
Makroporozitás1	-5,981	2,313	-2,59	0,235
Homok	-0,003252	0,002233	-1,46	0,383
Hálózati sűrűség	0,3644	0,1598	2,28	0,263

S = 0,0458974 R-Sq = 91,5% R-Sq(adj) = 49,1%

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	5	0,022744	0,004549	2,16	0,474
Residual Error	1	0,002107	0,002107		
Total	6	0,024850			

Source	DF	Seq SS
Elágazás	1	0,000183
τ	1	0,002546
Makroporozitás1	1	0,000088
Homok	1	0,008963
Hálózati sűrűség	1	0,010963

14. MELLÉKLET: A többváltozós lineáris regressziós analízis Th₂ bemeneti értékekkel, végső tesztmodell

Regression Analysis: Össz versus Makroporozitás1; Átlag makropórus; ...

The regression equation is

$$\text{Össz} = 0,183 + 0,802 \text{ Makroporozitás1} - 0,00946 \text{ Átlag makropórus méret} \\ - 0,0441 \text{ Hálózati sűrűség} + 0,000000 \text{ Elágazás} + 0,000304 \tau$$

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,1827	0,1139	1,60	0,130
Makroporozitás1	0,8020	0,3910	2,05	0,058
Átlag makropórus méret	-0,009458	0,005649	-1,67	0,115
Hálózati sűrűség	-0,04413	0,02740	-1,61	0,128
Elágazás	0,00000004	0,00000004	1,10	0,290
τ	0,0003035	0,0006467	0,47	0,646

S = 0,0402651 R-Sq = 22,5% R-Sq(adj) = 0,0%

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	5	0,007057	0,001411	0,87	0,523
Residual Error	15	0,024319	0,001621		
Total	20	0,031376			

Source	DF	Seq SS
Makroporozitás1	1	0,001080
Átlag makropórus méret	1	0,000585
Hálózati sűrűség	1	0,002656
Elágazás	1	0,002378
τ	1	0,000357

15. MELLÉKLET: A CO₂-ra Th₂ bemeneti értékekkel kapott legjobb modellkombinációk és a választott többváltozós lineáris regresszió

Best Subsets Regression: CO2 versus Makroporozit; Átlag makrop; ...

Response is CO2

Vars	R-Sq	R-Sq(adj)	Mallows Cp	S	Átlag makrop	τ
1	83,4	80,0	1,2	0,0053812		
1	27,1	12,5	15,3	0,011269	X	
2	90,6	85,9	1,4	0,0045255		X X
2	89,2	83,8	1,7	0,0048527	X	X
3	95,9	91,7	2,0	0,0034604	X	X X
3	95,1	90,2	2,2	0,0037621	X X	X
4	96,0	88,0	4,0	0,0041649	X X X	X
4	95,9	87,8	4,0	0,0042019	X X	X X
5	96,0	76,1	6,0	0,0058891	X X X	X X

Regression Analysis: CO2 versus Elágazás; τ; Átlag makropórus méret

The regression equation is

$$\text{CO}_2 = 0,0207 - 0,000000 \text{ Elágazás} + 0,000606 \tau - 0,000524 \text{ Átlag makropórus méret}$$

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,020734	0,006075	3,41	0,042
Elágazás	-0,00000001	0,00000000	-2,43	0,093
τ	0,00060623	0,00008946	6,78	0,007
Átlag makropórus méret	-0,0005242	0,0002674	-1,96	0,145

S = 0,00346041 R-Sq = 95,9% R-Sq(adj) = 91,7%

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	3	0,00083468	0,00027823	23,24	0,014
Residual Error	3	0,00003592	0,00001197		
Total	6	0,00087060			

Source	DF	Seq SS
Elágazás	1	0,00018285
τ	1	0,00060584
Átlag makropórus méret	1	0,00004600

16. MELLÉKLET: A N₂O-ra Th₂ bemeneti értékekkel kapott legjobb modellkombinációk és a választott többváltozós lineáris regresszió analízise

Best Subsets Regression: N2O versus Makroporozit; Átlag makrop; ...

Response is N2O

Vars	R-Sq	R-Sq(adj)	Mallows Cp	S	1	t	g	s	τ
1	43,4	32,1	9,3	0,017446					
1	23,8	8,5	13,6	0,020244	X				
2	76,1	64,1	4,2	0,012677				X	X
2	45,6	18,4	10,8	0,019118	X			X	
3	94,6	89,2	2,2	0,0069669		X		X	X
3	91,3	82,5	2,9	0,0088458			X	X	X
4	95,4	86,2	4,0	0,0078658	X	X		X	X
4	95,0	85,0	4,1	0,0081955		X	X	X	X
5	95,4	72,4	6,0	0,011118	X	X	X	X	X

Regression Analysis: N2O versus Elágazás; τ; Átlag makropórus méret

The regression equation is

$$N2O = 0,0910 - 0,000000 \text{ Elágazás} + 0,000959 \tau - 0,00172 \text{ Átlag makropórus méret}$$

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,09103	0,01223	7,44	0,005
Elágazás	-0,00000003	0,00000000	-6,69	0,007
τ	0,0009586	0,0001801	5,32	0,013
Átlag makropórus méret	-0,0017234	0,0005384	-3,20	0,049

S = 0,00696690 R-Sq = 94,6% R-Sq(adj) = 89,2%

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	3	0,00254229	0,00084743	17,46	0,021
Residual Error	3	0,00014561	0,00004854		
Total	6	0,00268791			

Source	DF	Seq SS
Elágazás	1	0,00116601
τ	1	0,00087905
Átlag makropórus méret	1	0,00049723

17. MELLÉKLET: A CH₄-ra Th₂ bemeneti értékekkel kapott legjobb modellkombinációk és a választott többváltozós lineáris regresszió analízise

Best Subsets Regression: CH₄ versus Makroporozit; Átlag makrop; ...

Response is CH₄

Vars	R-Sq	R-Sq(adj)	Mallows Cp	S	Átlag makrop	Hálózati sűrűség	Elágazás	τ
1	24,8	9,8	120,0	0,061121	X			
1	7,3	0,0	148,8	0,067895				X
2	49,4	24,1	81,8	0,056068	X			X
2	37,4	6,1	101,5	0,062374	X	X		
3	61,4	22,7	64,2	0,056572	X	X	X	
3	52,4	4,7	79,0	0,062824	X	X	X	X
4	96,9	90,6	8,1	0,019720	X	X	X	X
4	61,5	0,0	66,0	0,069150	X	X	X	X
5	99,4	96,3	6,0	0,012322	X	X	X	X

Regression Analysis: CH₄ versus Makroporozitás1; Átlag makropórus; ...

The regression equation is

$$\text{CH}_4 = 0,432 + 2,35 \text{ Makroporozitás1} - 0,0257 \text{ Átlag makropórus méret} - 0,131 \text{ Hálózati sűrűség} + 0,000000 \text{ Elágazás} - 0,000696 \tau$$

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,43241	0,06037	7,16	0,088
Makroporozitás1	2,3492	0,2073	11,33	0,056
Átlag makropórus méret	-0,025692	0,002994	-8,58	0,074
Hálózati sűrűség	-0,13104	0,01452	-9,02	0,070
Elágazás	0,00000016	0,00000002	7,87	0,080
τ	-0,0006960	0,0003428	-2,03	0,291

S = 0,0123217 R-Sq = 99,4% R-Sq(adj) = 96,3%

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	5	0,0246984	0,0049397	32,54	0,132
Residual Error	1	0,0001518	0,0001518		
Total	6	0,0248502			

Source	DF	Seq SS
Makroporozitás1	1	0,0061714
Átlag makropórus méret	1	0,0031167
Hálózati sűrűség	1	0,0059609
Elágazás	1	0,0088235
τ	1	0,0006260

18. MELLÉKLET: A többváltozós lineáris regressziós analízis Th_3 bemeneti értékekkel, első tesztmodell

Regression Analysis: Össz versus Makroporozitás1; Átlag makropórus; ...

The regression equation is

$$\text{Össz} = -0,529 + 0,788 \text{ Makroporozitás1} + 0,00203 \text{ Átlag makropórus méret} \\ - 0,00305 \text{ Hálózati sűrűség} - 0,002 \alpha + 0,00655 \text{ homok} + 0,0223 \text{ Sűrűség}$$

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	-0,5294	0,4471	-1,18	0,256
Makroporozitás1	0,7876	0,4055	1,94	0,072
Átlag makropórus méret	0,002032	0,002086	0,97	0,347
Hálózati sűrűség	-0,003049	0,009464	-0,32	0,752
α	-0,0022	0,4202	-0,01	0,996
homok	0,006550	0,003982	1,64	0,122
Sűrűség	0,02231	0,04272	0,52	0,610

S = 0,0416721 R-Sq = 22,5% R-Sq(adj) = 0,0%

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	6	0,007064	0,001177	0,68	0,670
Residual Error	14	0,024312	0,001737		
Total	20	0,031376			

Source	DF	Seq SS
Makroporozitás1	1	0,001064
Átlag makropórus méret	1	0,000212
Hálózati sűrűség	1	0,000888
α	1	0,000019
homok	1	0,004408
Sűrűség	1	0,000474

19. MELLÉKLET: A többváltozós lineáris regressziós analízis Th_3 bemeneti értékekkel, második tesztmodell

Regression Analysis: Össz versus Makroporozit; Átlag makrop; homok

The regression equation is

$$\text{Össz} = -0,489 + 0,755 \text{ Makroporozitás1} + 0,00230 \text{ Átlag makropórus méret} + 0,00645 \text{ homok}$$

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	-0,4891	0,2701	-1,81	0,088
Makroporozitás1	0,7555	0,3701	2,04	0,057
Átlag makropórus méret	0,002300	0,001620	1,42	0,174
homok	0,006453	0,003486	1,85	0,082

S = 0,0383870 R-Sq = 20,2% R-Sq(adj) = 6,1%

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	3	0,006326	0,002109	1,43	0,269
Residual Error	17	0,025051	0,001474		
Total	20	0,031376			

Source	DF	Seq SS
Makroporozitás1	1	0,001064
Átlag makropórus méret	1	0,000212
homok	1	0,005050

20. MELLÉKLET: A CO₂-ra Th₃ bemeneti értékekkel kapott legjobb modellkombinációk és a választott többváltozós lineáris regresszió

Best Subsets Regression: CO2 versus Makroporozit; Átlag makrop; homok

Response is CO2

Vars	R-Sq	R-Sq(adj)	Mallows Cp	S	Átlag makrop homok
1	7,4	0,0	1,8	0,012698	X
1	6,4	0,0	1,9	0,012769	X
2	29,3	0,0	2,7	0,012407	X X
2	16,2	0,0	3,4	0,013505	X X
3	42,6	0,0	4,0	0,012901	X X X

Regression Analysis: CO2 versus Makropozitás1; Átlag makropórus; homok

The regression equation is

$$\text{CO2} = 0,191 - 0,180 \text{ Makropozitás1} - 0,00128 \text{ Átlag makropórus méret} - 0,00239 \text{ homok}$$

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,1909	0,1572	1,21	0,312
Makropozitás1	-0,1802	0,2154	-0,84	0,464
Átlag makropórus méret	-0,0012807	0,0009431	-1,36	0,268
homok	-0,002387	0,002029	-1,18	0,324

S = 0,0129010 R-Sq = 42,6% R-Sq(adj) = 0,0%

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	3	0,0003713	0,0001238	0,74	0,593
Residual Error	3	0,0004993	0,0001664		
Total	6	0,0008706			

Source	DF	Seq SS
Makropozitás1	1	0,0000643
Átlag makropórus méret	1	0,0000767
homok	1	0,0002302

21. MELLÉKLET: A N₂O-ra Th₃ bemeneti értékekkel kapott legjobb modellkombinációk és a választott többváltozós lineáris regresszió analízise

Best Subsets Regression: N2O versus Makroporozit; Átlag makrop; homok

Response is N2O

Vars	R-Sq	R-Sq(adj)	Mallows Cp	S	Átlag makrop homok
1	9,8	0,0	0,0	0,022020	X
1	9,2	0,0	0,1	0,022095	X
2	10,7	0,0	2,0	0,024492	X X
2	10,0	0,0	2,0	0,024590	X X
3	10,9	0,0	4,0	0,028247	X X X

Regression Analysis: N2O versus Makroporozitás1; Átlag makropórus; homok

The regression equation is

$$\text{N2O} = 0,067 - 0,083 \text{ Makroporozitás1} - 0,00039 \text{ Átlag makropórus méret} - 0,00038 \text{ homok}$$

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0,0670	0,3443	0,19	0,858
Makroporozitás1	-0,0834	0,4717	-0,18	0,871
Átlag makropórus méret	-0,000386	0,002065	-0,19	0,864
homok	-0,000379	0,004443	-0,09	0,937

S = 0,0282471 R-Sq = 10,9% R-Sq(adj) = 0,0%

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	3	0,0002942	0,0000981	0,12	0,941
Residual Error	3	0,0023937	0,0007979		
Total	6	0,0026879			

Source	DF	Seq SS
Makroporozitás1	1	0,0002471
Átlag makropórus méret	1	0,0000413
homok	1	0,0000058

22. MELLÉKLET: A CH₄-ra Th₃ bemeneti értékekkel kapott legjobb modellkombinációk és a választott többváltozós lineáris regresszió analízise

Best Subsets Regression: CH₄ versus Makroporozit; Átlag makrop; homok

Response is CH₄

Vars	R-Sq	R-Sq(adj)	Mallows Cp	S	Átlag makropórus méret	homok
1	16,6	0,0	70,9	0,064387	X	
1	3,9	0,0	82,2	0,069110		X
2	41,4	12,0	51,0	0,060359	X	X
2	17,0	0,0	72,6	0,071812	X	X
3	96,6	93,2	4,0	0,016745	X	X

Regression Analysis: CH₄ versus Makroporozitás1; Átlag makropórus; homok

The regression equation is

$$\text{CH}_4 = -1,73 + 2,53 \text{ Makroporozitás1} + 0,00857 \text{ Átlag makropórus méret} + 0,0221 \text{ homok}$$

Predictor	Coef	SE Coef	T	P
Constant	-1,7252	0,2041	-8,45	0,003
Makroporozitás1	2,5300	0,2796	9,05	0,003
Átlag makropórus méret	0,008566	0,001224	7,00	0,006
homok	0,022126	0,002634	8,40	0,004

S = 0,0167447 R-Sq = 96,6% R-Sq(adj) = 93,2%

Analysis of Variance

Source	DF	SS	MS	F	P
Regression	3	0,0240091	0,0080030	28,54	0,010
Residual Error	3	0,0008412	0,0002804		
Total	6	0,0248502			

Source	DF	Seq SS
Makroporozitás1	1	0,0041217
Átlag makropórus méret	1	0,0001007
homok	1	0,0197867