SZENT ISTVÁN EGYETEM



DOKTORI (PhD) ÉRTEKEZÉS TÉZISEI

Gázdiffúzió 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 Istvan 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 Környezetipari Rendszerek Intézet Fizika és Folyamatirányítási Tanszék
Az iskolavezető jóváhagyása	

A témavezetők jóváhagyása



A MUNKA ELŐZMÉNYEI, A KITŰZÖTT CÉLOK

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.

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), 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, sterilezése, 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 komputer tomográfiás vizsgálat (továbbiakban: CT) segítségével nagyfelbontású vékonyréteg felvételek készültek a talajszerkezetről.

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

- A komputer tomográfiás 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 célomnak. 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 (Avizo Fire, evaluation version 7.0.0., VSG-Visualization Sciences Group, SAS) 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 pórustér vázszerkezetének előállítása. A kutatás jelentőségét az adta, hogy a legtöbb talajdiffúziós kísérletben 200 cm³, 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 áramlástani hatására, vagyis a diffúziós kísérleti eredményekből származtatott relatív gázdiffúziós együtthatók kapcsolatelemzése 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 tomográfiás kutatások súlypontja jelentősen eltolódott a hidraulikus vezetőképesség vizsgálatok irányába.

 A talajok relatív gázdiffúziós 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 gázdiffúziójával. Továbbá ehhez kapcsolva feladatul tűztem ki a széles körben elterjedt, diffúziót becslő modellek tesztelését a három különböző szegmentálási technikából származó bemeneti adatokkal.

ANYAG ÉS MÓDSZER

Talajmintavétel:

A kutatási célomnak megfelelően összesen 8 darab, 350 mm magas és 180 mm átmérőjű, intakt talajoszlopot mintavételeztem egyedi mintatartó hengerek (DIN EN ISO 15493) segítségével. A szabványtól eltérő mintavételi tervezés biztosította a rendszer más kísérleti rendszerrel való kompatibilitását (MSO, multi-step-outflow (Weller et al., 2011); talaj konvekció (Nagy et al., 2011). A mintavételezésnél elsődleges szempont volt az eredeti szerkezet megőrzése.

A kísérleti minták közvetlen környezetéből további, 350 mm magas és 100 mm átmérőjű talajmintákat vettem a kiegészítő vizsgálatok elvégzéséhez.

A mintavételi adatokat (mintavétel helye, mélysége) illetve a minták bemutatását (fizikai talajféleség, talaj térfogattömeg és sűrűség, szervesanyag tartalom, szemcseméret eloszlás) a 1. táblázat 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.

Talajelőkészítés:

-Talajsterilezés:

30 kGy erősségű gamma sugaras sterilezését (Izotóp Intézet Kft.) a mikrobiális gáztermelés, illetve a mintavétel utáni növényi és állati eredetű talajszerkezet módosulás elkerülésére.

-A talajvíztartalom beállítás:

Első lépésben a minták a kíméletes telítését a maximális vízkapacitás eléréséig a közlekedő edények elve alapján értem el fokozatos vízszint-emeléssel. A kapilláris telítés után a víztartalmat saját készítésű, sterilezett, 2500 mm magas és 400 mm átmérőjű oszlop segítségével állítottam be -200 cm mátrixpotenciálon (-19,6 kPa nyomás potenciál).

Kiegészítő vizsgálatok:

-Talaj térfogattömeg meghatározása:

Blake és Hartke (1986) leírása alapján.

-Szerves anyag tartalom és szemcseméret eloszlás meghatározása:

Schumacher (2002) leírása alapján hidrogén peroxidos roncsolás segítségével történt a szervesanyag-tartalom meghatározás és a szemcseméret eloszlást SEDIMAT 4-12 (Umwelt-Geräte-Technik GmbH, Müncheberg, Németország) eszközzel határoztam meg DIN ISO 11277 szabvány

Minta	Kisminta	Mintavéte	Mintavételi	Fizikai	Talaj	Talaj	Sze rve sa.		S	zemcsei	néret e	loszlás	(%)		
ID	ID	helye	mélység	t. féleség	térfogat	sűrűsége	[*] tartalom	Α	F. V.	к. v.	D. V.	F. H.	к. н.	D. H.	Hiba (%)
			(mm)		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 Du-d		0-50		1,49	2,40	3.6	25.94	6.71	9,85 6.91	22,20	20,55	12.29	1.03	2.04
					_,	_,	-,-		-,	-,	,	,= _	,	_,	_,
EL-T		N 47° 31' E 19° 22'	0-350	lsza pos válvog											
	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	lszapos agvagos											
	Id-a		250-350	vályog	1,54	2,52	4,5	25,67	5,53	20,55	42,61	2,75	0,88	0,33	1,67
	ld-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
	ld-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
	ld-d		0-50		1,48	2,42	6	28,76	2,51	4,92	48,46	9,48	2,31	0,66	2,90
кі-т		N 51° 31' F 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
ко-т		N 51° 32' E 11° 48'	0-350	Homoko: vályog	5										
	Ко-а		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
	Ко-с		50-150		1,35	1,19	6,4	27,82	3,42	2,38	5,36	16,32	37,93	2,76	4,02
	ко-а		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 10-60		1,60	2,35	3,3	21,46	3,56	27,78	21,59	12,41	8,99	1,82	2,39
MOT	21-0	N 47° 27'	0-250	Homoko	1,50	2,45	5,8	33,73	10,17	10,91	3,70	23,19	0,11	2,51	3,21
10-1	Maa	E 19° 21'	0-350	vályog	1 40	2 50	n n	10.00	1 5 3	7 22	11 01	72 62	20.00	0.05	2 7 9
	Mo-b		250-550		1.45	2,59	∠,⊃ 1.8	12.01	0.60	3.98	7.50	27.10	∠o,98 45.38	1.45	2,70 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= agy V= válv H= hor F= fino K= köz D= dur	ag yog mok ym epes tva														

1.táblázat: Mintavételi adatok és a talajok kiegészítő vizsgálatainak eredményei:

A diffúziós kísérlet:

-A talajminták előkészítése a diffúziós kísérlethez:

* piknométeres meghatározás alapján

A mintákat szilikon tömítő anyag (Ceresit Sanitär Silikon) segítségével egy egy műanyag alapra gáztömören rögzítettem. Ezek után a mintavételi henger kialakításának megfelelően, 80, 160, 240, és 300 mm magasan, illetve a minta tetején 120 fokos eltolással 4x5 mintavételi helyet készítettem alul vágott üvegből (WIC 43220, WICOM, Németország).



1.ábra: Talajminta előkészítés

A talajminta kísérlet előtti felépítését a 1. ábra mutatja, ahol a mintavételi portok jelölése is: 120 fokos eltolással X, Y, Z irányban 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 használt gáztartály (DIN ISO 6141, Linde) tartalmát a 2. táblázat mutatja (273,15 K; 101325 Pa).

NÉV	ELŐÍRT ÉRTÉK	TÉNYLEGES ÉRTÉK	MÉRÉSI BIZONYTALANSÁG,
INE V	$(cm^3 m^{-3})$	$(cm^3 m^{-3})$	REL. (%)
CH_4	0,35	0,36	± 10
N ₂ O	18,0	17,0	± 2
CO ₂	4,50	4,511	±2
Не	maradék	maradék	

2. táblázat: A standard gáztartály tartalma

A kísérlet gázellátását 10000 cm3 standard gáz per napban határoztam meg, digitális áramlásmérő és a palackra szerelt reduktor segítségével állítottam be. Minden talaj vizsgálati időszaka tíz napig tartott, amelyben az első két napon 4 óránként, majd a hátralévő hat napon 6 órás időközönként vettem 2 cm³ mintát gáztömör fecskendővel (SGE 10 cm³ Gas Tight and Dispenser Syringe) minden mintavételi helyről. A peremfeltételek meghatározásához körülbelül 400 mm-es magasságban a talajminta feletti légtérből (kiértékelésben "AIR") is mintavételeztem, illetve a vízelvezető csövön, kb. 400 mm-es távolságban az alapzati csatlakozó csavartól is, amely a talajalatti légteret reprezentálja (kiértékelésben "PIPE").

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

A gázdiffúziós kísérlet adatfeldolgozása:

A diffúziós kísérlet során a következő közelítéseket alkalmaztam: a makroszkopikus diffúzió egy dimenziós, amely párhuzamos a talaj főtengelyével; a kísérlet során az advekciót és konvekciót elhanyagoltam a fennálló kísérleti körülmények miatt (hőmérséklet állandó volt és a talajoszlopba kerülő gáz nyomása megegyezett a légköri nyomással), és a domináns gázdiffúziót tettem felelőssé a gázok transzport folyamatáért; továbbá adszorpciós és deszorpciós folyamatok is elhanyagolhatóak (Liu et al. 2006).

A kiértékelésnél Fick második törvényét alkalmaztam (1. egyenlet):

$$j = -D_g \nabla C , \qquad (1)$$

amelyben *j* (kg m⁻² s⁻¹) 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. Az első egyenlet kombinálása a tömegmegmaradás törvényéből származó egyenlettel:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla j = 0 \tag{2}$$

a következő parabolikus típusú parciális egyenletet eredményezi:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_g \nabla^2 C \tag{3}$$

a diffúziós együtthatót állandónak vettem D_g .

-Adatok előkészítése a 3. egyenlet szerinti numerikus modellközelítéséhez Matlab szoftverrel (Version 7.12.0.635 (R2011a), MathWorks Inc.):

- X, Y, Z irányokban mért koncentráció adatokat átlagoltam minden szintre (A, B, C, D, E), kivéve "AIR" és "PIPE" (peremfeltételek) mintavételi pontokét.
- Új mérési háló készítése (mivel a mérések nem egyenlő léptékűek térben és időben, a kezdetben alkalmazott matematikai modell ezt megkövetelte) lineáris interpoláció alkalmazásával (idő: 2 órás felosztásban 0 284 órás intervallumban, tér: 10 mm-es beosztással -350 mm-től 0 mm-ig). Tehát a diszkretizációs rács 5148 rácspontból áll, amelynek 143 rácspontja időben és 36 pontja térben (4. egyenlet). A számolás fejlesztése során a később alkalmazott modellnél erre már ténylegesen nem volt szükség, ennek ellenére megőriztem a korábban előkészített adatokat.

$$\left(\frac{284}{2}+1\right)\left(\frac{350}{2}+1\right) = 5148$$
(4)

-Megoldás és hibaszámítás:

- 3. egyenlet megoldása Matlab (pdepe) parciálisdifferenciálegyenlet-megoldó függvény alkalmazásával.
- Az egyenlet megoldása után lehetőség nyílt a mért és a modell által számolt különbséghez kapcsolható hibák meghatározására. A hibanégyzetek összege (Error Sum of Squares):

$$SSE = \sum_{i=1}^{n} (C_n - C_{Mn})^2,$$
(5)

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 optimumkeresési feladat, ahol D_g értékével való iteráció segítségével definiálható az a pont, amikor a hibanégyzetek összege eléri minimumát (Matlab ("fminsearch"; MathWork-ref2) direkt szimplex kereső algoritmus alkalmazása).

• A modelillesztés hiba mérőszámaként a következő kifejezést használtam:

$$Err_{A} = \sum_{i=1}^{n} \frac{|C_{n} - C_{Mn}|}{|C_{n}|} 100$$
(6)

A komputer tomográfiás mérés:

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

Az első esetben a talajminták víztartalma megegyezett a diffúziós kísérlet kezdeti értékével. A második alkalommal a minták hosszú száradási idő után kerültek felvételezésre (amikor már feltételezhető, hogy az effektív porozitás egyenlő a teljes porozitással).

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). A nyers adatok rekonstrukciója Somatom Syngo CT 2007S programmal készült. A felvételezés kimeneti adatbázisa minden mintára körülbelül 300 darab 16 bites, 512 x 512 pixeles dicom formátumú file sorozat, amelyek alapján a talajmátrix háromdimenziós rekonstrukciója 0,390625 x 0,390625 x 1.2 mm3 (voxel méret) felbontással lehetővé vált. Az egyes képpontok intenzitásása úgynevezett Hounsfield egységben (HU, Hounsfield Unit) kódolt, amely leírja a röntgensugár minden egyes térfogatelemre (voxelre) vetített gyengülését a vizsgált anyagmátrixban.

A komputer tomográfiás mérés képadatainak feldolgozása:

A talajmintát leképező voxel mátrix belsejében azokat a pórushálózatokat azonosítottam, amelyekről nagy bizonyossággal elmondható, hogy átjárható utat biztosítottak a diffundáló gázok számára. Ennek lépései:

-Képmódosítás:

A vizsgálni kívánt terület azonosítása (ROI- region of interest) után a dicom fájlok módosítása történt meg (a vizsgálati területen kívül eső voxelek értékét extrém magas HU értékre cseréltem, ezáltal a későbbi szegmentációs eljárás során ezek a voxelek automatikusan kikerültek a kiértékelésből).

-Küszöbérték meghatározás:

A küszöbérték meghatározásához minden minta egyedi hisztogramját (voxelek mennyisége az

intenzitás függvényében) vettem alapul, amelynek képét a 2. ábra mutatja. Az alacsony HU értékekkel rendelkező első csúcs a talajminta levegővel töltött voxeleit reprezentálja, míg a következő csúcs a talajjal, vízzel és szerves anyaggal töltött térfogathoz kapcsolható.



2.ábra: EL-T talaj hisztogram részlete, ahol a voxelek mennyiségi eloszlása a HU értékük függvényében van feltűntetve. (Avizo Fire, evaluation version 7.0.)

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 gyakran választott küszöbérték geológiai és talajtani kutatások esetén (Tarquis et al. 2008). A Th₁ értéke EL-T mintánál 2. ábrán látható.

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

kétharmadszorosához eső HU értéket választottam.

-Izotróp voxelek előállítása (Avizo Fire, evaluation version 7.0.0., VSG-Visualization Sciences Group, SAS):

A kezdeti anizotróp voxelek (0,390625 x 0,390625 x 1,2 mm³) átalakítása izotróp voxelekké (0,45 x



3. ábra: EL-T minta binarizációja Th₁-nél alacsonyabb küszöbérték mellett (-700 HU) és a binarizáció alapján felállított pórustér mátrix háromdimenziós megjelenítése

0,45 x 0,45 mm³) a morfológiai számítások komplexitását csökkenti. A transzformációt Lanczos szűrő alkalmazásával végeztem el (Meijering et al., 1999; Luo et al., 2010).

-Zajszűrés:

A zajszűrés során a median szűrőt alkalmaztam, amely kimondottan alkalmas impulzív zajok szűrésére

-Szegmentáció:

A már korábban definiált küszöbértéket megadva (Th₁; Th₂;

Th₃) 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" komputer tomográftalajtérfogatokat 0-val kódoltam. A folyamat eredménye a 3. ábra bal oldalán látható, ahol kék szín 1-es kódolású a fekete szín pedig 0.

-Jelölő algoritmus:

A programba épített jelölő algoritmussal (labelling) újra kódoltam a háromdimenziós térben egymással nem kapcsolódó voxelek, voxel csoportok binarizált értékét. 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, áltagos pórus hosszt.

-Vázszerkezet-előállítás:

A talajváz-szerkezet Sato et al. (2000) algoritmusa szerinti (''centerlinetree'') előállításának eredményét a 4. ábra mutatja be. A vázszerkezet-előállítás (szkeletonizáció) egy olyan bináris morfológiai eljárás, amely rekurzív eróziót tartalmazó algoritmusra épül. A bináris erózió



4. ábra: EL-T minta pórusterének vázszerkezete

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.

Minden olyan voxel elágazási pontnak számít (piros jelölés), amelynek értelemszerűen kettőnél több 1 értékű szomszédja van. A talajváz-szerkezet igen időigényes generálását a küszöbérték emelésével növekvő morfológiai komplexitások miatt egyelőre csak a két alacsonyabbik küszöbérték mellett tudtam kivitelezni.

A talaj vázszerkezetének előállítása olyan kiemelten fontos talajt jellemző morfológiai paraméterek meghatározását teszi lehetővé, mint például az átlagos pórushossz, ami a talaj labirintusfaktorával van kapcsolatban, vagy a pórustérben megjelenő elágazások mennyisége, amely a pórustér kapcsoltságát jellemzi, lehetőséget adva ezzel, például későbbi modellezési munkák során a holt pórusterek kivonását a kiértékelésből.

EREDMÉNYEK ÉS ÉRTÉKELÉSÜK

A talaj makropórus rendszerének analízise

A makropórus hálózat háromdimenziós vizuális bemutatása jól visszatükrözi a különböző szemcseméret-eloszlással rendelkező talajok szerkezeti különbségeit (5. 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 földigiliszta-félék (*Lumbricidae*) által létrehozott makropórusokterek. Míg azok a nagyfolytonossággal rendelkező hengeres pórusok, melyek átmérője a mélységgel csökken, a növénygyökérzet 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).

	Minta	Küszöb	Detektált	Makropor ₁	Makropor ₂	Átl. méret	Felület	Hál. sűrűség.	POM	α	Elágazások	Hosszsűrűség	τ
	ID	(HU)	voxelcsop.	(m³ m⁻³)	(m ³ m ⁻³)	(mm³)	(mm²)	(x10 ⁶ number m ⁻³)	(100%)		(m ³ m ⁻³)	(km m ⁻³)	
_	DU-T	-644	8212	0,110	0,024	13,517	199410,7	1,780	45,8	0,587	376133,673	6,342	0,727
	EL-T	-494	5091	0,096	0,035	31,487	189297,4	1,100	76,6	0,565	290451,550	4,887	1,187
Т	ID-T	-524	6297	0,064	0,015	10,076	129774,3	1,360	40,9	0,542	199780,342	4,394	0,860
н	KI-T	-544	6571	0,111	0,021	15,022	188672,5	1,380	72,5	0,679	677864,895	6,185	2,686
1	КО-Т	-794	5661	0,081	0,018	14,255	139363,6	1,220	71,2	0,666	362467,917	3,987	1,184
	LA-T	-584	9920	0,098	0,048	22,442	346937,6	2,150	70,7	0,577	941201,849	10,684	1,456
	LI-T	-664	6709	0,094	0,028	19,300	187456,4	1,450	75,6	0,626	460731,212	5,256	1,923
	MO-T	-544	3223	0,061	0,017	24,319	75333,0	0,690	79,1	0,563	74619,368	2,071	0,843
	SD	97.980											
	CV%	23,488											
	DU-T	-14	30771	0,181	0,089	13,374	809605,9	6,670	82,4	0,666	2464391,383	23,774	12,172
	EL-T	61	8916	0,197	0,070	24,915	413235,3	2,820	84,3	0,600	850964,475	10,856	4,109
Т	ID-T	46	13003	0,111	0,022	11,184	188486,8	1,930	43,9	0,559	606065,445	10,832	1,178
н	KI-T	136	12342	0,129	0,069	25,911	552986,0	2,670	89,3	0,667	1842491,014	14,186	10,019
2	ко-т	-309	20513	0,141	0,078	17,638	614459,0	4,440	86,6	0,666	1934680,640	16,752	6,487
	LA-T	1	16275	0,209	0,122	34,558	908260,6	3,530	93,0	0,644	3088460,920	23,494	81,683
	LI-T	36	16637	0,228	0,083	22,924	612609,1	3,600	84,3	0,617	1769390,064	15,777	4,311
	MO-T	-4	10956	0,078	0,031	12,942	200521,1	2,370	67,7	0,577	267892,207	6,137	1,156
	SD CV%	131,501 12,916											
	DU-T	96	35552	0,327	0,117	30,293	1064785,7	7,712	86,6	0,677	N/A	N/A	N/A
T	EL-I	289	16421	0,251	0,097	54,629	620225,7	3,562	87,2	0,633	N/A	N/A	N/A
1	10-1	309	20108	0,151	0,061	10,736	564330,6	5,676	62,1	0,606	N/A	N/A	N/A
н 2	KI-1	429	15118	0,143	0,108	32,966	803685,1	3,279	92,2	0,699	N/A	N/A	N/A
3	KU-1	-151	20563	0,142	0,079	17,647	616122,8	4,460	86,7	0,666	N/A	N/A	N/A
	LA-I	236	16276	0,315	0,122	34,558	908261,0	3,531	93,0	0,644	N/A	N/A	N/A
	LI-1	309	20187	0,332	0,174	39,723	11/5427,1	4,379	94,4	0,679	N/A	N/A	N/A
	IVIO-1	269	19819	0,106	0,051	11,884	402770,0	4,299	73,0	0,624	N/A	N/A	N/A
	SD	177,261											
	CV%	14,209											

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

N/A: nem elérhető adat

-Küszöbérték és a detektált voxelcsoportok:

A 3. táblázatban látható, hogyan változik a detektált makropórusok száma és ezzel a pórustér térfogat az eltérő küszöbérték definiálás függvényében. Ha a legalacsonyabb küszöbérték esetén detektált pórusszámot és mennyiséget vesszük alapul, akkor Th₂ 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. Szükségesnek tartom kihangsúlyozni, hogy komputer tomográfiás 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.

-Makroporozitás₁:

A 3. táblázat Makropor₁-ként jelölt értéke, a hosszú száradási idő után készült második CT mérésből számolt porozitást jelenti $m_{talajlevegő}^3 m_{talaj}^3$ -ban, ahol a talaj állapotára vonatkozó hipotézis értelmében a talaj effektív makroporozitása egyenlő a teljes makroporozitással, mivel feltételezhetően a talaj kétfázisú állapotban van. Hangsúlyozni kell, hogy a CT felvételezési felbontása (0,39 x 0,39 x 1,2 mm³) eleve nem ad lehetőséget mikroporozitás vizsgálatára, ezért kizárólagosan csak makroporozitásról beszélhetek.

-Makroporozitás₂:

A 3. táblázatban Makropor₂-ként jelölt adatsor, azokat a porozitásértékeket mutatja be $m_{talajleveg\delta}^{3}$ m³talaj-ban, amelyek a gázdiffúziós 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.

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.

-Átlagos makropórus méret:

A pórusok összméretének számtani átlaga mm³-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 gyökérzet, vagy állati eredetű járatok.

-Teljes makropórus-felület:

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

-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 lineáris regresszió áll fenn.

-Az 1000 mm³ –nél nagyobb pórusok százalékos aránya a teljes porozitásban, POM (100%):

A POM (100%) Luo és munkatársai (2010) által javasolt mutató, amely az 1000 mm³-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.

-α:

A 3. táblázatban található alfa (α), egy általam 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 közöl a Pareto eloszlás (Grimshaw 1993) illeszkedett a legjobban. Ezt példázza



6. ábra: Egy 13347 voxelcsoportból álló minta hisztogramjának releváns része. Az illesztett függvény típusától függően: PDFsűrűségfüggvény (probability density function)/PMFvalószínűségi eloszlás (probability mass function)

a 6. ábra, amelyben csak pár illesztés képe látható. A Pareto eloszlás maximum likelihood függvénye (legnagyobb valószínűség elve) (Grimshaw 1993):

$$L(\alpha, x_m) = \prod_{i=1}^n \alpha \frac{x_m^{\alpha}}{x_i^{\alpha+1}} = \alpha^n x_m^{n\alpha} \prod_{i=1}^n \frac{1}{x_i^{\alpha+1}} (7)$$

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

ahol x_i a *i*. pórus méretét jelenti, ezért x_m

$$x_m = \min_i x_i \tag{8}$$

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:

$$\alpha = \frac{n_p}{\sum_{i=1}^{n} (\ln x_i - \ln x_m)},$$
(9)

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.

-Hosszsűrűség:

Ez az adat a talajvázból számolt maximális makropórus hosszúságok egy m³ talajra átszámolt értékét mutatja be km-ben. Talajonként a két küszöbérték közötti eltérés átlagosan 9,75 km m⁻³.

-Elágazások sűrűsége:

Az elágazások, vagy kapcsolódási pontok sűrűsége az egy m³-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.

-Tekervényesség (tortuozitás), τ:

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.

A diffúziós kísérlet eredménye:

A talajokhoz kapcsolható D_g érték meghatározásának eredménye:

A 3. egyenletnél taglaltak értemében D_g értékével való iteráció segítségével lehetővé vált annak a pontnak a definiálása, ahol a hibanégyzetek összege eléri minimumát (a kiértékelés mindent átfogó, részletes eredménysorozatát egy több száz oldalas mérési jegyzőkönyv tartalmazza). Ennek eredményeként minden talajmintára megkaptam az adott gázhoz tartozó diffúziós együttható értékét (D_g) , amely például MO-T mintára 9 x 10⁻⁷ m² s⁻¹. Az egyes talajokra kapott gázdiffúziós 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) CO₂-re szabad levegőn 1,39 x 10⁻⁵ m² s⁻¹ (Gaudinski et al. 2000), N₂O-ra 1,43 x 10⁻⁵ m² s⁻¹ (Pritchard and Currie 1982), CH₄-ra (Khvorostyanov et al. 2008, von Fischer et al. 2009) A kiértékelés összefoglalását az 4. 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.

Minta	CO ₂		N ₂ O		CH ₄			
ID	$\mathbf{D}_{\mathbf{g}}$	D_g/D_0	$\mathbf{D}_{\mathbf{g}}$	D_g/D_0	$\mathbf{D}_{\mathbf{g}}$	D_g/D_0		
DU-T	1,4 x10 ⁻⁰⁷	0,0101	2 x10 ⁻⁰⁷	0,0140	2,7 x10 ⁻⁰⁷	0,015864		
EL-T	6 x10 ⁻⁰⁸	0,0043	4 x10 ⁻⁰⁷	0,0280	3,1 x10 ⁻⁰⁷	0,018214		
ID-T	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A		
KI-T	9 x10 ⁻⁰⁸	0,0065	6 x10 ⁻⁰⁸	0,0042	4 x10 ⁻⁰⁹	0,000235		
КО-Т	1,1 x10 ⁻⁰⁸	0,0008	1,5 x10 ⁻⁰⁸	0,0010	7 x10 ⁻⁰⁷	0,041128		
LA-T	5 x10 ⁻⁰⁷	0,0360	3 x10 ⁻⁰⁷	0,0210	8 x10 ⁻⁰⁸	0,0047		
LI-T	4 x10 ⁻⁰⁸	0,0029	1,2 x10 ⁻⁰⁷	0,0084	3,1 x10 ⁻⁰⁶	0,182139		
МО-Т	2 x10 ⁻⁰⁷	0,0144	9 x10 ⁻⁰⁷	0,0629	2,1 x10 ⁻⁰⁷	0,012338		

4. táblázat: A talajmintáknál mért diffúziós együtthatók (D_g) és a relatív diffúziós együtthatók (D_g/D_0) értéke



 7. ábra: Példa a numerikus modellillesztés eredményére: a széndioxid koncentrációjának változása MO-T talajoszlopnál.
 A mintához tartozó diffúziós együttható D_g= 2 x 10 ⁻⁰⁷ m² s⁻¹ (Err_A= 1,67%).

A gázdiffúzió kapcsolata a talaj paramétereivel:

A dolgozatnak ebben a fejezetében a gázdiffúziós 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 tomográfiás 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.

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 ismérvtől függő változóra gyakorolt hatását lehet megfigyelni. A többváltozós modell felírása mátrixok segítségével történt (*Y* függő változó, azaz a relatív diffúziós tényezők; X független változó, azaz talajtulajdonságok). A regressziós egyenlet paramétereit a többváltozós modell esetében is a legkisebb négyzetek módszerével lehet meghatározni.

A standard lineáris modell feltételrendszeréhez nem tartozik hozzá, de a modell fontos tulajdonsága kell legyen a független változók egymástól való lineáris függetlensége (ezért fontos először a talajtulajdonságok közötti kapcsolatok feltárása). Amennyiben ez nem teljesül, multikollinearitás lép fel. Ezért például nem tesztelhetem a független tényezők közül egy modell rendszerben Th₁ 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.

Az analízis eredményét összefoglalva elmondható, hogy a diffúziós tényezők becslése 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 mutatott.

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).

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.

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 5. táblázat tartalmazza:

5. táblázat: A klasszikus relatív diffúziós együtthatót becslő modellek gyűjteménye, ahol $\theta_{leveg\delta}$ az efektív porozitást, ϕ pedig

Szerzők:	Jelölés:	Modell:
Buckingham 1904	Buckingham	$\frac{D_g}{D_o} = \left(\theta_{leveg\tilde{o}}\right)^2$
Penman 1940	Penman	$\frac{D_g}{D_o} = 0,66\theta_{levego}$
Van Bavel 1952	Van Bavel	$\frac{D_g}{D_o} = 0,61\theta_{leveg\tilde{o}}$
Marshall 1958	Marshall	$\frac{D_g}{D_o} = \left(\theta_{levego}\right)^{\frac{3}{2}}$
Grable és Siemer 1968	GS	$\frac{D_g}{D_o} = 10^{-6} \theta_{leveg\delta}^{3,36}$
Lai et al. 1976	Lai	$\frac{D_g}{D_o} = \theta_{leveg\bar{o}}^{\frac{5}{3}}$
Xu et al. 1992	Xu	$\frac{D_g}{D_o} = \frac{(\theta_{leveg\bar{o}})^{2,51}}{\phi^2}$
Millington és Quirk 1960	MQ ₁	$\frac{D_g}{D_o} = \frac{(\theta_{leveg\bar{o}})^2}{\phi^{\frac{2}{3}}}$
Millington és Quirk 1961	MQ_2	$\frac{D_g}{D_o} = \frac{\left(\theta_{leveg\hat{o}}\right)^{\frac{10}{3}}}{\phi^2}$
Moldrup et al. 1997	PQM	$\frac{D_g}{D_0} = 0,66\phi \left(\frac{\theta_{leveg\delta}}{\phi}\right)^{\frac{12-d}{3}}$
Moldrup et al. 2005	Moldrup	$\frac{D_g}{D_0} = \phi^2 \left(\frac{\theta_{leveg\delta}}{\phi}\right)^{(2+\frac{\log(\theta_{leveg\delta})0\frac{1}{4}}{\log(\frac{\theta_{leveg\delta})0}{\phi})}}$

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.

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}d_i^2}$$
(10)

$$bias = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} d_i \tag{11}$$

ahol d_i a modell által becsült és a mért érték differenciája és n a mérések számát jelöli. A modellek által adott relatív diffúziós együttható értékeket és a három gázra számolt *RMSE* és *bias* értékeket a 6. táblázat tartalmazza.

6. 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 _{N20}	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
		Buckingham	Penman	Van Bavel	Marshall	GS	Lai	XU	MQ ₁	MQ ₂	PMQ	Moldrup
Th ₂	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 _{N20}	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
		Buckingham	Penman	Van Bavel	Marshall	GS	Lai	XU	MQ ₁	MQ ₂	PMQ	Moldrup
Th ₃	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 _{N20}	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

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 középértékek átlagaként kapott küszöbérték alapján történt leválasztás adott pontosabb bemeneti adatokat. Ennek teljesen ellent mond a metán diffúziójára adott globális modellbecslések minősége, ahol Th₃ mellett számolt porozitásértékek teljesítettek jobban, azaz kumulált *RMSE*-ra vetítve átlagosan egy tizeddel esnek közelebb a becsült értékek Th₁-het képest. Itt is fontos kihangsúlyozni, hogy ez az értékelés csak a jelen munkára vonatkozik, mivel a megalapozott véleménynyilvánításhoz, azaz ahhoz, hogy biztosabban lehessen a modellek által adott becslést értékelni lényegesen több megfigyelésre van szükség.

-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 jól teljesített a többi modellhez képest az *RMSE* értékek alapján. Mint az a névéből is látszik, 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, ellent mond a logikusan elvárható

eredményeknek. Mivel, ha feltételezem, hogy egy újrarakott talajmintában megszűnik a természetes makropórus vázrendszer, akkor a maradék pórusteret elsősorban szitált talajszemcsék közötti rész fogja alkotni, amelynek lényegesen tekervényesebbnek kell lennie, mint az eredeti szerkezet. Ezért ehhez 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 (9. egyenlet) alapján számolt és bemutatott α paraméterre.

-A javaslat eredménye és értékelése:

Ezzel a módszerrel látható, hogy megszűnt 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 7. táblázat tartalmazza.

7. táblázat: A javasolt modell becslésének minősítése

Th ₁	RMSE _{CO2}	0,0129	Th ₂	RMSE _{CO2}	0,0088	Th ₃	RMSE _{CO2}	0,0211
	bias _{CO2}	-0,0088		bias _{CO2}	0,0015		bias _{CO2}	0,0079
	RMSE _{N20}	0,0266		RMSE _{N20}	0,0253		RMSE _{N20}	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

Részletes értékelésként elmondható, hogy 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 a harmadik legjobba becslést adó modell lesz, amelynél DU-T (d= 0,0006) és LI-T (d= -0,0016) mintákra adta a legjobb közelítést. Th₃-nál romlik a becslés minősége, amely elsősorban MO-T (d= -0,0555) és KI-T (d= 0,0391) minták adataira vezethetők vissza. Ezenkívül még másik három minta becslése is pontatlan.

A metán esetére számolt hibaértékek alapján elmondható, hogy a küszöbérték emelésével csökken a

becslés pontatlansága. Th₁ esetén 0,00667 a legjobb és a javasolt modell közötti hibaértékek különbség, mivel a metán esetében 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 Th₂-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. Ez Th₃ 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.

Összesítve a három gázra kapott *RMSE* értékeket a különböző küszöbértékek mellett, a javasolt modell Th₂ 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.

8. táblázat: A Th₂ küszöbérték mellett a három vizsgált gázra összesített RMSE érték

NÉV	Buck.	Penm.	Van	Marsh.	GS	Lai	XU	MQ ₁	MQ ₂	PMQ	Moldr.	Javasolt
			B.									
$RMSE_{\Sigma}$	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

ÚJ EREDMÉNYEK

A talajokban történő gázdiffúzió 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 gázdiffúziójának nyomonkövetésére. A kísérleti felépítés és a korszerű komputer tomográfiás 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 tomográfiás adatok feldolgozásánál a szegmentációs küszöbérték megválasztása kulcsfontosságú. Az erre vonatkozó vizsgálataim alapján a többváltozós lineáris regresszió-analízis eredményeként megállapítottam, hogy a relatív gázdiffúziós együtthatók becslése legjobban Th₂ 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 becslő modellek hibamutatóját küszöbértékenként összegezve, az volt megállapítható, hogy legpontosabb becsléseket Th₁, majd Th₂ küszöbérték mellett kaptam. Ebből arra a következtetésre jutottam, hogy a jelen kísérleti munka szempontjából a helyes szegmentációs küszöbérték Th₁ és Th₂ 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 becslő modellek fejlesztéséhez ennek a változónak a bevonását javaslom, a már meglevő általános makroporozitás₁ és tekervényesség paraméterek mellé, amelyeknek szignifikáns hatása szintén megerősítést nyert az analízis során.
- Az általam tesztelt relatív diffúziós együtthatót becslő modellek közül a PQM modell (Moldrup et al. 1997) kétféle módosítását javasoltam: amely egyrészről a Penman modellből származó állandó (0,66) az általam javasolt α paraméterre történő cseréjéből áll, amivel megszűntethető 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 modellével, megállapítottam, hogy a minden küszöbértéken vett három gázhoz tartozó kilenc megfigyelésből hét alkalommal adott

pontosabb becslést. Emellett a javasolt modell Th₂ 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 közöltünk le.
- Végül kiemelkedő eredménynek tartom a munka gyakorlati alkalmazhatóságát, amelynek jelenleg komoly elméleti és gyakorlati vonatkozásai vannak kilátásban:
 - lehetőség nyílik Mészáros et al. (2011) munkájában javasolt Riccati-féle közönséges differenciálegyenlet újszerű alkalmazásának kísérleti tesztelésére.
 - a munka alapján felállítható kísérleti rendszerrel a teljes talajgenetikai spektrumot lefedő, vagy akár fizikai féleség szerint csoportosított adatbázis hozható létre.

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 tomográfiás 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-képalkotással (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 tomográfiás 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 (Kirschner 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–Bènard-féle áramlási kép (Gyarmati 2005, Mészáros et al. 2007). Közvetlenül a talaj-atmoszféra határfelület felett kialakuló konvekciós hőáramok jól megfigyelhetők infrakamera segítségével (Vitál et al. 2007, Nagy et al. 2011).

Ehhez kapcsolódóan korábbi kutatásaink eredményeként kidolgoztunk egy elméleti modellt (Gyarmati 2005, Mészáros et al. 2007, Kirschner et al. 2007) konvektív instabilitások (Gyarmati et al. 2007) és transzport leírására hengeres rendszerekben, amelyben az Ostroumov probléma (Osrtoumov 1958) alapján került a sebességfüggvény felírásra. A sebesség sugárirányú függését leíró negyedrendű közönséges differenciálegyenletet szimbolikus számításra is képes matematikai programcsomag segítségével oldottuk meg, amelynek eredményeként kapott sebességfüggvény jó egyezést mutat korábbi szimulációs eredményekkel (Kirschner 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, Hárshegyi et al. 2008). Emellett még - lehetőség esetén - talajok mesterséges nehézfém szennyezése során a mobilizáció összefüggéseinek vizsgálatát a talajszerkezet függvényében növényi borítottság nélkül és esetén (Bálint et al. 2007, Gyarmati et al. 2008, Bernvalner et al. 2011).

Irodalomjegyzék:

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.

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.

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

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. 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

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

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.

GRIMSHAW, S.D. (1993): Computing maximum likelihood estimates for generalized Pareto distribution. *Technometrics*, 35, 185-191. 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. HOUNSFIELD, G. N. (1973): Computerized transverse axial scanning (tomography): Description of system. *British Journal of Radiology*, 46 (552) 1016-1022. p.

KAMPICHLER, C., HAUSER, M. (1993): Roughness of soil pore surface and its effect on available habitat space of microarthropods, Geoderma, 56, 223-232. p.

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. 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.

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.

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.

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. MARSHALL, T. J. (1958): A relation between permeability and size distribution of pores. *Journal of Soil Science*, 9, 1-8. p.

MathWorks-ref1, www.mathworks.com/help/techdoc/ref/pdepe.html

MathWorks-ref2, www.mathworks.com/help/techdoc/ref/fminsearch.html

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., 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., 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., 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. 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.

OSTROUMOV, G. A. (1958): Free convection under the conditions of internal problem. NACA Technical memorandum, 1407 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.

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

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.

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 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

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.

VAN BAVEL, C.H.M. (1952): Gaseous diffusion and porosity in porous media. Soil Science 73, 91-104. 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.

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,

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

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.

AZ ÉRTEKEZÉS TÉMAKÖRÉHEZ KAPCSOLÓDÓ PUBLIKÁCIÓK

Az értekezés témaköréhez kapcsolódó publikációk listája (transzportfolyamatok, diffúzió, konvekció; modellezés, talajvizsgálatok, talajoszlop kísérletek (növény, növény nélkül) üvegházhatású gázok):

Lektorált folyóiratcikk idegen nyelven:

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. (IF: 1,680)

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. (2007), 193-196. p. (IF: 1,190)

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.

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.

BÁLINT, Á., NAGY, N., **GYARMATI**, **B**., MÉSZÁROS, Cs., FARKAS, I., GOTTSCHALK, K. (2013): Study of Drying of Soil Columns by Infrared Radiation, *Drying Technology and Equipment*, 1, 43-51. p. (kínai nyelven, meghívott cikk)

Lektorált folyóiratcikk magyar nyelven:

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.

NAGY, N., **GYARMATI, B**., MÉSZÁROS, CS., GOTTSCHALK, K., BÁLINT, Á. (2011): Konvekció hengeres talaj rendszerekben *GÉP* LXII.: (6.) *36-40*. p.

Konferenciakiadványok idegen nyelven (teljes szövegű közlemény):

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.

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. 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.

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.

BÁLINT, Á., **GYARMATI, B.,** HÁRSHEGYI, Z., HELTAI, G. (2008): Effect of nitrogen fertilizer on grain of winter wheat, *Cereal Research Communications* (Part 3 Suppl. S.), (36) 1687-1690. p.

GYARMATI, **B.**, SZANISZLÓ, A., TÖRŐ, B., BÁLINT, Á. (2010): Application of the garden cress (*Lepidium sativum*) as possible biological indicator of a heavy metal accumulation. *Növénytermelés*, (59) Különszám, 333-336. 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*, Suppl. 2., 223-226. p.

BÁLINT, Á., SPREITZER, H., KAMPFL, GY., CZIKKELY, M., **GYARMATI, B.** (2013): Study of the effect of fertilizer and manure treatment for nitrogen cycle by soil incubation experiment, *Növénytermelés*, Suppl. 301-304. p.

SZANISZLÓ, A., BÁLINT, Á., SZMOLKA, V., **GYARMATI, B.**, KAMPFL, GY. (2013): Examination of biofilm gas emission in food chain reactor system, *Növénytermelés*, Suppl. 397-400. p.

Konferenciakiadványok magyar nyelven (teljes szövegű közlemény):

MÉSZÁROS, CS., BÁLINT, Á., VITÁL, V., **GYARMATI, B**. (2007): Stacionáriusan körüláramlott gömb alakú szilárd test felületi hőmérsékletváltozásai (Surface temperature changes of the spherical solid body surrounded by stationary flow), XXXI. Kutatási és Fejlesztési Tanácskozás (31st Conference on research and development in agricultural engineering) Nr. 31. 2. kötet. Edited: Dr. Tóth László és Dr. Magó László. Felelős kiadó: (Eds.) Dr. Fenyvesi László. Készült: SZIE, Gödöllő, Magyarország, 128-132 p.

KAMPFL, GY., SCHLUETER, S., **GYARMATI, B**., APELT, B., BÁLINT, Á., STANGE, C.F. (2009): Talajszerkezet és üvegházgáz emisszió kapcsolata, Eötvös Ösztöndíjas Konferencia, Budapest, Balassi Intézet, 2009. szeptember 30., Magyar Ösztöndíj Bizottság (ISBN 978-963-88739-0-3). 100-124 p.

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.) A konferencia előadásainak összefoglalói: 52nd Georgikon Scientific Conferenc Abstracts: Keszthely, Pannon Agrártudományi Egyetem Georgikon Mezőgazdaságtudományi Kar, 1-10. p. (ISBN:978-963-9639-38-6, 978-963-9639-39-3)

NAGY, N., **GYARMATI, B.**, MÉSZÁROS, CS., GOTTSCHALK, K., BÁLINT, Á. (2011): Talajoszlopok száradásának vizsgálata infravörös sugárzás hatására In: Víg P (szerk.) 7. Magyar Szárítási Szimpózium Gödöllő, Szent István Egyetem, 1-9 p .(ISBN:978-963-269-211-1)

NAGY, N., **GYARMATI, B.,** MÉSZÁROS, CS., GOTTSCHALK, K., BÁLINT, Á. (2011): Konvekció hengeres talaj rendszerekben, Tehetségnap, SZIE MKK Tudományos Diákköri Rendezvény Szent István University, Faculty of Agriculture and Environmental Sciences, May 25. 2011. Gödöllő, Hungary (ISBN 978-963-269-235-7), 26-29. p.

Konferenciakiadványok (absztrakt):

BÁLINT, Á., **GYARMATI, B.**, GOTTSCHALK, K., MÉSZÁROS, CS. (2005): Convective instabilities in cylindrical systems, 11th Workshop on energy and environment. November 9., 2005, Gödöllő, Hungary MÉSZÁROS, Cs., BÁLINT, Á., GOTTSCHALK, K., **GYARMATI, B.**, FARKAS, I. (2006): Convective flow patterns in vertical cylindrical tubes. In: Farkas I (szerk.), 12th Workshop on Energy and Environment, Gödöllő, Hungary, September 18-19, 2006., 11. p.

GYARMATI, B., BÁLINT, Á., GOTTSCHALK, K., FARKAS, I., MÉSZÁROS, CS. (2007): An analytical solution for convective instability flows in vertical cylindrical tubes. In: 13th Workshop on Energy and Environment, Gödöllő, Hungary, November 5-6, 2007., 19. 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: 14th Workshop on Energy and Environment. Gödöllő, Magyarország, 2008.11.17-2008.11.18., 13. 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: 14th Workshop on Energy and Environment. Gödöllő, Magyarország, 2008.11.17-2008.11.18., 14. p.

GYARMATI, B., BÁLINT, Á., GOTTSCHALK, K., FARKAS, I., MÉSZÁROS, CS. (2007): An analytical solution for convective instability flows in verical cylindrical tubes, Book of abstract, 13th Workshop on Energy and Environment, Gödöllő, Magyarország, 19. p.

MÉSZÁROS, CS., GOTTSCHALK, K., JESZENŐI, G., **GYARMATI, B.**, FÖLDI, A., BÁLINT, Á. (2008): Transient character of transport processes in binary mixtures. In: 14th Workshop on Energy and Environment. Gödöllő, Magyarország, 2008.11.17-2008.11.18., 17. p.

NAGY, N., MÉSZÁROS, CS., GOTTSCHALK, K., **GYARMATI**, **B.**, BÁLINT, Á. (2010): Convection in cylindrical soil systems, Book of abstract , 16th Workshop on Energy and Environment, Gödöllő, Magyarország, 14 p.

BERNVALNER, G., **GYARMATI, B.**, BÁLINT, Á. (2010): Kerosene and cadmium contamination and their effect on garden cress (Lepidium sativum), 16th Workshop on Energy and Environment, November 11-12, 2010, Gödöllő, Hungary, p. 15.

GYARMATI, B., KAMPFL, GY., KUSLITS, M., FÖLDES, T., STANGE, C.F., BÁLINT, Á. (2010): Study on vertical distribution of N_2O and SF_6 gases in quasi-undisturbed soil, Farkas I (szerk.) 16th Workshop on Energy and Environment: Book of Abstracts, Gödöllő, Magyarország, 13 p. BÁLINT, Á., HOFFMANN, S., BERECZ, K., KRISTÓF, K., KAMPFL, GY., NÓTÁS, E., HORVÁTH, M., **GYARMATI, B**., MOLNÁR, E., ANTON, A., SZILI-KOVÁCS, T., HELTAI, GY. (2012): Influence of fertilisation practice on gas and grain yield production In: Richards KG, Fenton O, Watson CJ (szerk.) 17th International Nitrogen Workshop, Ireland, Wexford: Teagasc The National Food Centre, 126-127. p. (ISBN:978-1-84170-588-0, 1-84170-588-8)

Idézettség:

Idézett cikk:

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. 193-196. p. (IF: 1,19)

Idézte:

VINKOVIC, T., PARADIKOVIC, N., LEPEDUS, H., STOLFA, I., TEKLIC, T. (2008): Oxidative stress in radish plants grown on soils with different Cu and Pb level, *Cereal Research Communications* (Part 3 Suppl. S.), 36. 1519-1522. p.

DURDEVIC, B., LISJAK, M., STOSIC, M., ENGLER, M., POPOVIC, B. (2008): Influence of Pb and Cu toxicity on lettuce photosyntetic pigments and dry matter accumulation, *Cereal Research Communications* (Part 3 Suppl. S.), 36. 195-1954. p.

PÓTI, P., BODNÁR, A., LÁCZÓ, E., PAJOR, F., KISPÁL, T. (2008): Concentration of lead and cadmium in soil, forage, organ and muscle samples of sheep in Hungary, *Cereal Research Communications* (Part 3 Suppl. S.), 36. 1975-1978. p.

KISIC, I., MESIC, S., BRKIC, V., MESIC, H., BERTOVIC, L. (2008): Growing crops on polluted soil, *Cereal Research Communications* (Part 2 Suppl. S.), 36. 2008. p. 1215-1218.

KUKLOVA, M., KUKLA, J. (2008): Accumulation of macronutrients in soils and some herb species of spruce ecosystems, *Cereal Research Communications* (Part 2 Suppl. S.), 36. 2008. p. 1319-1322.

Idézett konferencia kiadvány:

BÁLINT, Á., **GYARMATI, B.**, HÁRSHEGYI, Z., HELTAI, G. (2007): E Effect of nitrogen fertilizer on grain of winter wheat, *Cereal Research Communications* (Part 3 Suppl. S.), 36. 2007. p. 1687-1690.

Idézte:

KNEZEVIC, D.S., DJUKIC, N., PAUNOVIC, A., MADIC, M. (2009): Amino acid contents in grains of different winter wheat (Triticum aestivum L.) varieties, *Cereal Research Communications* (Suppl. S.), 37. 647-650. p.