

***VALIDACE GEOCHEMICKÝCH MODELŮ POROVNÁNÍM
VÝSLEDKŮ TEORETICKÝCH VÝPOČTŮ S VÝSLEDKY
MINERALOGICKÝCH A CHEMICKÝCH ZKOUŠEK.***

František Eichler 1), Jan Holeček 2)

*1) Jáchymovská 282/4, 460 10, Liberec 10 – Františkov,
e-mail: eichlerfr@geow.cz*

2) Česká geologická služba, Geologická 5, 150 00, Praha 5

Co je problém:

Vytvořit geochemický model, pomocí kterého by bylo možné generovat, testovat a ověřovat platnost hypotéz vysvětlujících chemické či fyzikální interakce kapalná a pevná fáze na sledované lokalitě.

Prostředky:

- a) Programy a programové systémy pro geochemické modelování – *Geochemist's Workbench (GWB)* (Bethke, 2000) anebo *PHREEQECI* (Parkhurst 1995).
- b) Termodynamické databáze k programům pro geochemické modelování.
- c) Analytickými metodami stanovené fyzikální a chemické parametry vod vyskytujících se v zájmové oblasti.
- d) Geologická, mineralogická a petrografická charakteristika hornin z oblasti

Kroky vedoucí k definici geochemického modelu:

1. Vytvoření výběrového datového souboru dle zvolených kritérií. Datový soubor obsahuje:
 - Fyzikálně-chemické parametry vod (tj. vodivost, RAS rozpuštěné organické soli, pH, Eh, teplota) a koncentrace majoritních a vybraných minoritních chemických složek kapalné fáze.
 - Geologickou, petrografickou a mineralogickou charakteristika oblasti
2. Matematicko-statistické vyhodnocení výběrového souboru, tj. hledání závislostí.
3. Výpočet stavu termodynamické rovnováhy pro geochemické modely, v tomto případě programem *Geochemist's Workbench (GWB)* (Bethke, 2000) anebo *PHREEQECI* (Parkhurst 1995) s modifikovanými termodynamickými databázemi pro termodynamický systém $\text{Na}^+ - \text{K}^+ - \text{NH}_4^+ - \text{Ca}^{+2} - \text{Al}^{+3} - \text{Fe} - \text{SO}_4^{-2} - \text{CO}_3^{-2} - \text{H}_2\text{O}$.
4. Validace modelu a testování správnosti výběru geochemického modelu faktorovou analýzu (Jöreskog et al.1976)
 - Chemické složení roztoků je dáno směřováním několika typů roztoků.
 - Chemické složení roztoků je dáno rovnováhou chemických složek v kapalné fázi.
 - Chemické složení roztoků je dáno rovnováhou chemických složek mezi kapalnou a pevnou fází.

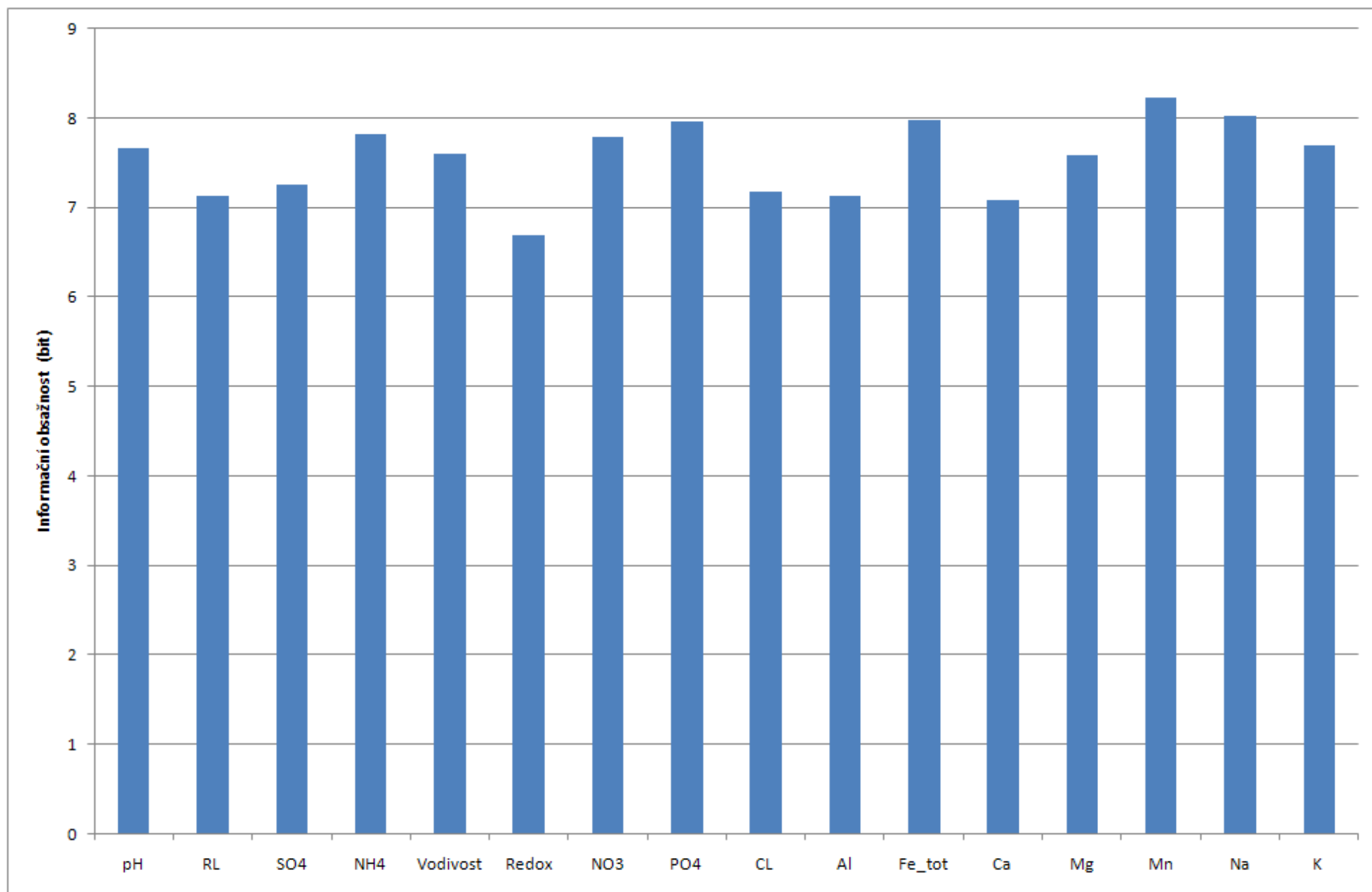
Informační obsažnost jednorozměrné kvantitativní chemické analýzy **I**:

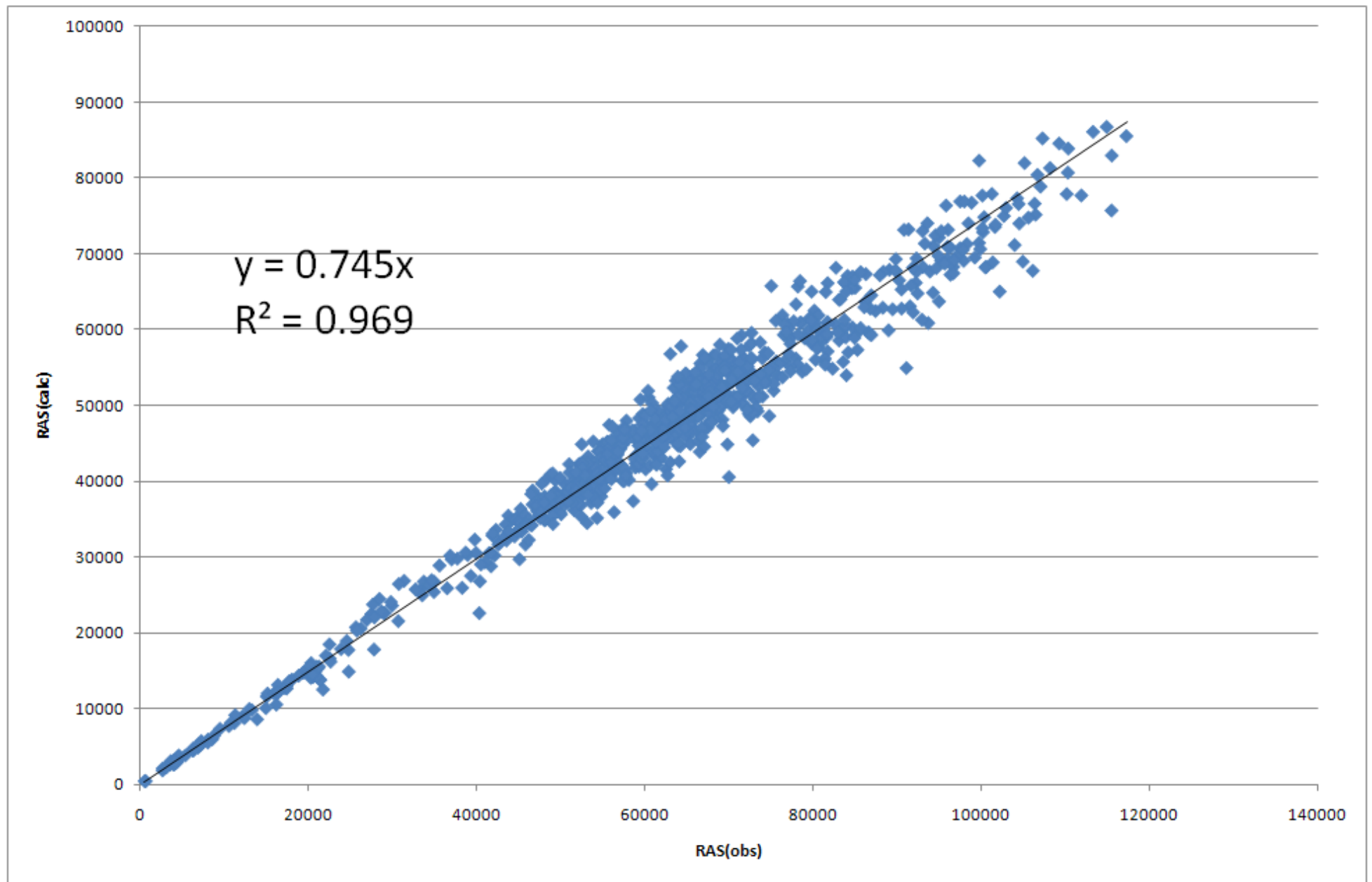
$$I = \log_2 \left(\frac{x_{\max} - x_{\min}}{2 \cdot s \cdot t(P, f)} \cdot \sqrt{N} \right) \quad \dots 1$$

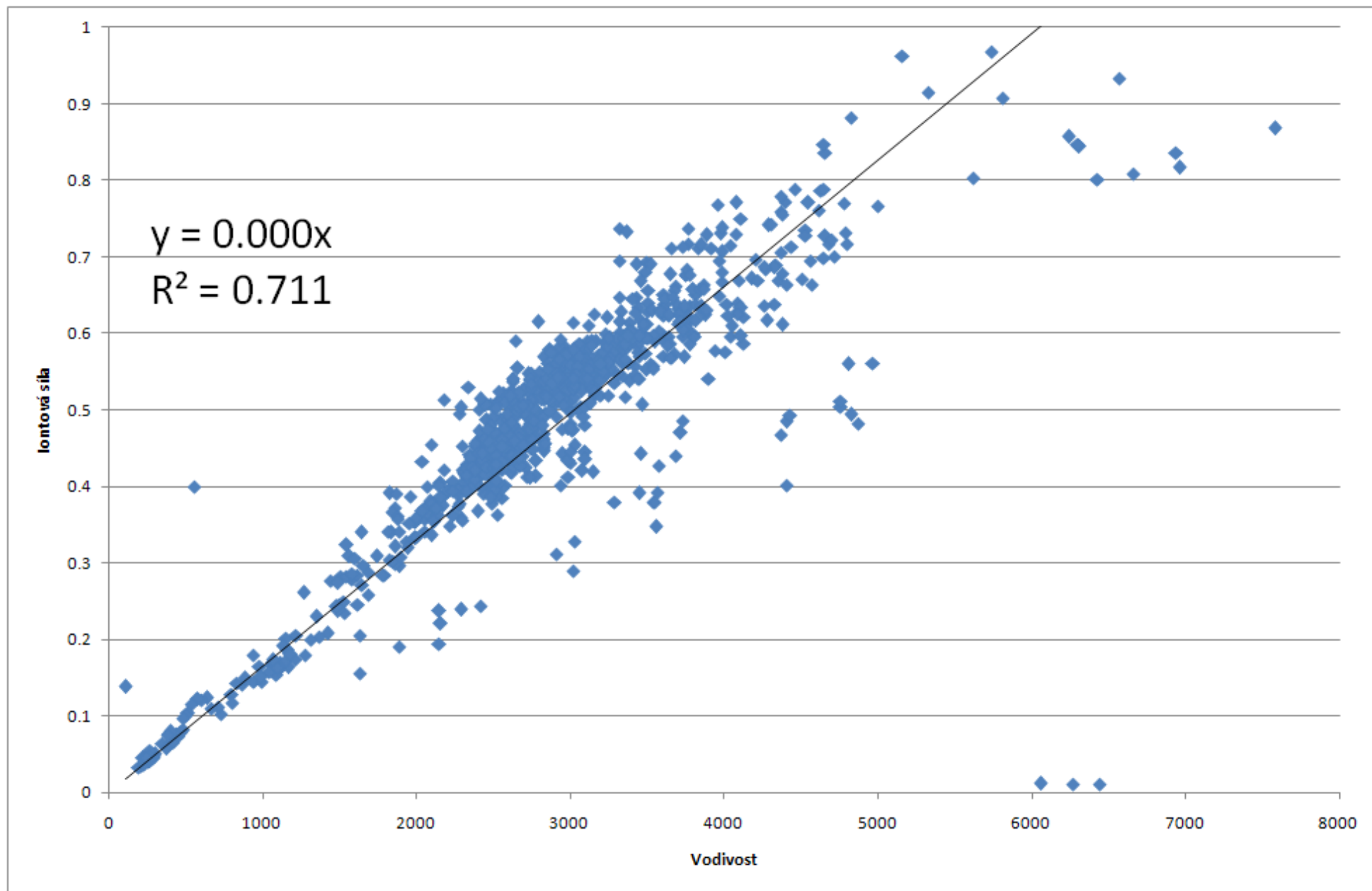
- kde: x_{\max} - maximální hodnota stanovené koncentrace složky roztoků
 x_{\min} - minimální hodnota stanovené koncentrace složky roztoků
 s^2 - odhad rozptylu, kde s je pak odhad směrodatné odchylky
 $t(P, f)$ - kritická hodnota Studentova rozdělení
 P - zvolená hladina významnosti
 f - stupeň volnosti, $f = N - 1$
 N - počet vzorků, u kterých bylo stanovení provedeno

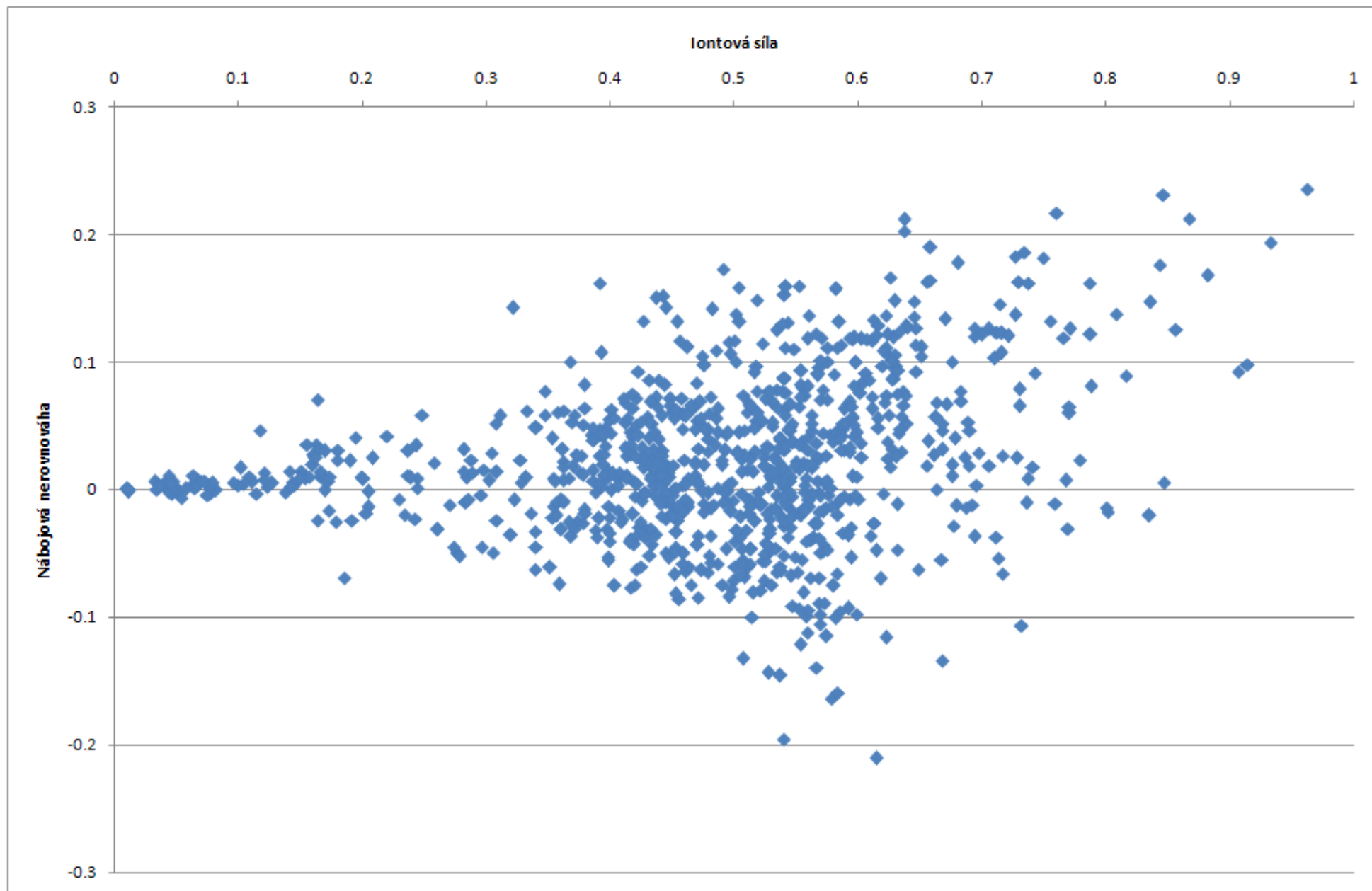
$$s = \bar{x} \cdot \xi_x \quad \dots 2$$

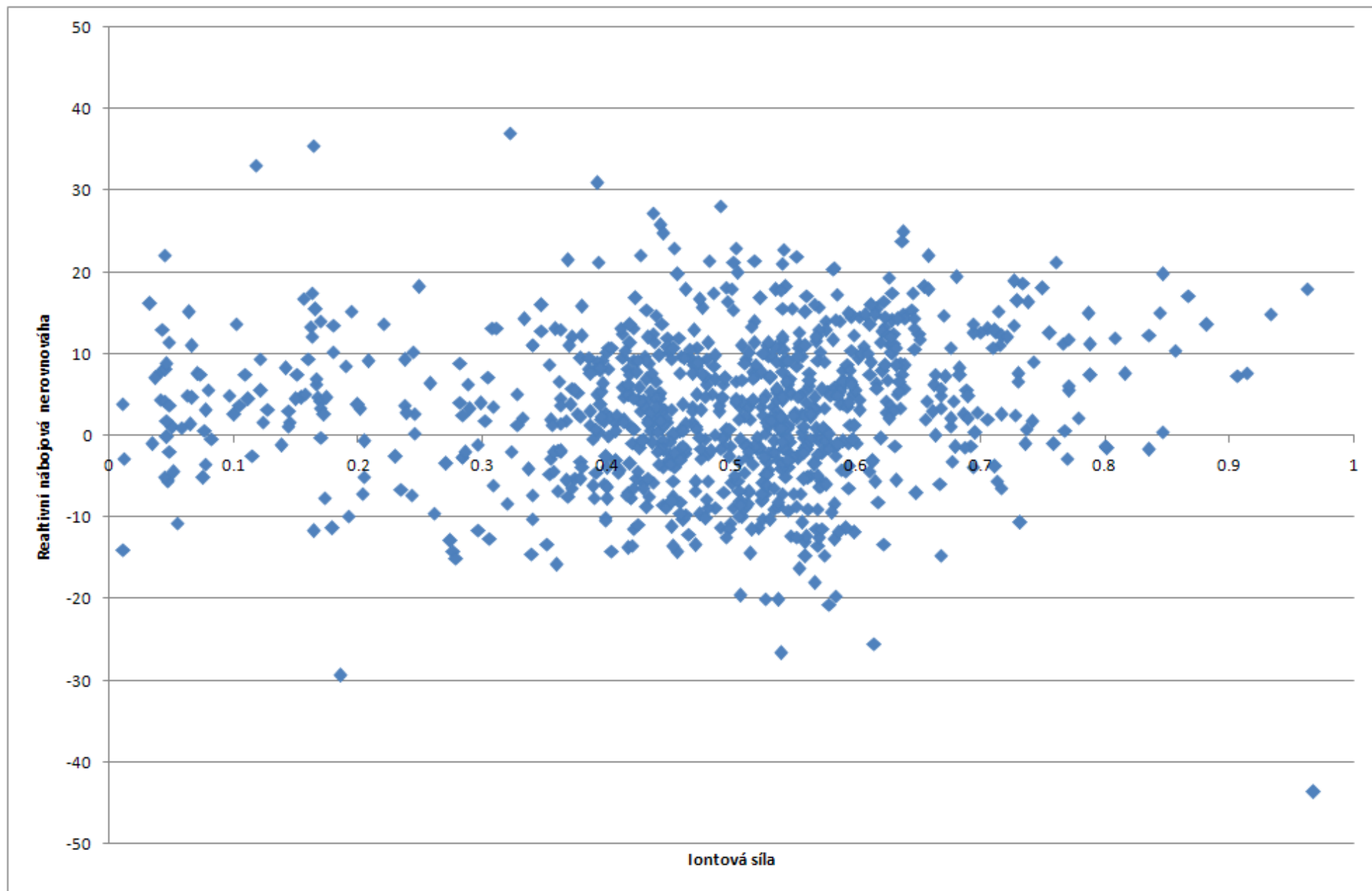
- kde: s - odhad směrodatné odchylky
 \bar{x} - aritmetický průměr
 ξ_x - odhad relativní směrodatné odchylky







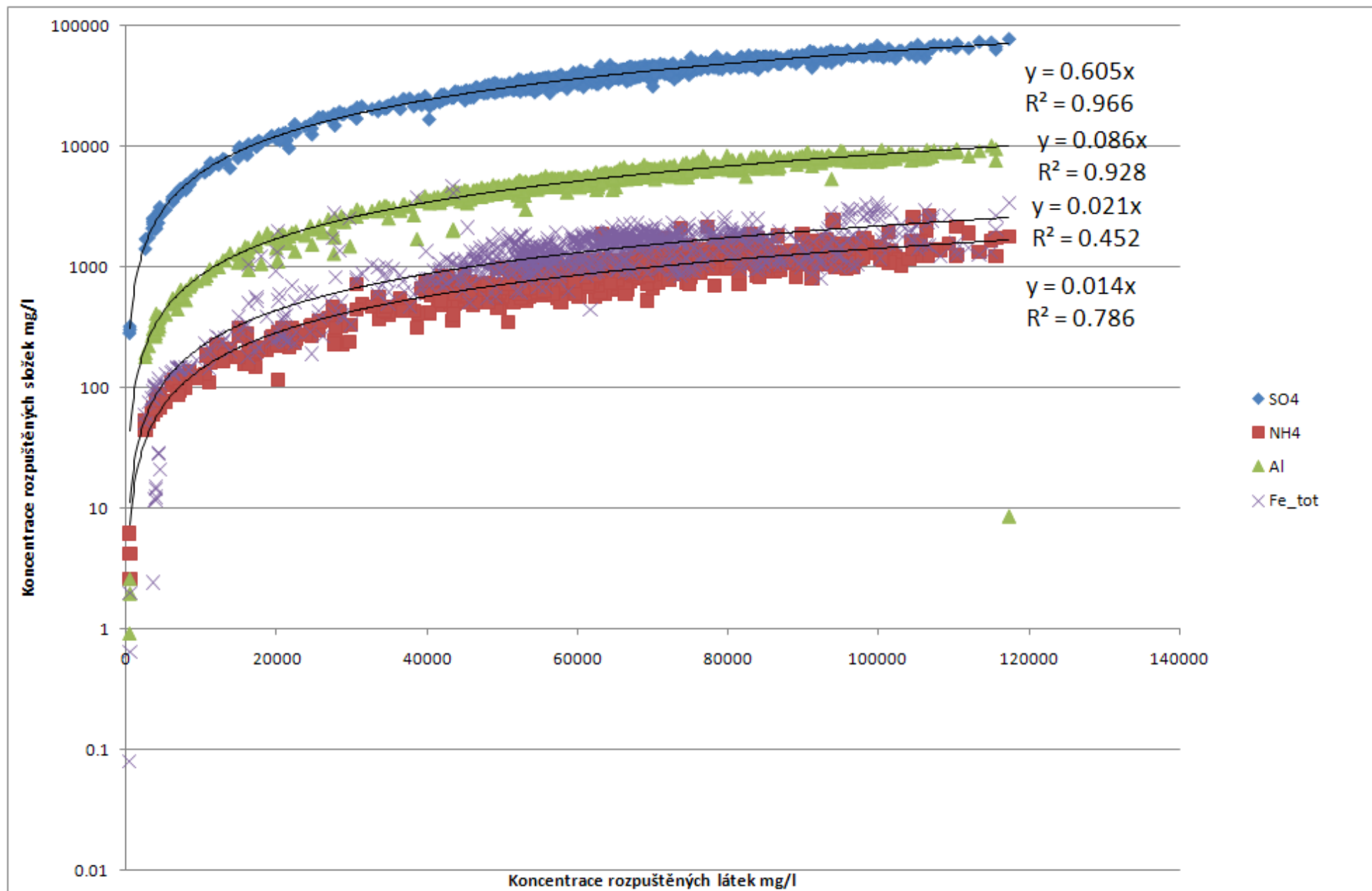


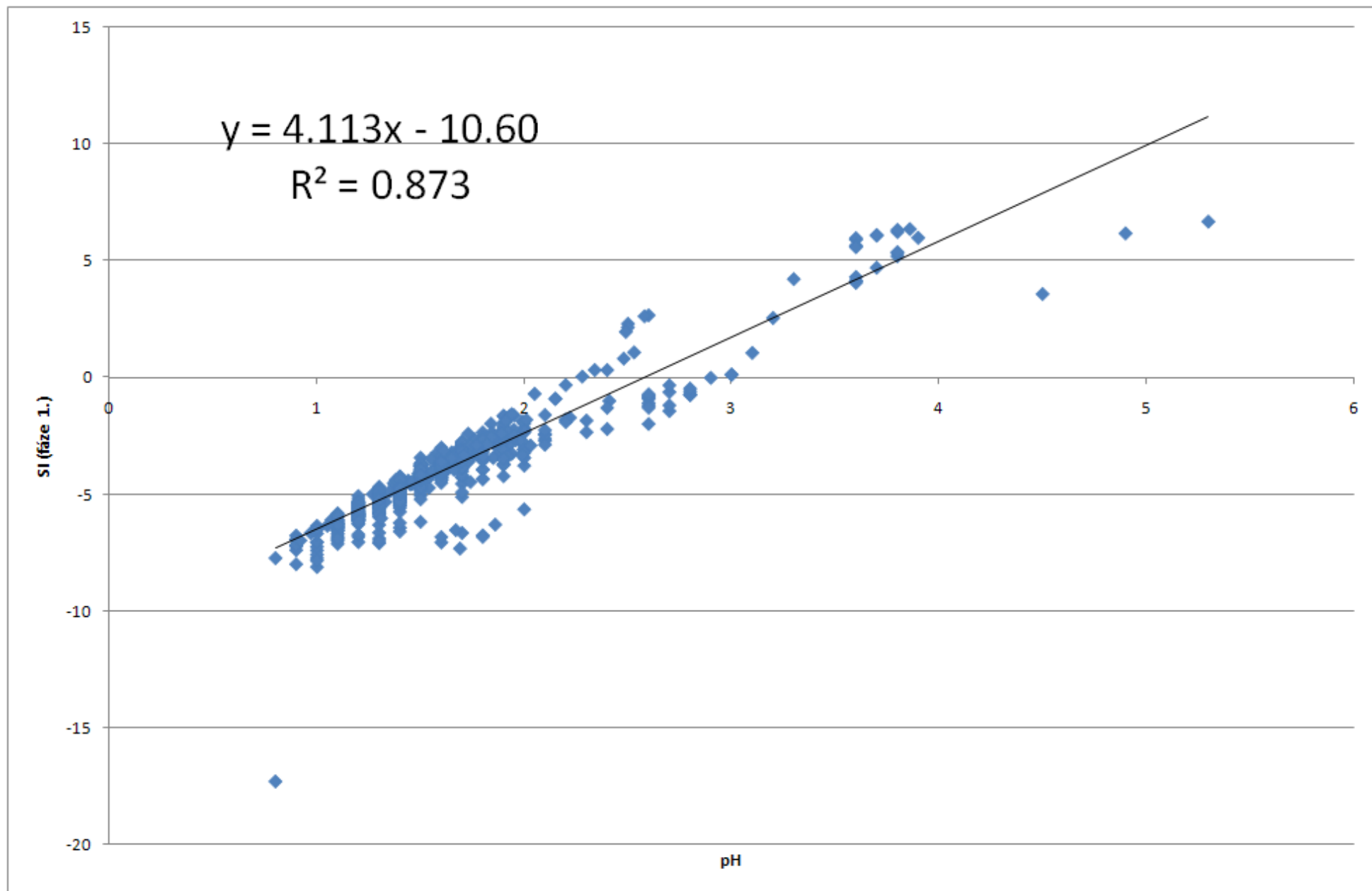


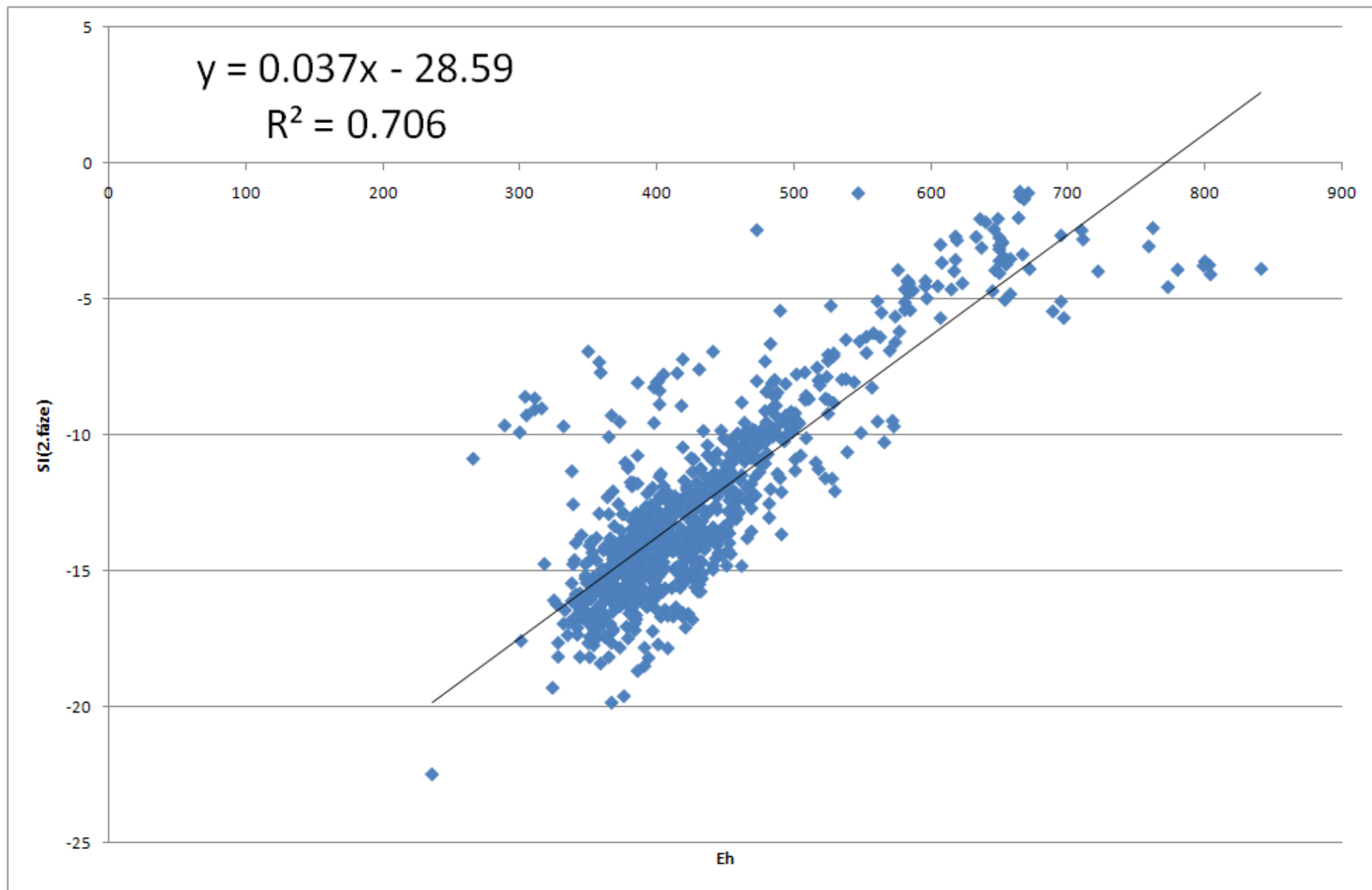
Validace modelu a testování správnosti výběru geochemického modelu faktorovou analýzou

Testujeme hypotézy:

- a) Chemické složení roztoků je dáno směřováním několika typů roztoků. Tím je rozuměn případ, kdy v kapalně fázi neprobíhají chemické reakce mezi složkami roztoků. Chemické složení výsledných roztoků je dáno složením původních mísících se roztoků a jejich poměrným zastoupením v nově vytvořených roztocích.
- b) Chemické složení roztoků je dáno rovnováhou chemických složek v kapalně fázi. Fyzikální a chemické parametry roztoků jsou určeny především hodnotou pH anebo pH – Eh rovnováhou systému zahrnujícího pouze kapalnou fázi. Příkladem může být roztok, který byl transportován do prostředí vůči němu inertnímu, tj. neprobíhají chemické reakce mezi roztokem a vnějšími termodynamickými systémy jako například horninotvornými minerály, anebo vliv těchto chemických reakcí je na změny těchto fyzikálních a chemických parametrů zanedbatelný.
- c) Chemické složení roztoků je dáno rovnováhou chemických složek mezi kapalnou a pevnou fází. Fyzikální a chemické parametry roztoků jsou určeny především hodnotou pH anebo pH – Eh rovnováhou systému zahrnujícího jak kapalnou, tak i pevnou fázi. Příkladem může být roztok, který byl transportován do nového prostředí, ve kterém reaguje s horninotvornými minerály, tak že se rozpouštějí nebo naopak z roztoku krystalizují novotvořené pevné fáze, při čemž se mění fyzikálně-chemické parametry roztoku.







Závěr

1. Žádný model nemůže nahradit výsledky terénního pozorování, tj:

- Fyzikálně-chemické parametry vod (tj. vodivost, RAS rozpuštěné organické soli, pH, Eh, teplota) a koncentrace majoritních a vybraných minoritních chemických složek kapalné fáze.
- Geologickou, petrografickou a mineralogickou charakteristiku oblasti

2. Musí být k dispozici spolehlivá analytická data obsahující:

- Minimální nejistoty fyzikálně-chemických parametrů vod (tj. vodivost, RAS rozpuštěné organické soli, pH, Eh, teplota) a koncentrací majoritních a vybraných minoritních chemických složek kapalné fáze.
- „Správně“ provedený geologický, petrografický a mineralogický průzkum oblasti

Validace – ověření platnosti výsledků teoretických výpočtů v porovnání s v terénu zjištěnou skutečností.

Děkuji za pozornost