ZAPRACOVÁNÍ VÝSLEDKŮ CHEMICKÝCH ANALÝZ ZNEČIŠTĚNÝCH VOD ZÍSKANÝCH V RÁMCI MONITORINGU DO GEOCHEMICKÝCH MODELŮ.

Frantisek Eichler

Svermova 268/76

460 10 Liberec 10 – Frantiskov

Czech Republic

Mail: eichlerfr@geow.cz

Web: www.geow.cz

Definice problému:

- Pozorovací síť poskytuje informace o časoprostorových změnách proudění vod.

- Výsledky chemických analýz poskytuje informace o časoprostorových změnách chemismu vod.

<u>Výsledek = velké množství informací</u>

Řešení problému:

- *Matematicko-statistické zpracování dat …testování hypotéz matematicko-statistickými modely*

- *Geochemické procesy a geochemická interakce … testování hypotéz geochemickými modely*

- ***Základ = výsledky stanovení chemických parametrů vod***

Matematicko-statistické zpracování dat

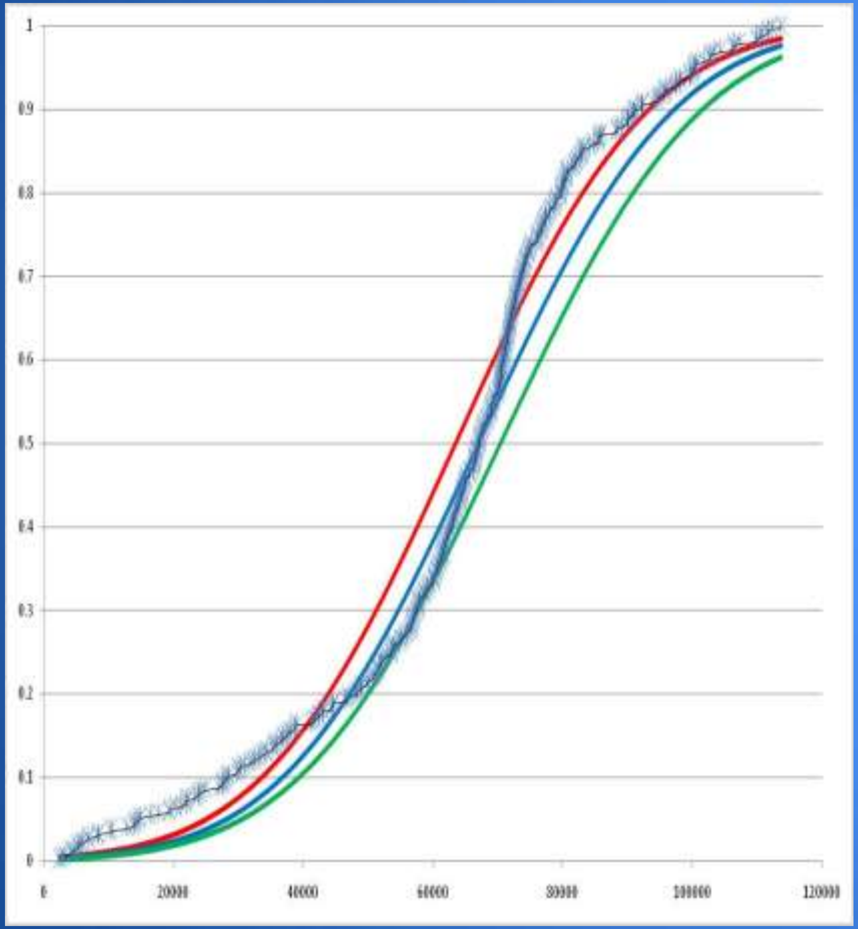
- ***Teoretické normální Gaussovo-Laplaceovo rozložení***

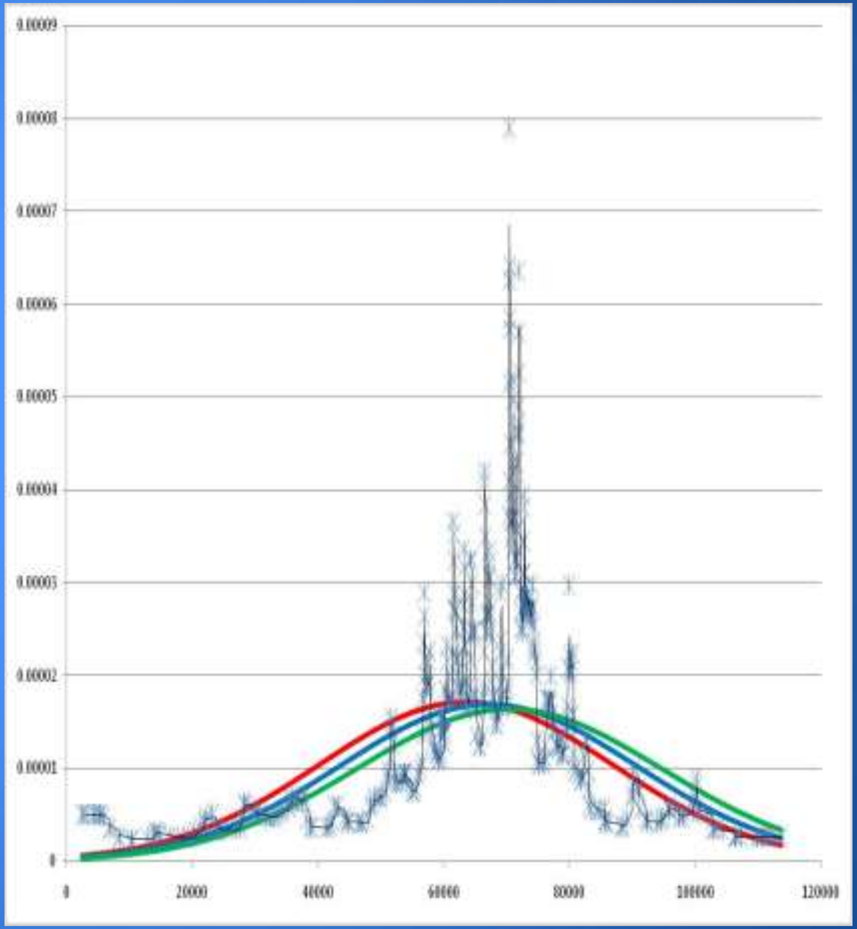
  - *Střední hodnota , aritmetický či geometrický průměr, medián, modus)*
  - *směrodatná odchylka, koeficient šikmosti, špičatosti*

- ***Numerické normální Gaussovo-Laplaceovo rozložení***

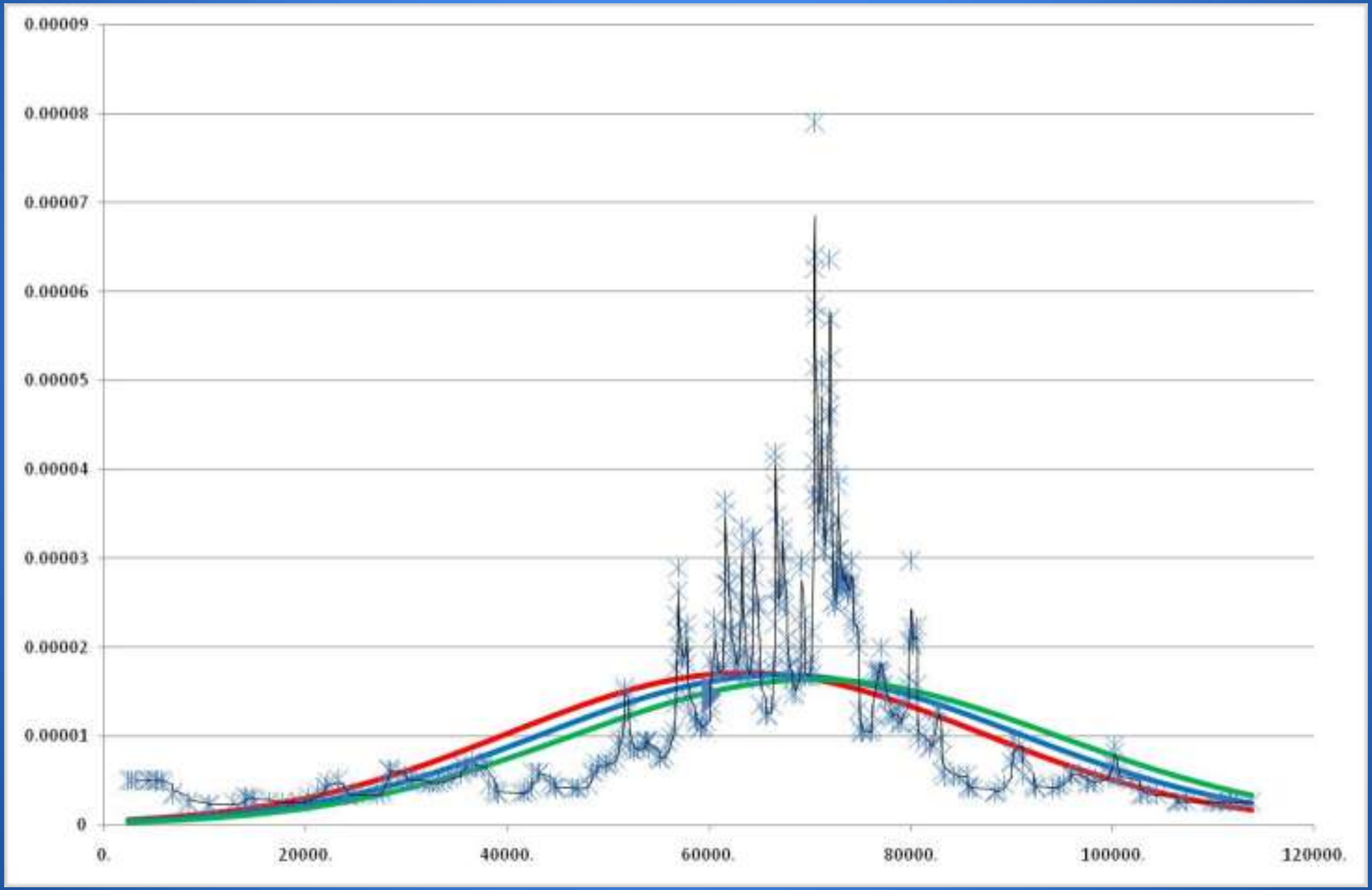
  - *Kumulativní četnosti*

Matematicko-statistické zpracování dat

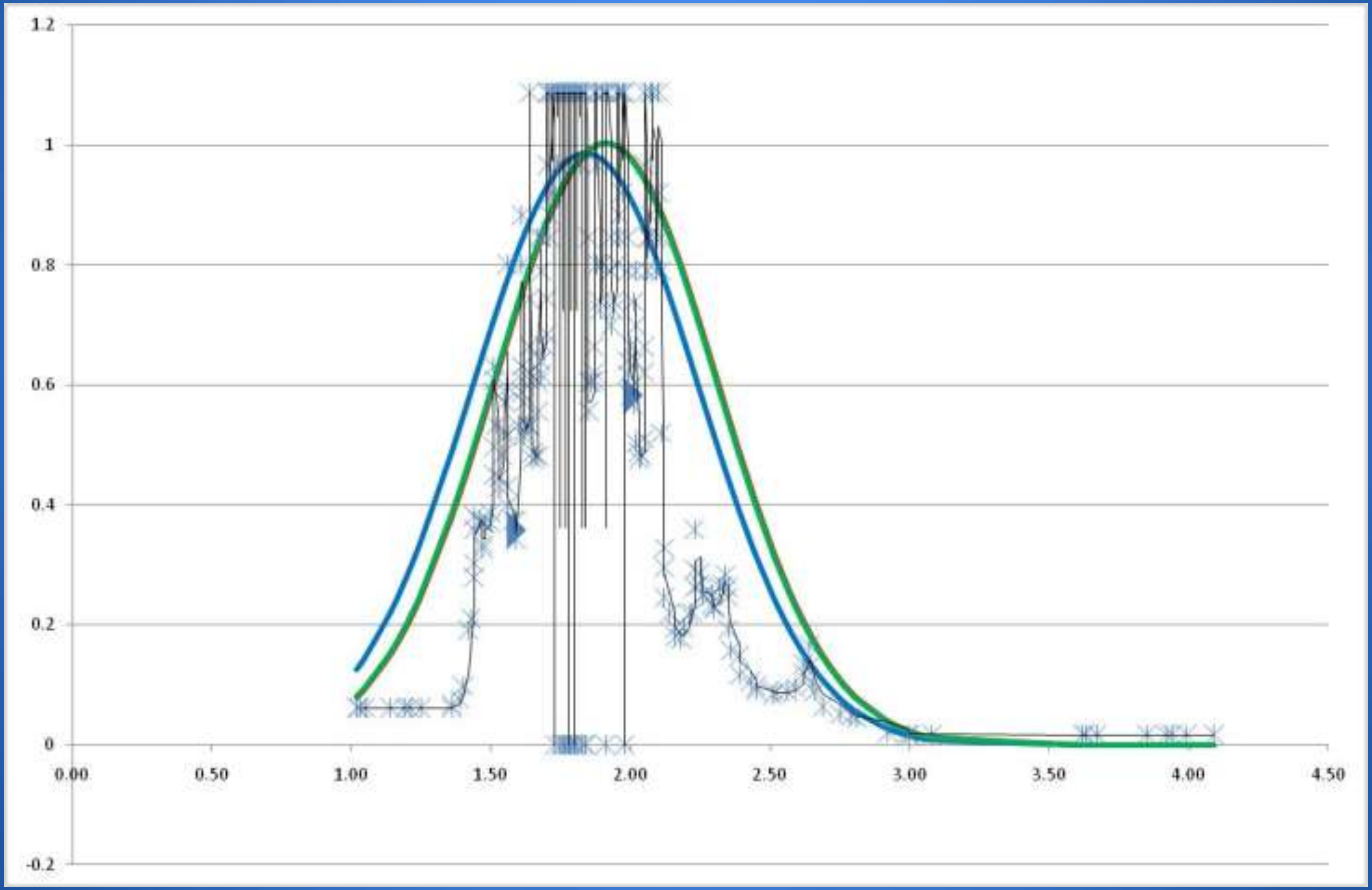




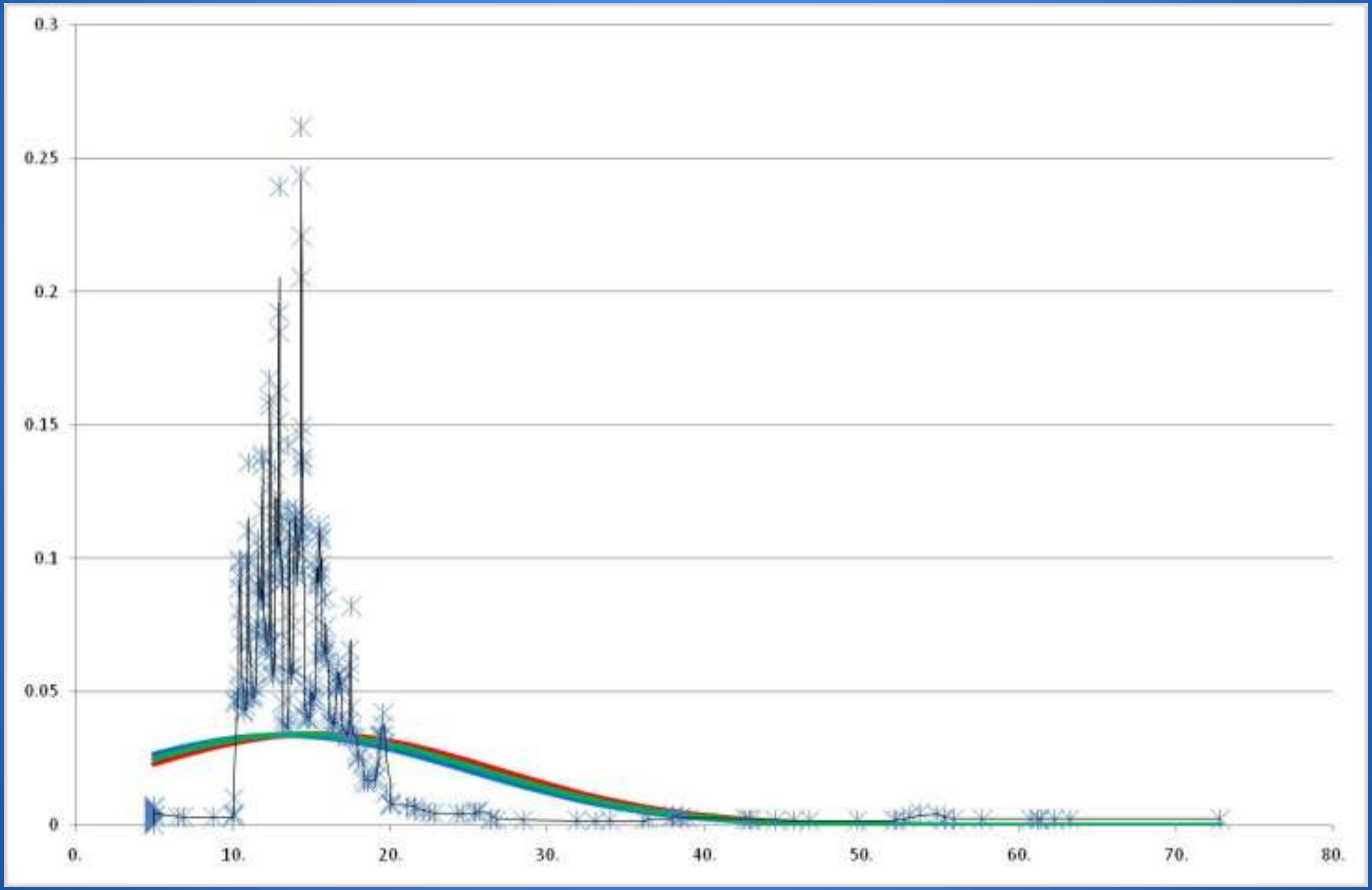
Matematicko-statistické zpracování dat RAS



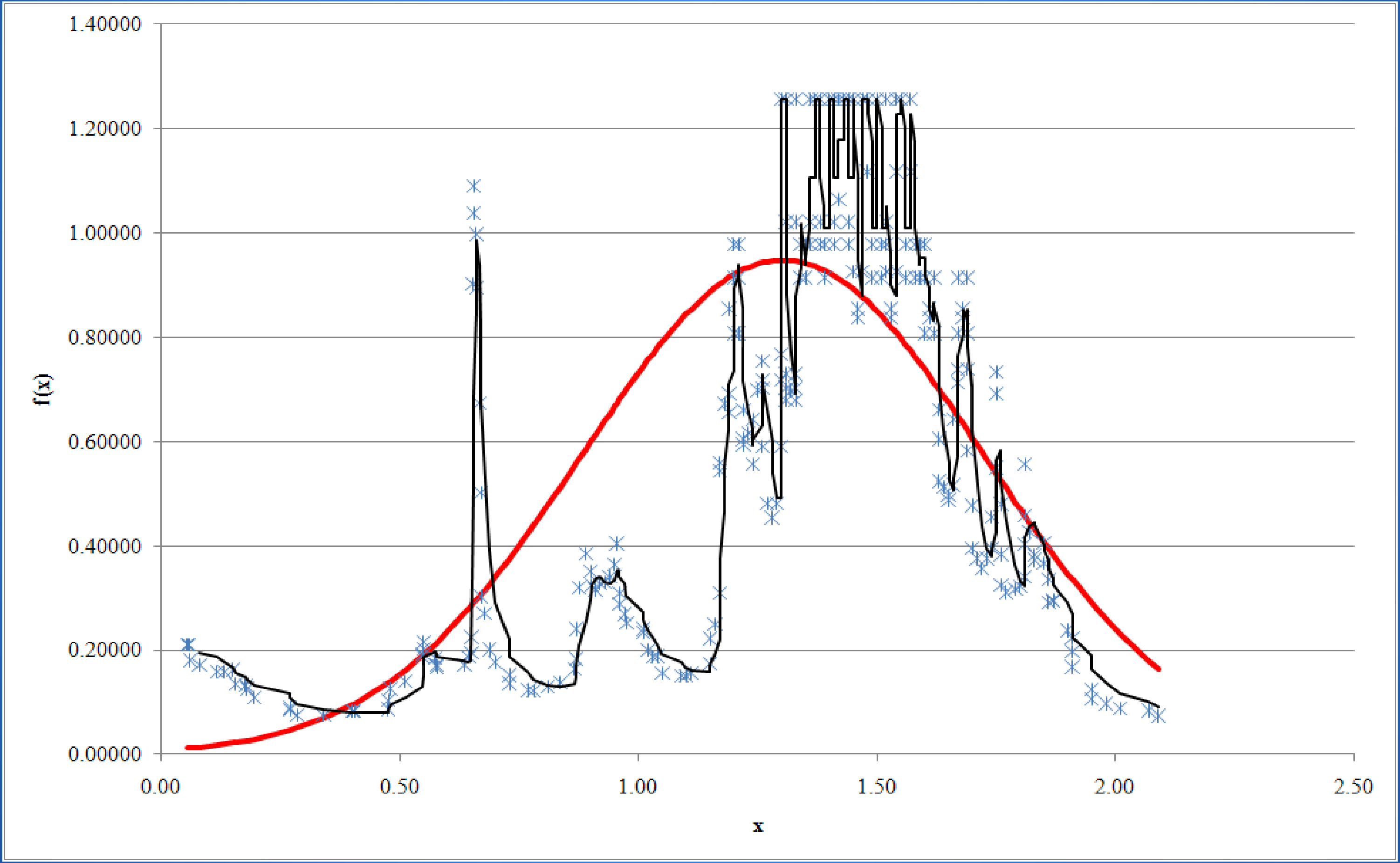
Matematicko-statistické zpracování dat
pH



Matematicko-statistické zpracování dat Cl



Matematicko-statistické zpracování dat
Cr



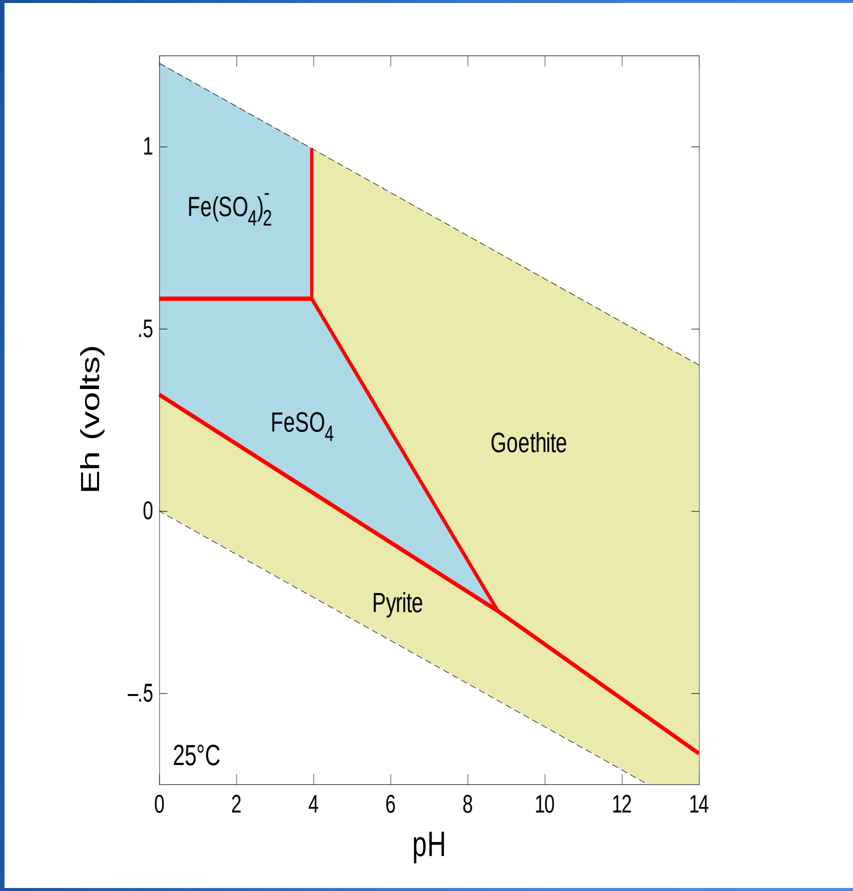
Testování hypotéz geochemickým modelem

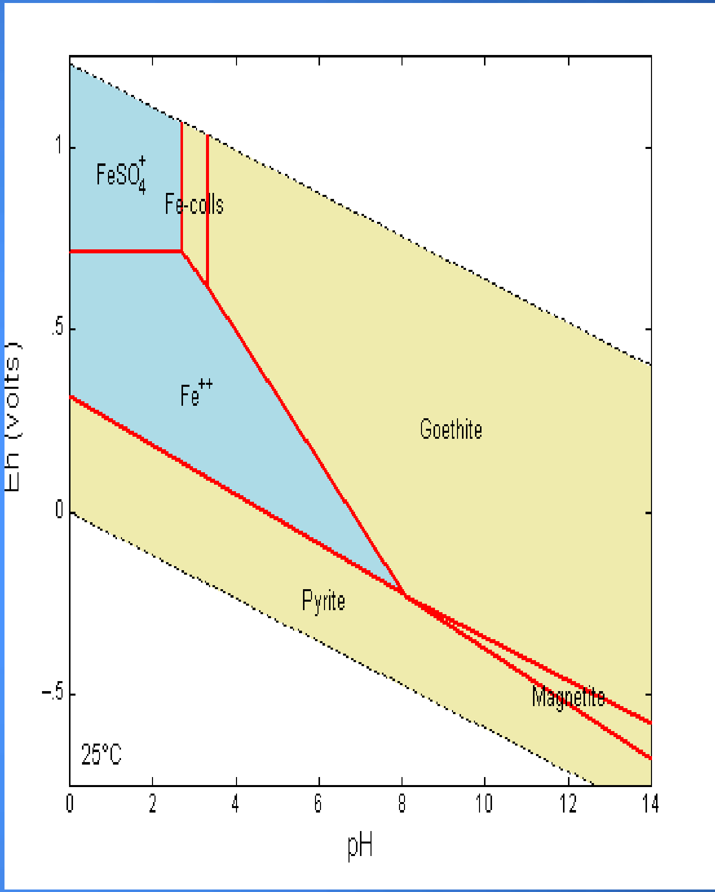
- *Chemické zastoupení složek v kapalné fázi je převážně ovlivněno obecnou směšovací rovnicí*

- Chemické zastoupení složek v kapalné fázi je převážně ovlivněno ustanovením rovnováhy (např. pH – Eh)

- Chemické zastoupení složek v kapalné fázi je převážně ovlivněno ustanovením rovnováhy mezi kapalnou a pevnou fází (saturační indexy)

Aktivitní diagram závislosti koncentrace složek s Fe^{+3} na pH a Eh pro systém Fe^{+3} - SO_4^{-2} - H_2O



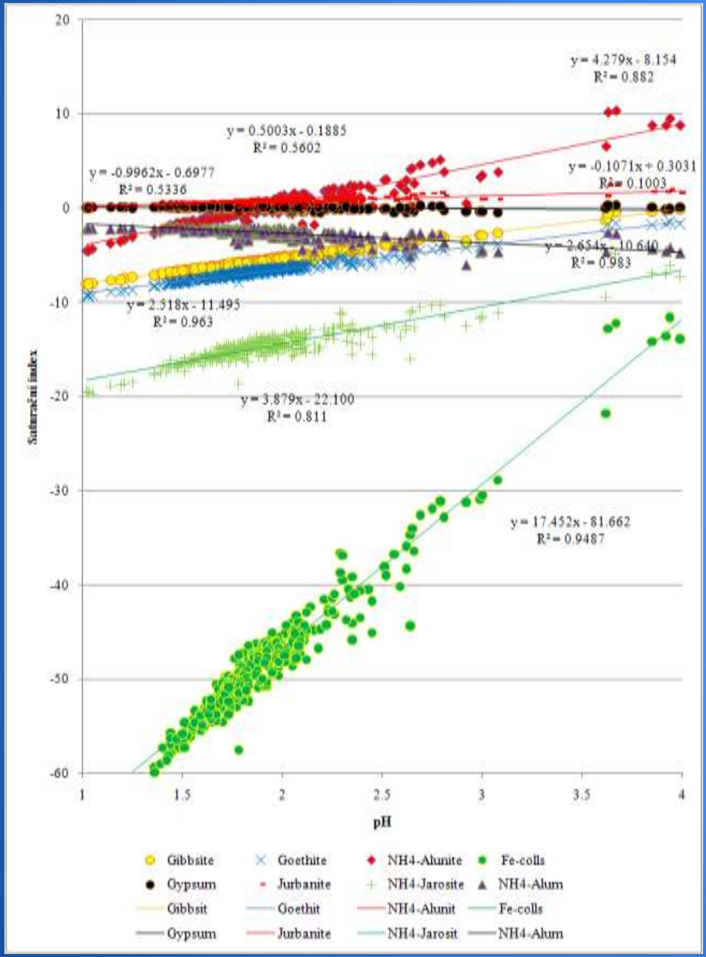


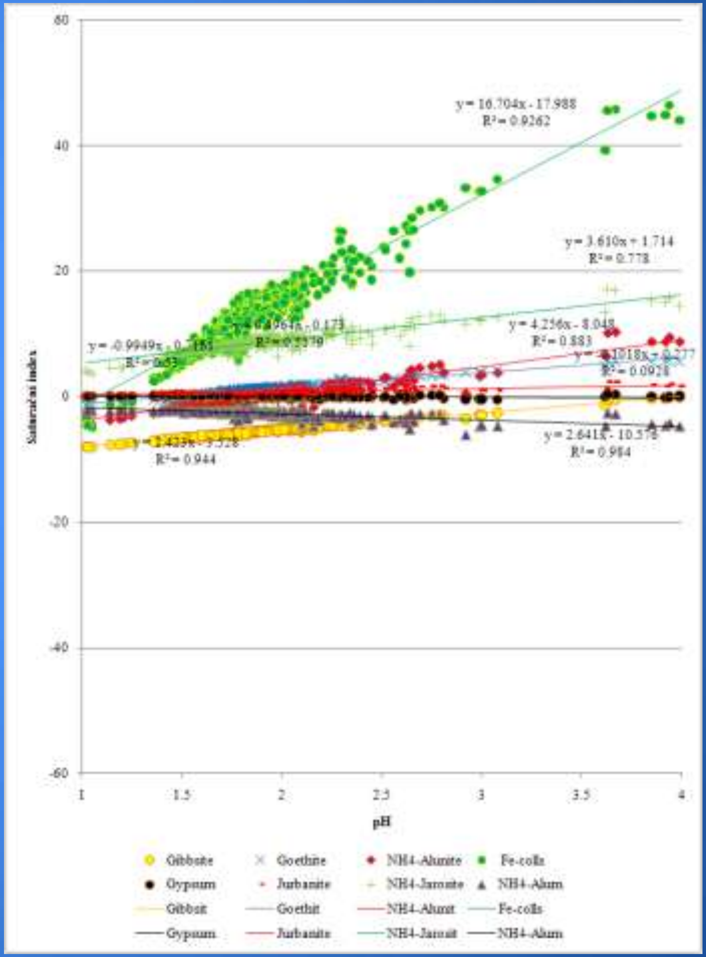
Pro 1. fázi krystalizace s $Fe(OH)_3$ (obrázek vlevo) a pro 2. fázi krystalizace s goethitem (obrázek vpravo). Vypočítáno programovým systém *Geochemist's Workbench (GWB – release 7.0.3)* s modifikovanou termodynamickou databází DDtermo.dat (Bethke, 2000).

Testování hypotéz geochemickým modelem

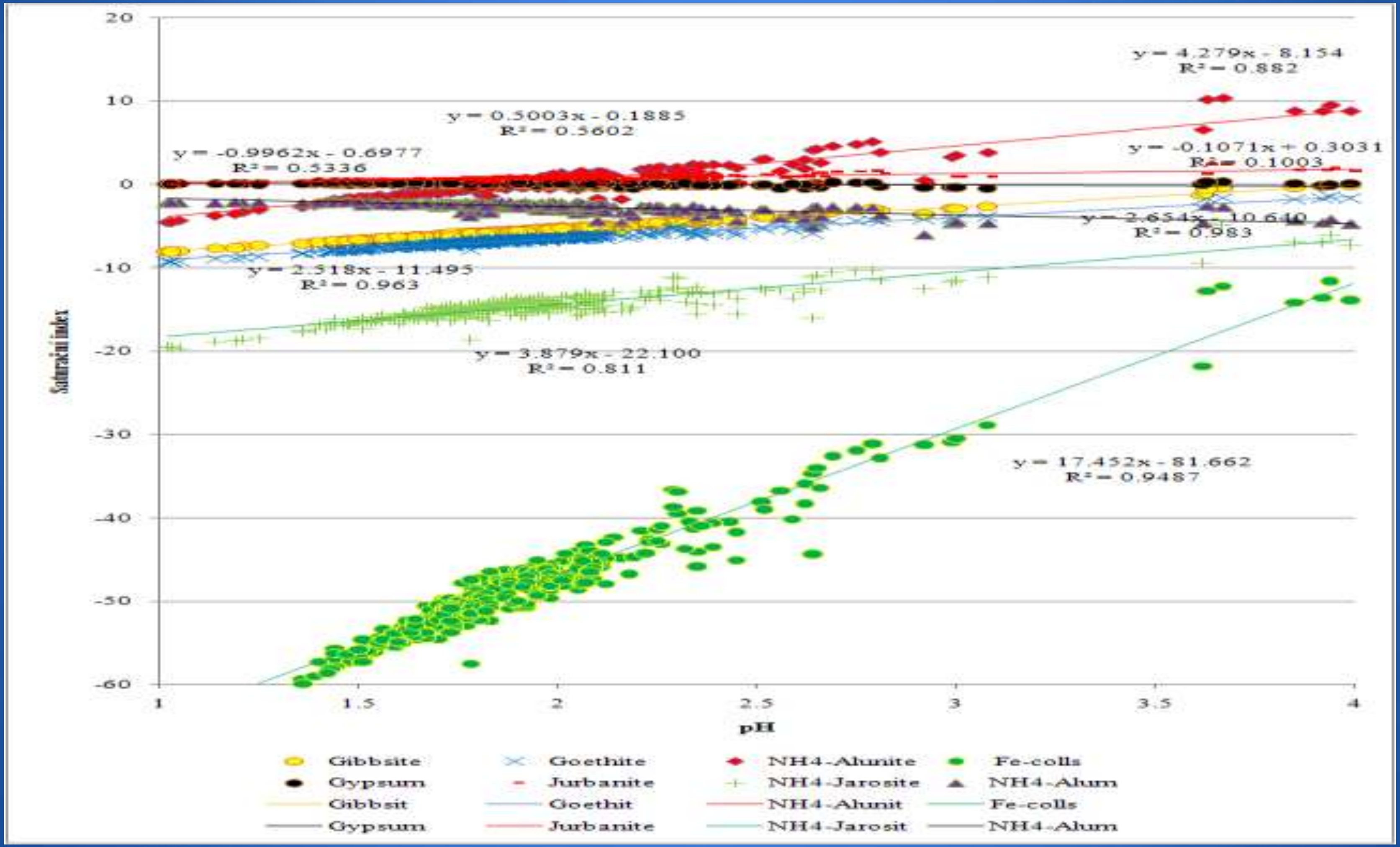
Gibbsit	**$AlOOH$**	**$Al^{+3} + 2H_2O \Leftrightarrow AlOOH + 3\,H^+$**
Goethit	**$FeOOH$**	**$Fe^{+2} + 2H_2O \Leftrightarrow FeOOH + 3\,H^+ + e^-$**
NH_4-Alunit	**$NH_4Al_6(SO_4)_4(OH)_{12}$**	**$NH_4Al_6(SO_4)_4(OH)_{12} + 6H^+ \Leftrightarrow NH_4^+ + 3Al^{+3} + 2SO_4^{-2} + 6H_2O$**
Fe-Colls	**$Fe_m(OH)_n(SO_4)_o.pH_2O$**	**$Fe_m(OH)_n(SO_4)_o.pH_2O + n\,H^+ \Leftrightarrow m\,Fe^{+3} + o\,SO_4^{-2} + n{+}p\,H_2O$**
Sádrovec	**$CaSO_4 \cdot 2H_2O$**	**$CaSO_4 \cdot 2H_2O \Leftrightarrow Ca^{+2} + SO_4^{-2} + 2H_2O$**
Jurbanit	**$Al(SO_4)(OH) \cdot 5H_2O$**	**$Al(SO_4)(OH) \cdot 5H_2O + H^+ \Leftrightarrow Al^{+3} + SO_4^{-2} + 6H_2O$**
NH_4-Jarosit	**$NH_4Fe_6(SO_4)_4(OH)_{12}$**	**$NH_4Fe_6(SO_4)_4(OH)_{12} + 12H^+ \Leftrightarrow NH_4^+ + 6Fe^{+3} + 4SO_4^{-2} + 12H_2O$**
NH_4-Alum	**$NH_4Al(SO_4)_2 \cdot 12H_2O$**	**$NH_4Al(SO_4)_2 \cdot 12H_2O \Leftrightarrow NH_4^+ + Al^{+3} + 2SO_4^{-2} + 12H_2O$**

Testování hypotéz geochemickým modelem





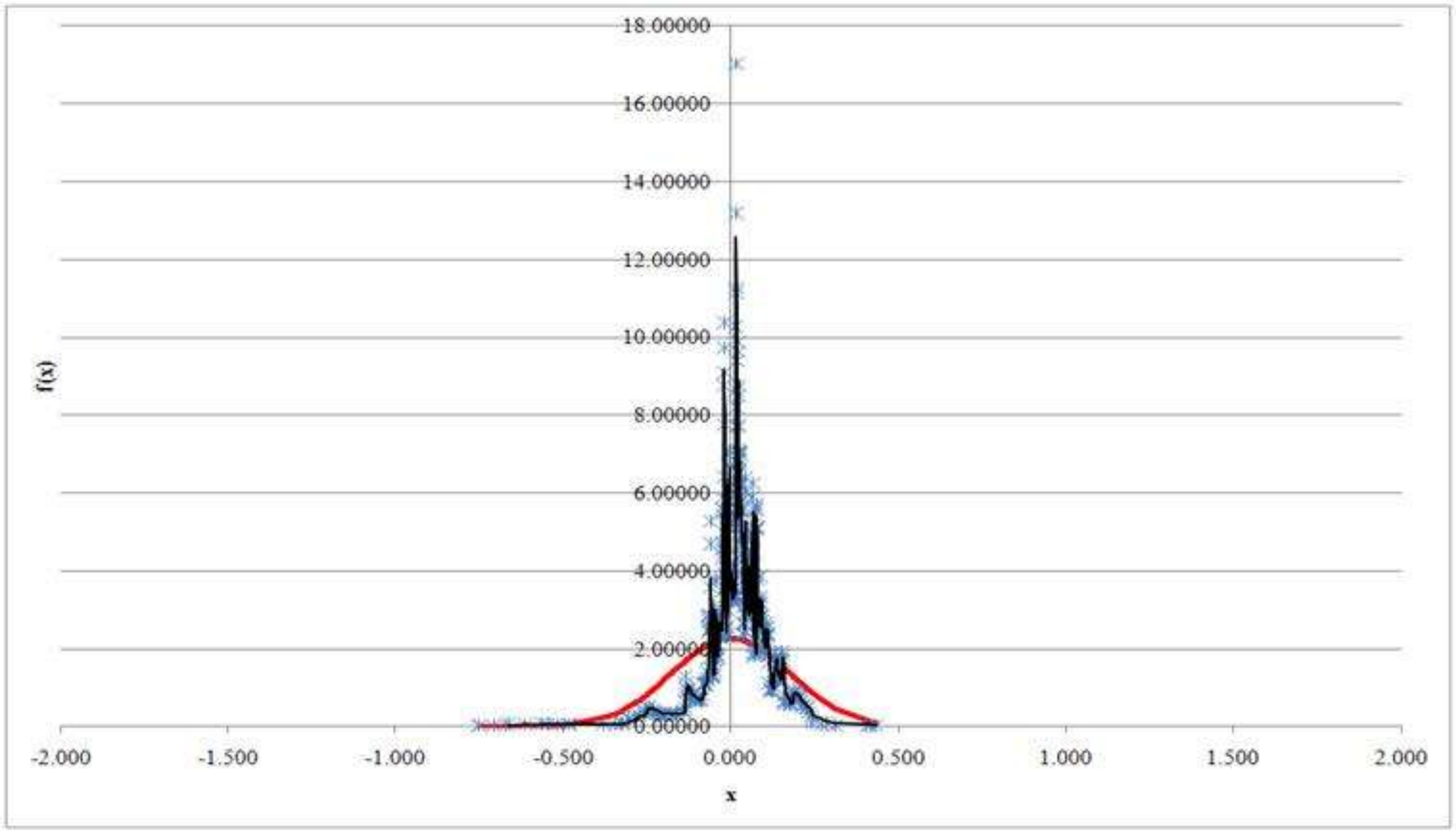
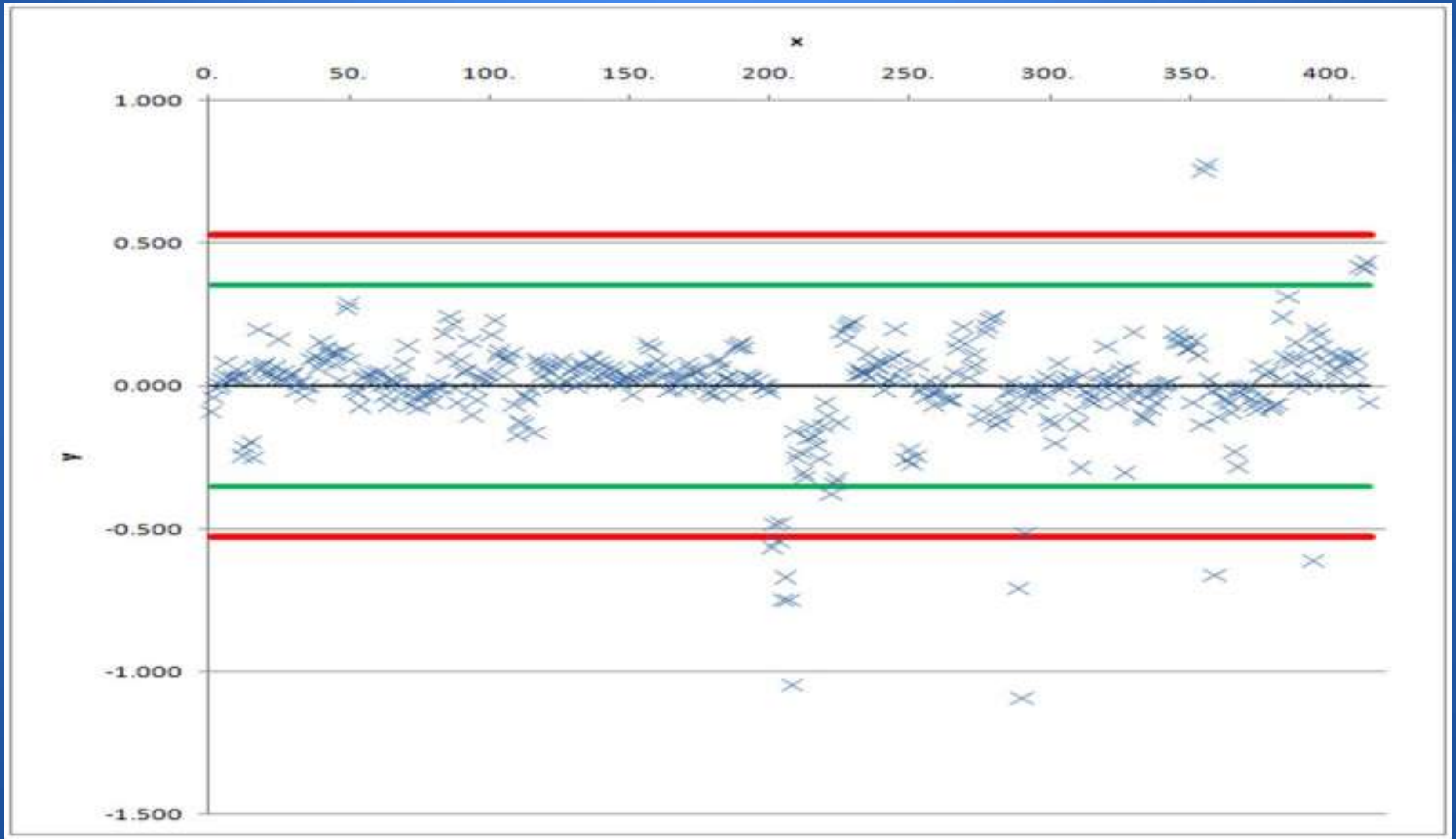
Testování hypotéz geochemickým modelem



Testování hypotéz geochemickým modelem

Gibbsit	$AlOOH$	$Al^{+3} + 2H_2O \Leftrightarrow AlOOH + 3\,H^+$
Goethit	$FeOOH$	$Fe^{+2} + 2H_2O \Leftrightarrow FeOOH + 3\,H^+ + e^-$
NH_4-Alunit	$NH_4Al_6(SO_4)_4(OH)_{12}$	$NH_4Al_6(SO_4)_4(OH)_{12} + 6H^+ \Leftrightarrow NH_4^+ + 3Al^{+3} + 2SO_4^{-2} + 6H_2O$
Fe-Colls	$Fe_m(OH)_n(SO_4)_o.pH_2O$	$Fe_m(OH)_n(SO_4)_o.pH_2O + n\,H^+ \Leftrightarrow m\,Fe^{+3} + o\,SO_4^{-2} + n{+}p\,H_2O$
Sádrovec	$CaSO_4\cdot 2H_2O$	$CaSO_4\cdot 2H_2O \Leftrightarrow Ca^{+2} + SO_4^{-2} + 2H_2O$
Jurbanit	$Al(SO_4)(OH)\cdot 5H_2O$	$Al(SO_4)(OH)\cdot 5H_2O + H^+ \Leftrightarrow Al^{+3} + SO_4^{-2} + 6H_2O$
NH_4-Jarosit	$NH_4Fe_6(SO_4)_4(OH)_{12}$	$NH_4Fe_6(SO_4)_4(OH)_{12} + 12H^+ \Leftrightarrow NH_4^+ + 6Fe^{+3} + 4SO_4^{-2} + 12H_2O$
NH_4-Alum	$NH_4Al(SO_4)_2\cdot 12H_2O$	$NH_4Al(SO_4)_2\cdot 12H_2O \Leftrightarrow NH_4^+ + Al^{+3} + 2SO_4^{-2} + 12H_2O$

Testování hypotéz geochemickým modelem NH4-jarosit



Testování hypotéz geochemickým modelem NH4-jarosit