

Válasz

Dr. Szűcs Péter opponensi véleményére

Mindenekelőtt megköszönöm opponensemnek, hogy vállalkozott – sűrűn szedett, rövidítésekkel és kisméretű ábrákkal teletűzdelt – dolgozatom alapos átolvasására és bírálatára. Köszönöm mindazt a jót, amit doktori dolgozatommal kapcsolatban leírt a bírálatában, remélhetőleg a későbbiekben a hidrológiai szakterület ténylegesen használni tudja majd némely eredményünket!

Opponensem a dolgozat bírálatában öt kérdést fogalmazott meg. **Első kérdése:** „*A pedotranszfer függvények előállításánál a felhasználó kutató milyen módszerrel tudja eldönteni, hogy mely becslő függvény a legalkalmasabb? A dolgozat említi, hogy a jövőben várható automatikus döntéstámogató rendszerek. Milyen globális optimalizációs eljárások alkalmazása várható leginkább ezeknél az új eljárásoknál?*”

Válaszom a következő:

Általánosságban elmondható, hogy azon függvényekkel a leghatékonyabb a becslés, amelyeket a vizsgálandó terület talajaihoz hasonló tulajdonságú talajadatbázison dolgoztak ki. Minél specifikusabbak a pedotranszfer függvények, annál pontosabb becslést adnak, de csupán kisebb területre, vagy meghatározott talajféleségre. Így országos léptékű becslések kidolgozásához a kontinentális léptékű adatbázis használata nem javasolt, mert az nagyobb becslési hibát eredményezhet. Kontinentális léptékű hidrológiai számításokhoz viszont a nagyobb, heterogénebb talajmintákat tartalmazó adatbázison kidolgozott PTF-ek használhatóbbak. Annak eldöntésében, hogy a vizsgálandó adatbázisban és az alkalmazni kívánt PTF kalibrációs adatbázisában szereplő talajok tulajdonságai hasonlóan tekinthetők-e, a különböző statisztikai talajcsoport-távolság számítások segíthetnek.

A kidolgozott becslő modellek pontosságát (accuracy) a becslő (kalibrációs) adatbázison, megbízhatóságukat (reliability) a becslő adatbázistól független teszt adatbázison szokás ellenőrizni. A becslő eljárások e tulajdonságait legtöbbször a determinációs együttható (R^2), az átlagos hiba („mean error”, ME) és az átlagos négyzetes hiba négyzetgyöke („root mean square error”, RMSE), más néven empirikus szórás adja meg. Gyakran alkalmazott statisztikai mutató még az átlagos relatív hiba („relative mean error”, RME) vagy a becslés torzítatlan hibája („unbiased root mean squared error”, URMSE), mely a véletlen hiba mértékét számszerűsíti. A különböző típusú PTF-ek pontosságának és megbízhatóságának tesztelésére általában több statisztikai mutató együttes meghatározása javasolt.

Sok esetben kénytelenek vagyunk egy kisebb pontosságú és/vagy megbízhatóságú PTF-et választani egyszerűen azért, mert a rendelkezésünkre álló adatbázis csupán egy ilyen típusú PTF input igényét szolgálja ki (pl. a részletes mechanikai összetétel adatok helyett csak a talajok fizikai féleségét ismerjük vagy talajtani információként csak térképi kategória-változók állnak rendelkezésünkre).

Amennyiben az adott célra több hasonló pontosságú/megbízhatóságú PTF-et is a használhatnánk, a kiválasztásnál (a becslés hibájának figyelembe vétele mellett) a becsléshez szükséges input paraméterszám is segíthet eldönteni, hogy mely becslőmodszert válasszuk. Több, különböző paraméterszámú PTF esetén, a modellek hatékonyságának megállapítására kidolgozott kritériumok mérlegelésével dönthető el, hogy melyik a legalkalmasabb modell. A modellválasztási kritériumok közül az Akaike-féle információs kritérium (AIC) használata (azaz a legkisebb szabadságfokú becslés alkalmazása) a legelterjedtebb.

A különféle becslő szoftverek használatakor a becslési módszer optimalizálása során a fenti szempontok veendőek figyelembe.

Opponensem **második kérdése:** *„Folyadékfázisként kétfajta folyadékot alkalmazott a szerző a talajszerkezet vizsgálatokhoz, valamint a folyadékviszatartó és folyadékvezető képesség mérésekhez. A desztillált víz mellett egy apoláros szerves modell-folyadék, a DUNASOL 180/220 elnevezésű kőolajlepárlási termék került felhasználásra a vizsgálatoknál. Miért éppen ez a specifikus kőolajszármazék került felhasználásra telítő közegként a méréseknél? Milyen szempontból van annak jelentősége, hogy a nevezett folyadék aromás összetevőktől mentes?”*

Válaszom:

A talajszerkezet vizsgálatokhoz, illetve a folyadék-viszatartó és folyadékvezető képesség mérésekhez – a desztillált víz mellett – valamilyen víznél kisebb sűrűségű szerves folyadékot („Light nonaqueous phase liquid”, LNAPL) kívántunk bevinni a vizsgálatokba. A környezetvédelmi vonatkozások miatt kezdetben különféle, kereskedelmi forgalomban lévő kőolaj-lepárlási termékeket (benzin, kerozin, gázolaj) használtunk. Ezek azonban talajfizikai vizsgálatokra kevésbé alkalmasak, hiszen nagy mennyiségben tartalmaznak olyan illékony szerves alkotókat („Volatile organic compound”, VOC), melyek egy része aromás komponenseket tartalmazó, az emberi egészségre és a környezetünkre egyaránt veszélyes vegyület. Ezek közül is kiemelendők az ún. BTEX aromás szénhidrogének (benzol, toluol, etil-benzol xilol), amelyek közismerten karcinogének, károsítják a vérképző rendszert, a központi idegrendszert és a reproduktív szerveket. Ezért kerestünk egy olyan kevésbé veszélyes modellanyagot, ami veszélyes aromás alkotókat nem tartalmaz, így rutin talajfizikai vizsgálatokra is kockázatmentesen alkalmazható – ugyanakkor fizikai és kémiai tulajdonságai hasonlóak a kis szénatomszámú kőolajpárlatokhoz. Ezt a modell-folyadékot találtuk meg a MOL Rt. Dunai Finomítójában gyártott DUNASOL 180/220 fantázianevű (mosóbenzinként, hígítóként forgalmazott) termékben.

A **harmadik** opponensi **kérdés** a következő volt: *„Az értekezésben említett Magyarországi Részletes Talajfizikai és Hidrológiai Adatbázis (MARTHA) adatállományához milyen módon lehet hozzáférnie az érdeklődő szakembereknek?”*

Válaszom:

A Magyarországi Részletes Talajfizikai és Hidrológiai Adatbázis (MARTHA) adatállományához történő hozzáférés – mivel egy OTKA kutatási pályázat eredményeképp jött létre – ingyenes. Használatának feltétele, hogy az igénylő kérvénnyel forduljon az adatgazdához (az MTA ATK TAKI részéről hozzám), melyben leírja, hogy mely kutatáshoz, milyen célra, milyen adatokra van szüksége és nyilatkozik arról, hogy az adatokat nem adja tovább, és egyéb célra nem használja, illetve publikáláskor megfelelőképpen hivatkozza azt. Ezután a regisztráció után az igénylő a kért adatokhoz hozzáférhet.

Opponensem **negyedik kérdés**ként a következőket fogalmazta meg: *„Kiemelkedő és nagyon jól hasznosítható tudományos eredménynek tartom, hogy a szerves folyadék vezetőképesség becslésére a pedotranszfer függvényeknél is megbízhatóbb módszert kínál a talajok légáteresztő képességének a meghatározása. Ezen állítás igazolása mesterséges talajszlopokon laboratóriumi körülmények közt elvégzett méréseken alapszik. Az értekezés megemlíti, hogy ezen a területen igazi áttörést a terepi módszertan validálása jelentheti majd. Történt-e ezen a területen valamilyen előrelépés az értekezés benyújtása óta?”*

Válaszom:

A talajok szerves folyadékvezető képességének becslésére valóban megbízható módszernek tűnnek a mért légáteresztő képesség értékek alapján történő számítások. A légáteresztő képességet mérő készülék (a német UGT által gyártott PL-300 típusú műszer) alkalmas mind laboratóriumi, mind pedig terepi vizsgálatokra. A terepi vizsgálatok közül kiemelendő az ún. lándzsa-szondás módszer, mellyel egy talajfuratban a különböző mélységű talajrétegek légáteresztő képessége mérhető. Kifejlesztésében és tesztelésében együttműködtünk a gyártóval.

A kérdésben feltett validálás során a problémánk tehát nem a terepi körülmények közt történő légáteresztő képesség méréssel adódott, hanem a terepi szerves folyadékvezető képesség méréssel. A mai napig nem találtunk megfelelő megoldást arra, hogy természetes körülmények között, de a környezetszennyezés kockázatának elkerülésével mérni tudjuk az egyes talajrétegek szerves folyadékvezető képességét. Így a becslésre vonatkozó tapasztalataink egyelőre csak laboratóriumi körülményekre korlátozódnak.

Végezetül opponensem **ötödik kérdése** ez volt: *„A talajok szerves folyadék-visszatartó és folyadékvezető képességének meghatározására használt DUNASOL NAPL modellfolyadékkal végzett mérések a víznél kisebb sűrűségű szénhidrogénszarmazékok szennyeződésterjedési folyamatainak leírásánál jelentenek fontos új eredményeket. Sajnos igen jelentős a víznél nehezebb sűrűségű DNAPL szennyeződéseknek a jelenléte a különböző felszín alatti közeget érintő környezetvédelmi problémáknál. A DNAPL folyadékok esetére hogyan lehetne kiterjeszteni azokat a vizsgálatokat és összefüggéseket, amelyeket a DUNASOL szerves folyadék alkalmazása során kapott?”*

Válaszom:

A szilárd fázis–szerves folyadékfázis kölcsönhatások tanulmányozásának legfőbb tanulsága, hogy ezek lényegesen eltérnek a szilárd fázis–vizes oldatfázis kölcsönhatásoktól. Nem következik be ugyanis pl. a vizes rendszerekre jellemző agyagásvány duzzadás, szerkezet széttiszapolódás, így a talajok pórusrendszerének pórusméret-eloszlása is különbözően alakul a folyadéktelítések során. Nem alkalmazhatók tehát (vagy legalábbis csak nagy pontatlansággal alkalmazhatóak) a hagyományosan elterjedt, a víztartó és vízvezető képesség értékek átskálázási módszerei (Leverett-féle és Kozeny–Carman-féle becslések) a szerves folyadék-visszatartó és folyadékvezető képesség értékek becslésére. Helyettük alternatív, pedotranszfer függvényeken alapuló becslési módszereket javasoltunk. Ezeket a DUNASOL 180/220 modellfolyadékkal mért adatok adatbázisba rendezésével, az adatbázison végzett statisztikai vizsgálatok segítségével képeztük. Első lépésben tehát a PTF-ek alkalmazásával a modellfolyadéokra vonatkozó szerves folyadék visszatartást és vezetőképességet tudjuk becsülni. A becslési folyamat második lépése lehet a DUNASOL 180/220 modellfolyadékra számolt értékek átskálázása (Leverett-féle és Kozeny–Carman-féle módszerekkel, a folyadékok eltérő fizikai tulajdonságai alapján) a vizsgálni kívánt szerves folyadékszennyezőre. Ez esetben már az átskálázási módszer indokolt, hiszen a különféle apoláros szerves folyadékok a fáziskölcsönhatások szempontjából hasonlóan viselkednek (a folyadéktelítések során hasonlóan alakul a differenciált porozitás). Ebből a szempontból elméletileg hasonlóan viselkednek a víznél könnyebb (LNAPL) és a víznél nehezebb (DNAPL) kőolajszármazékok, csupán az átskálázás során figyelembe vett fizikai tulajdonságaik változóak. Így a DUNASOL 180/220 modellfolyadékra kidolgozott összefüggések elvileg a DNAPL szennyezők környezetvédelmi problémáinak megoldása során is hasznosíthatóak.

Végül, még egyszer köszönöm opponensemnek építő bírálatát és feltett kérdéseit.

Budapest, 2018. november 3.

Dr. Makó András Szabolcs