

Geochemie exogenních procesů

11. Modelování II.

Proberte ve dvojicích, co si představujete pod následujícími pojmy:

- Korelace
- Statistická chyba
- Podobnost
- Blízkost hodnot
- Malý rozdíl
- Velký rozdíl
- Vyhlazení dat
- Odchylka
- Selhání lidského faktoru

Projděte si texty 1-3

- **Odpovídají na otázku „Co může způsobovat rozdíl mezi metodami určení hledaných parametrů?“**
- Zaměřte se na to, co vnímáte jako slabiny.

Projděte si text 4

- **Odpovídá na stejnou otázku „Co může způsobovat rozdíl mezi metodami určení hledaných parametrů?“**
- V čem je text lepší? A proč?
- Má také nějaká slabá místa?

Vyhodnocení

- Zkuste sepsat tři nejčastější chyby v textech s vyhodnocením kinetiky.

GEOCHEMICKÉ MODELOVACÍ NÁSTROJE

PHREEQC

- Volně dostupný ve verzi pro Windows, Mac i Linux
- Kódování
- Speciace, interakce, mixování, kinetika, reakčně-transportní výpočty
- Možnost programování v Basicu, propojení s R
- Existuje GUI pro Windows

Geochemist's Workbench

- Placený software (předplatné)
- Grafický interface – uživatelsky přívětivější
- Speciace, diagramy, reakce, kinetika, tabulkový procesor...

Modelování

- Bez ohledu na použitý software je potřeba mít představu, co dělám a co zjišťuji 😊

Speciace v mořské vodě

Table 9. Seawater composition.
[Concentration is in parts per million (ppm) unless specified otherwise]

Analysis	PHREEQC notation	Concentration
Calcium	Ca	412.3
Magnesium	Mg	1291.8
Sodium	Na	10768.0
Potassium	K	399.1
Iron	Fe	0.002
Manganese	Mn	0.0002
Silica, as SiO ₂	Si	4.28
Chloride	Cl	19353.0
Alkalinity, as HCO ₃ ⁻	Alkalinity	141.682
Sulfate, as SO ₄ ²⁻	S(6)	2712.0
Nitrate, as NO ₃ ⁻	N(5)	0.29
Ammonium, as NH ₄ ⁺	N(-3)	0.03
Uranium	U	0.0033
pH, standard units	pH	8.22
pe, unitless	pe	8.451
Temperature, °C	temperature	25.0
Density, kilograms per liter	density	1.023

Výpočet speciace

SOLUTION 1

temp	25
pH	8.22
pe	8.451
redox	pe
units	ppm
density	1.023
Ca	412.3
Mg	1291.8
Na	10768
K	399.1
Fe	0.002
Mn	0.0002
Si	4.28
Cl	19353
Alkalinity	141.682 as HCO ₃ ⁻
S(6)	2712
N(5)	0.29
N(3)	0.03
-water	1 # kg

Interakce fází

- Voda v rovnováze s CO₂

```
SOLUTION 1
    temp      25
    pH        7
    pe        4
    redox     pe
    units     mmol/kgw
    density   1
    -water    1 # kg
EQUILIBRIUM_PHASES 1
    CO2 (g)   -3.4 10
SAVE Solution 1
END
```

Interakce fází

- Voda v rovnováze s CO₂ a albitem

```
USE Solution 1
EQUILIBRIUM_PHASES 2
  Albite      0 10
  CO2(g)     -3.4 10
SAVE Solution 2
END
```

- Rovnováha s CO₂, albitem, kaolinitem a gibsitem

```
USE Solution 2
EQUILIBRIUM_PHASES 3
  CO2(g)     -3.4 10
  Albite      0 10
  Gibbsite   0 10
  Kaolinite   0 10
END
```

Mixování dvou typů vod

- Viz příložené soubory v informačním systému