

## VÍZKÉMIAI PARAMÉTEREK VIZSGÁLATA A DUNÁNTÚLI- KÖZÉPHEGYSÉGBEN<sup>1</sup>

KOVÁCS JÓZSEF-KONCZ DÁVID

ELTE Alkalmazott és Környezetföldtani Tanszék, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/C, kevesolt@geology.elte.hu

*Abstract: Several hydro chemical parameters were measured on a regular basis in various karstaquifers of the Transdanubian Mountains (Central-Western Hungary) during the period of 1980-2002. Measurements included pH, conductivity, temperature, calcium-, magnesium-, sulphate-, chloride- and hydrogen carbonate-content. Our investigation was based on the statistical evaluation of these data. The main question was whether sampling frequency is appropriate to describe processes taking place in the mountains. The basic function of spatial analysis, the so-called variogram, was used for evaluation. With this function the required calculations can be performed, even if equidistant data are not available. On the basis of our results it can be stated that it is only in the case of a few parameters that sampling in four-week-periods provides adequate information. For all other parameters more frequent sampling would be necessary. The range is 1500 m in the area.*

### Bevezetés

A Dunántúli – Középhegység DNY-i részének felszín alatti vizeinek minőségéről napjainkban rendelkezésre álló adattömeg lehetővé teszi, a mintavételezés gyakoriságának vizsgálatát, továbbá lehetőséget nyújt egy- és sokváltozós adatelemző módszerek alkalmazására a kémiai komponensek tér- és időbeli eloszlásának, változékonyságának és hasonlóságának vizsgálatára.

A vízminőség-ellenőrzés egyik legfontosabb része a mintázás és annak gyakorisága. A mintával szembeni legfontosabb elvárás, hogy tükrözze a statisztikai sokaság összes lényeges tulajdonságát és tegye lehetővé a jövőbeli várható értékek becslését. E cél eléréséhez olyan reprezentatív mintára van szükség, ami eleget tesz a vizsgálati cél követelményének. Például napi nagyságrendű folyamatok paramétereinek becsléséhez nem alkalmasak hetenkénti mérések. Periodikus folyamatok mintavételi gyakoriságára Shannon mintavételi tétele ad iránymutatást. E szerint, ahhoz, hogy egy idősből az eredeti periodikus jelet vissza tudjuk állítani, a periódus idő felétől kisebb mintavételezési idővel kell mintát venni. Abban az esetben, ha az eredeti jelet nem tudjuk visszaállítani, a rendelkezésre álló adatmennyiség kevés, azaz alulmintavételezés történt. Az elmondott elvek alapján kérdés: milyen gyakran mintázzunk egy folyamatot ahhoz, hogy vizsgálatunk célját elérjük, és a jövő változásaira is becslést tudjunk adni?

---

<sup>1</sup> A tanulmány a TO47086 számú OTKA pályázat támogatásával készült.

Szemlélet alapján is belátható, hogy minél nagyobb egy adott paraméter  $h$  (idő vagy tér) távolságon belül bekövetkező változékonysága, annál sűrűbb mintavételezés szükséges. A  $h$  távolságon bekövetkező változékonyságnak leírására számos függvény ismeretes. Esetünkben a térstatisztika alapfüggvényét, a variogram függvényt használjuk fel a mintavételezés gyakoriságának becslésére (MÁRKUS *et al.* 1999, DRYDEN *et al.* 2004).

### A variogram függvény és tulajdonságai

A variogram és a belőle leszarmaztatott félvariogram matematikailag a következő módon értelmezhetők (FÜST 1997.). Jelölje  $Z(x)$  és  $Z(x+h)$  valamely vizsgált paraméter egymástól  $h$  távolságban lévő értékeit. A  $h$  távolság lehet térben vagy időben. A  $Z(x)$  és  $Z(x+h)$  értékek különbségeinek szórásnégyzete:

$$D^2[Z(x) - Z(x+h)] = D^2[Z(x)] + D^2[Z(x+h)] - 2COV[Z(x), Z(x+h)]$$

Azonos sokaságba tartozó minták esetében feltételezhetjük, hogy  $D^2[Z(x)] = D^2[Z(x+h)]$ , így  $D^2[Z(x) - Z(x+h)] = 2D^2[Z(x)] - 2COV[Z(x), Z(x+h)] = 2\gamma(h)$ . A  $2\gamma(h)$  függvényt a paraméter variogramjának, a  $\gamma(h)$  függvényt pedig félvariogramjának nevezzük. Amennyiben bevezetjük a  $D^2[Z(x)] = D^2(x)$  egyszerűsített jelölést, akkor felírható, hogy:  $\gamma(h) = D^2(x) - g(h)$ . Normális eloszlású paraméter diszkrét mintái esetén, ha az adatképek száma  $N$ , az empirikus félvariogramot a következő "Matheron-féle" algoritmussal számítjuk:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} [Z(x_i) - Z(x_{i+h})]^2$$

Nem normális eloszlás esetén, annak biztosítására, különböző transzformációk alkalmazására nyílik lehetőség, de ugyanakkor a geostatistikai irodalomban számos olyan publikáció olvasható, amely fölöslegesnek tartja az eloszlástípus figyelembe vételét (CLARK 1979, CRESSIE 1993).

A gyakorlatban  $Z(x_i) \geq 0$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ )  $\sigma^2[Z(x)] \geq g(h) \geq 0$ , így a félvariogram elméletileg a  $0 \leq \gamma(h) \leq \sigma^2[Z(x)]$  tartományban vehet fel értékeket. A függvény legfontosabb tulajdonságai az alábbiak:

- Folytonosság a  $\gamma(h)$  függvény növekedésének mértékéből látható. Abban az esetben, ha a vizsgált folyamatban gyors változások következnek

be, a  $\gamma(h)$  függvény nem az origóból, hanem  $C_0 \geq 0$  értékről indul (neve röghatás), majd emelkedő tendenciát mutat.

- Ha a félvariogramnak nincs határozott felszálló ága, a tapasztalati félvariogram pontjai egy, a  $h$  tengellyel párhuzamos egyenes környezetében helyezkednek el. Ekkor a folytonosság teljes megszűnéséről beszélünk.

- Hatástávolság alatt azt a távolságot értjük, amelyen belül a minta sajátos jellemvonásai még érzékelhetőek. Ez annak a pontnak az abszcisszája, aminél a függvény értéke állandósul.

- Ha a félvariogram kezdeti emelkedés után  $h \rightarrow \infty$  esetén állandósul, akkor a paraméter stacionárius. A  $\gamma(h)$  függvény minden határon túli monoton emelkedése (ha  $h \rightarrow \infty$  akkor  $\gamma(h) \rightarrow \infty$ ) a paraméter instacionaritására utal. Megfelelő trendillesztés utáni maradék stacionárius lesz. A stacionárius tulajdonságú paraméterek empirikus félvariogramjai egy  $C_0 \geq 0$  röghatás értékről indulva, emelkedő szakasz után a szórásnégyzet környezetében undulálnak.

- A félvariogram  $C + C_0$  értéke, amely megközelítőleg a szórásnégyzettel egyezik meg, a *küszöbszint*. Maga a  $C$  érték ugyanakkor a redukált küszöbszint.

Az empirikus félvariogramok eltérő típusú elméleti függvényekkel közelíthetők, áttekintésük itt nem célunk. (*DEUTSCH-JOURNAL* 1992, *WACKERNAGEL* 1998).

Amennyiben a vizsgált paraméter térbeli helyzetű, hatástávolsága lehet iránytól független (izotróp), vagy iránytól függő (anizotrop). A különböző irányokban számolt hatástávolságokat kiegyenlítő ellipszissel szokták helyettesíteni, ahol meg lehet adni a kis és nagy tengely arányát és az adott koordináta rendszerben elfoglalt helyzetét.

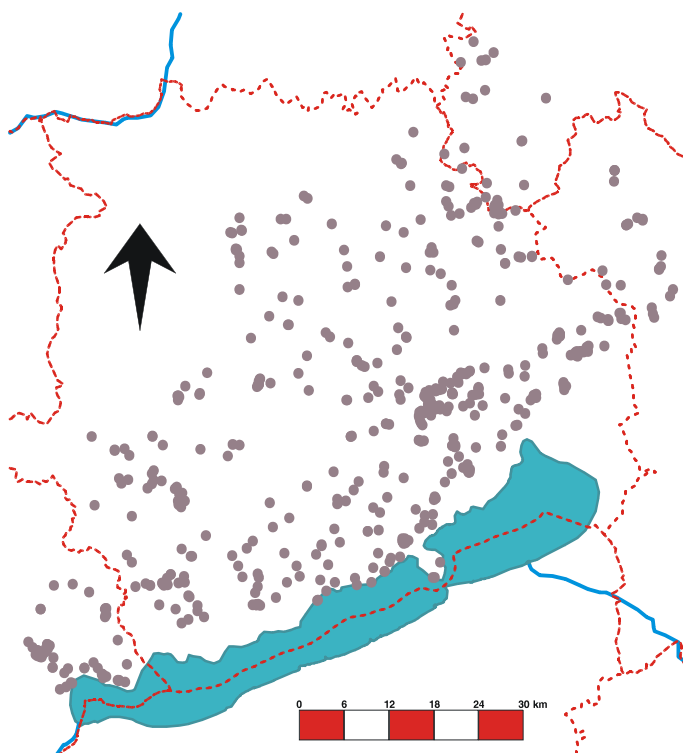
A mintavételezés gyakoriságának becslésére azt a tulajdonságot használtuk fel, miszerint a hatástávolságon (hatásidőn) kívül eső minták gyakorlatilag függetleneknek tekinthetők. Más szavakkal: a hatástávolságon (hatásidőn) túli mintavételezés esetén a minta csak a közvetlen környezet állapotáról ad felvilágosítást, ily módon idősorok esetén gyakorlatilag nem tudunk meg semmit a folyamatok belső struktúrájáról.

### **Jellemző példák a vizsgált terület empirikus és elméleti félvariogramjaiból**

A mintavételezés gyakoriságának megállapítására a Bakony, Balatonfelvidék Keszthelyi-hegység területéről (*1. ábra*) származó adatsorok álltak rendelkezésre. A mintavételezések vízmű kutakból történtek. A kémiai ana-

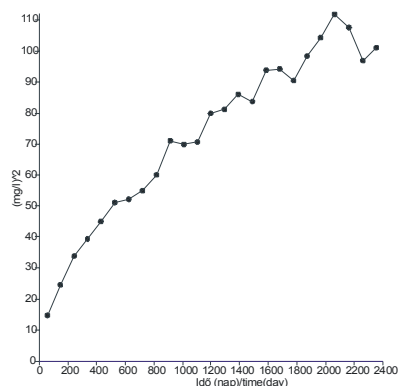
lízisekből a következő paramétereket használtuk fel: nátrium, kálium, kalcium, magnézium, ammónia, klorid, szulfát, hidrogénkarbonát, pH, fajlagos vezetőképesség, nitrát, víz hőmérséklet, keménység. Összesen 424 pontban volt mérés. Ezek közül 33-ban 100-nál több és 353 pontban 20 alatt volt a mérések száma, míg 266 darab kútban csak egyetlen mintavételezés történt. A vizsgált időszak 1980-2002. Ezekből a tényekből következik, hogy az optimális mintavételi gyakoriság becslése sem térben sem időben nem egyszerű.

A paraméterek empirikus félvariogramjának számítása során, több alkalommal folyamatosan emelkedő, trend jelenlétére utaló eredményt kaptunk. Ilyet mutat be a 2. ábra. A vízszintes tengely mértékegysége idő (nap), a függőleges a vizsgált paraméter mértékegységének négyzete (a nitrát esetében  $[\text{mg/l}]^2$ ).



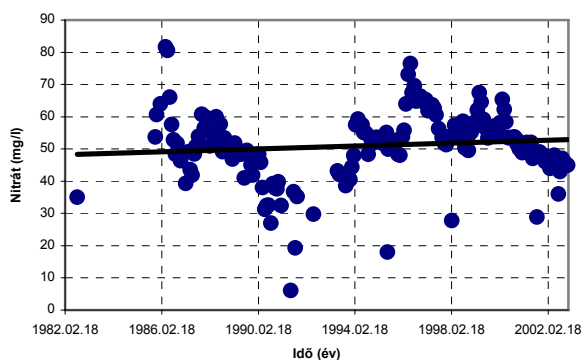
1. ábra A vizsgálatok térsége, szaggatott vonallal a megyehatárok, pontokkal pedig a területen elhelyezkedő kutak vannak ábrázolva.

Figure 1 Map of the investigated area. Dotted lines show the county boundaries, while points show the wells in the area.



2. ábra. Az f181600003 jelű kútban mért nitrát idősor (1982-2002) empirikus félvariogramja  
 Figure 2 Empirical semi-variogram of the time series of nitrate in well f181600003.

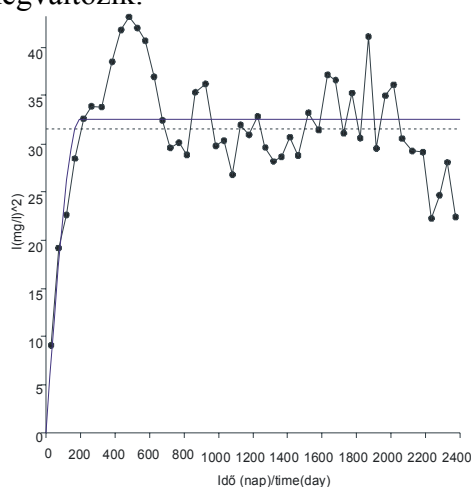
Annak bemutatására, hogy a trend valóban jelen van az idősorban a 3. ábra mutatja be a nitrát paraméter mért idősorát, valamint egy illesztett elsőfokú trendet. A nem stacionárius folyamatok paramétereire számított empirikus félvariogram gyakran nem teszi lehetővé a hatásidő (vagy hatástávolság) pontos meghatározását. A számításokat ebben az esetben meg kell ismételni a trend eltávolítása utáni maradékra.



3. ábra. Nitrát paraméter mért idősora és az illesztett elsőfokú trend.  
 Figure 3 The time series of nitrate and the fitted linear trend.

Az illesztett elméleti félvariogram úgynevezett szférikus típusú. Az itt vizsgált esetben a röghatás értéke 0. Ez azért is említésre méltó, mert a röghatásban jelenik meg egyrészt a paraméter mérése során, mind a mérési módszerből, mind a műszer pontatlansága miatt elkövetett hiba, másrészt a paraméter  $\partial h$  idő vagy térbeli távolságon bekövetkezett változása. A meghatározható legnagyobb hatástávolság ebben az esetben 182 nap volt ekkor az illesztett félvariogram gyakorlatilag egybeesett a szórásnégyzettel (szaggatott vonal). Az éves periódus idővel jellemezhető idősori folyamatokra ez

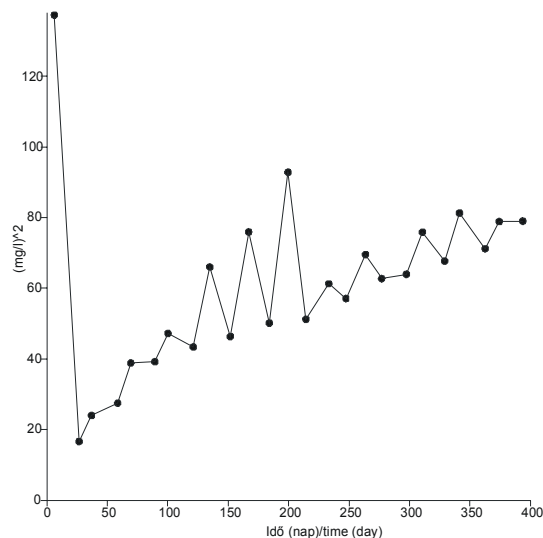
a hatásidő egybevág Shannon mintavételezési tételében megfogalmazottakkal. Ha mintavételezési szempontból értékeljük az eredményt, nyilvánvalóvá válik egy ilyen ritka mintavételezés csak az éves „nagyságrendű” folyamatokról ad információt. Ahhoz, hogy kisebb nagyságrendű folyamatokra is rálátásunk legyen, olyan mintavételezési frekvenciát kell alkalmazni, ahol az egymás után következő mintavételezések a kisebb nagyságrendű folyamatok tulajdonságait is képesek követni. Ezért az empirikus félvariogramból a legkisebb hatásidőt kell becsülni. A 4. ábra a félvariogram 19,5 értékénél törést mutat, ami azt jelenti, hogy a vizsgált folyamat ennél illetve a hozzá tartozó 58 napos hatásidőnél megváltozik.



4. ábra. Empirikus és illesztett félvariogram a f181600003 számú kútban mért nitrát idősorának (1982-2002) trend eltávolítás utáni maradékán  
 Figure 4 Empirical semi-variogram and the fitted model of the time series of nitrate in well f181600003, after trend removal.

Ilyen esetben, úgynevezett több küszöbös félvariogram illesztését kellett volna elvégezni. Erre azonban a világban jelenleg elérhető software-k még nem nyújtanak lehetőséget. A több küszöbös struktúrák jelenlétét úgy magyarázzuk, hogy az eredő folyamatot több hatás eredőjeként látjuk és az egyes hatások hatásidejét láthatjuk ilyen módon viszont. Ez a kisebb hatásidő „nagyobb felbontású” számítások elvégzésével nyilvánvalóvá vált (vesd össze a 6. ábrával).

Számítási tapasztalataink azt mutatják, fontos foglalkoznunk az úgynevezett kiugró értékek problémájával. Ekkor az empirikus félvariogram függvény csökkenő tendenciával indul. Ilyen esetben nem határozható meg hatásidő vagy hatástávolság (5. ábra).

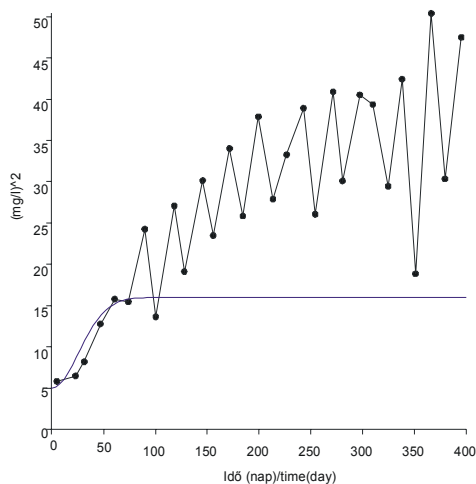


5. ábra. f181600003 jelű kútban mért nitrát idősor (1982-2002) empirikus félvariogramja.  
Figure 5 Empirical semi-variogram of the time series of nitrate in well f181600003.

A 4. és a 2. ábra bár ugyanarra a paraméterre vonatkozik, mégis jelentősen eltérnek egymástól. Ennek oka, hogy míg a 2. ábrán 2400, addig a 4. ábrán 400 napra vonatkozik a számítás. Ennek következménye, hogy a 4. ábrán az empirikus félvariogram egy pontja sokkal kisebb idő intervallumra (területre) vonatkozik, ezért a kisebb mértékű kiugró értékek nem átlagolódnak ki, tehát a becslés érzékenyebb minden olyan értékre ami az adott paraméter „viselkedéséből” nem következik. A 2. ábrán látható néhány ilyen (mint például az 1998. 02. 18-án mért). Ezeknek a kirívóan alacsony értéknek az eltávolítása után, egy értékelhető empirikus félvariogramot lehetett számolni. Az elméleti függvény illesztésével pedig 58 napos hatásidő becslése vált lehetővé (6. ábra), ami egybeesik a több küszöbös struktúrájánál meghatározottal.

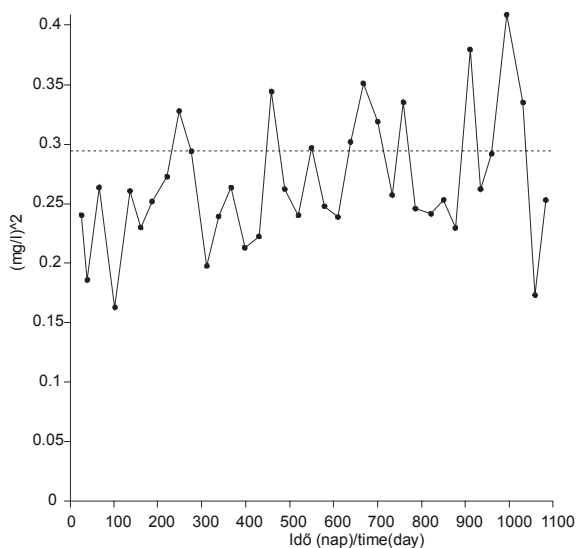
A vizsgálatok során két féle esetet lehetett megkülönböztetni arra vonatkozóan, amikor az empirikus félvariogramnak nem volt felszálló ága. Az egyikben a folyamatot, mint kiugró értékekkel rendelkezőt láttuk. Gyakran azonban az adat eltávolítás sem segített. A matematikai értelemben szélső értékek eltávolításával, olyan mértékű adatritkítást értünk el, hogy lehetetlenné vált a hatásidő meghatározása. A másik esetben nem vettünk ki adatot az idősből, de felszálló ág hiányában a hatásidő becslését nem tudtuk elvégezni. Ilyen példát mutat be a 7. ábra, a k182120003 kút kálium idősorára. Érzékelhető, hogy az empirikus félvariogram értékek a szórásnégyzet körül helyezkednek el. Amikor ezt az állapotot kapjuk, a folytonosság teljes megszűnéséről beszélünk. Ebben az esetben az illeszthető elméleti

félvariogram egybeesik a szórásnégyzettel és felszálló ága nincs. Ekkor a mintavételezés gyakorisága elégtelennek minősíthető, a vizsgált paraméter alulmintavételezett, változékonysága nagyobb, mint amit a mintavételezés követni tud.



6. ábra. f181600003 számú kútban mért nitrát (1982-2002) idősor trend eltávolítás utáni maradékának empirikus félvariogramja.

Figure 6 Empirical semi-variogram of the time series of nitrate in well f181600003 after trend removal.



7. ábra. Empirikus félvariogram a k182120003 jelű kút kálium idősorára, 1986-1995.

Figure 7. Empirical semi-variogram of the time series of potassium in well k182120003 between 1986 and 1995.

Eddigiekben a vizsgált paraméterek időbeli változékonyságát vizsgáltuk. Szerettünk volna becslést adni arra vonatkozóan is, hogy egy paraméternek mekkora a hatásterülete, más szavakkal, mekkora az a távolság,



ahol még a minták hatást gyakorolnak egymásra. A számításokat az időben ritka és rendszertelen mintavételezés jelentősen megnehezítette. Ideális esetben ugyanis úgy lehetne a számításokat elvégezni, ha a mintavételezés minden mintavételi pontban, minden paraméterre egy időben történt volna. De ez nem így volt. Egyetlen napon kevés számú (10 körüli) kútban történt mintázás. Ezért a mintavételi pontok számának növelése érdekében kitágítottuk a vizsgálatba bevont pontok körét, a hatásidők becslési eredményeinek figyelembe vételével. A következőt tettük: kiválasztottuk azt a napot, amelyhez a mintavételezések (időben) a legközelebb estek a legkisebb abszolút értékek elve alapján. Tekintsük ezt a 0 időpont síkjának. Ettől pozitív és negatív időtartományban kiválasztottuk azokat a kutakat ahol történt még mérés. Az időtartomány határait az időbeli hatástávolságok jelölték ki. Ugyanis az adott paraméter hatásidejét nem léphettük túl, hiszen akkor a minták nem gyakorolnak hatást egymásra. (Az ily módon kiválasztott mintákból számított értékek hordoznak magukban az eredményre is hatással levő pontatlanságot. De az adott helyzetben a kapott eredményeket még e közelítés mellett is elfogadhatónak tartjuk). A 0 idősík időpontja, az időtartomány és a megfigyelési pontok száma minden paraméter esetében változott. A részletekről az *I. táblázat* ad felvilágosítást.

*I. táblázat*

*Table I.*

*„Nulla” időpont és a hozzá tartozó hatásidők, valamint az ezen „belül eső” minták száma  
„Zero” date and the related ranges (in time). Number of samples in range.*

paraméter	Na <sup>+</sup>	K <sup>+</sup>	Ca <sup>2+</sup>	Mg <sup>2+</sup>	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	Cl <sup>-</sup>	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	Hőm.	pH	Fvez.	Kem
távolság (nap)	23	47	26	29	33	22	45	24	37	36	29	23
mintaszám	23	23	101	95	105	75	78	98	37	54	108	74
„0” időpont	1998.11.25	1998.12.01	1994.12.09	1995.01.01	1994.12.10	1992.12.16	1994.12.10	1992.12.09	1992.07.16	1998.11.05	1994.12.14	1992.12.15

## Eredmények

A Dunántúli-középhegység DNy-i részének 10 kútjából származó vízkémiai paraméterek idősoraira készültek variogram számítások. A mérési helyek és a mért komponensek elvileg 120 hatásidő becslését tették volna ideális mintavételezési gyakoriság mellett lehetővé. 64 idősorra születet értékelhető eredmény (II. táblázat).

II. táblázat  
Table II.

Hatásidők napban  
Ranges in day unit

kút	Na <sup>+</sup>	K <sup>+</sup>	Ca <sup>2+</sup>	Mg <sup>2+</sup>	Kem.	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	Cl <sup>-</sup>	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	pH	Fvez.	hőm.
f180690011			25	25			21		28		29	
f181600003	37	46		14	22	28	39	45	45	50	45	
f181710001	22	45	35	38		37		56	37		32	
k180830049			31	43	27							
k180830051			30	20	23	34			23	32		40
k180830053				25	35	32	20		21	35	27	38
k181640009				42				52	18			
k181650020	43	40	65	29	29	62			35		18	
k181930002		30	28	32	39		48	44	22	30	33	32
k182120003			57	57		43	47	60	38	44	40	42

Megjegyzés:

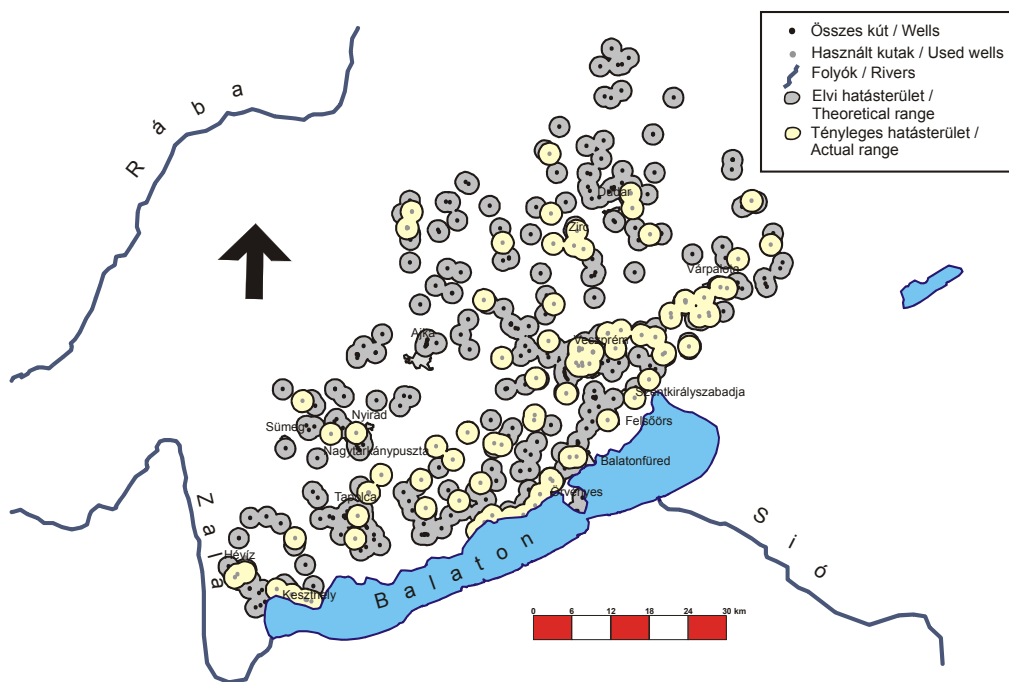
Az értékek napban értendők

Values are in day

Az eredményeket értékelve, elmondható, hogy több paraméterre, illetve több mintavételi pontban a hatásidő sokszor nem volt becsülhető, ezért olyan mintavételi gyakoriság, aminek következtében a statisztikai sokaság az adott paraméter összes lényeges tulajdonságát tartalmazza, és lehetővé teszi a jövőbeli várható értékek becslését nem adható meg. Annak elemzésére, hogy mely paraméterek változékonnyabbak, az egyes paraméterekre jutó kevés eredmény miatt nem lehetett vállalkozni. Az összes becsült hatásidő átlaga 36, szórása 11 nap. Az átlag mögött 14 napos legkisebb és 65 napos legnagyobb érték húzódik. Mivel sztochasztikus kapcsolatról van szó a becsült hatásidők nem tekinthetők állandóknak. Ezért az átlagos értéknél mintegy 25%-al kisebb mintavételezési gyakoriságot javasolunk és úgy véljük célszerű lenne alkalmazni a 28 napos, vagy ennél kisebb mintavételi gyakoriságot.

A térbeli hatástávolság meghatározása a legkisebb küszöbre való illesztéssel történt. A nem egy időben vett minták miatt ez, kisebb hibával terhelt, de úgy véljük becsült értéknek megfelelő. Regionális léptékű küszöbre történő illesztést követően több paraméter esetében sikerült az ani-

zotrópia meghatározása is. Az illesztett ellipszisek nagytengelyeinek irányai 60 fok körül alakulnak, ami egybeesik a Dunántúli-középhegység fő szerkezeti vonalaival. A részletes eredményeket mutatja be a *III. táblázat*. Az anizotrópia mértékét az ellipszis kis és nagytengelyeinek aránya fejezi ki. A megadott hatástávolságok a legkisebb küszöbre vonatkoznak, melynek értéke átlagosan 1500 m körüli van. A *8. ábra* bemutatja a kalcium hatástávolságát a számításához felhasznált kutak körül, valamint azt az elvi hatásterületet, ami akkor jellemezné a területet, ha az összes kút szolgáltatott volna mérési eredményt.



8. ábra A kalcium tényleges hatástávolsága és az elvi hatástávolság  
 Figure 8 Actual range of calcium and theoretical range

III. táblázat  
Table III.

Térbeli hatástávolságok tulajdonságai  
Features of spatial ranges

paraméter	Na <sup>+</sup>	K <sup>+</sup>	Ca <sup>2+</sup>	Mg <sup>2+</sup>	Cl <sup>-</sup>	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	Kem.	pH	FVez.	hóm.
hatástávolság	nm	nm	1700	2100	1900	1100	1000	1500	1350	nm	1800	nm
anizotrópia	nm	nm	van	van	nincs	van	nincs	van	van	nm	van	nm
tengelyarány	-	-	2,1	2	-	2	-	1,6	2	-	2,8	-
nagytengety irány	-	-	51-231	66-246	-	73-253	-	63-243	60-240	-	62-242	-
kistengely irány	-	-	141-321	156-336	-	163-343	-	153-333	150-330	-	152-332	-

## IRODALOM

- FÜST, A. (1997): Geostatisztika - Eötvös Kiadó, Budapest p. 427.
- CLARK, I. (1979): Practical geostatistics.- Applied Science Publishers LTD. London, p. 442.
- CRESSIE, N. (1993): Statistics for Spatial Data - Revised Edition, Wiley, New York, p. 928
- MÁRKUS, L.-O. BERKE-J. KOVÁCS-W. URFER (1999): Analysis of spatial structure of latent effects governing hydrogeological phenomena - Environmetrics 10 p. 633-654.
- DEUTSCH, C. V.-JOURNEL, A. (1992): Geostatistical Software Library and User's Guide (GSLIB). - Oxford University Press, New York. p. 369
- DRYDEN, I. L.-MARKUS, L.-TAYLOR, C. C.-KOVACS, J. (2005): Non-stationary spatio-temporal analysis of karst water levels - Applied Statistics, 54. Part 3, p. 1-18.
- WACKERNAGEL, H. (1998): Multivariate Geostatistics - Springer Verlag, Berlin. p. 403