

СПОСОБ РАСЧЕТА ЭКОЛОГИЧЕСКИХ НОРМАТИВОВ СОДЕРЖАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ /КОМПОНЕНТОВ В СИСТЕМЕ ПОЧВА - РАСТЕНИЕ

Самохвалова В. Л.¹, Филатов В. П.¹, Самохвалова П. А.²

¹Институт почвоведения и агрохимии им. А. Н Соколовского,

²Физико-математический лицей №27, г. Харьков,

Важной составляющей экологического нормирования качества почв, которые подвержены загрязнению тяжелыми металлами (ТМ), является мониторинг и прогнозирования загрязнения. Данные относительно элементного состава системы почва-растение являются необходимыми при разработке нормативно-методического обеспечения системы мониторинга окружающей среды, разработки стандартных образцов (СО) состава естественных и техногенных сред как основного средства обеспечения корректности аналитической информации. Нормативы содержания микроэлементов (МЭ) и ТМ /компонентов почв являются важными для диагностики экологических нарушений химического состава компонентов биокосных и биологических систем, их оценки, разработки объективных показателей фонового и кризисного мониторинга почв, растений и сопредельных сред.

Из анализа данных мониторинга почв и растений вытекает два принципиальных момента – необходимость установления закономерностей, которые определяют содержание ТМ и МЭ в системе почва-растение, используя минимум переменных; сложность оценивания содержания МЭ и ТМ (норма, недостаток, избыток) вследствие отсутствия как определенности связи между допустимым экологическим состоянием почв и допустимым антропогенным влиянием на почвы, так и теории количественной оценки отклика элементов экосистем на влияние. Аппроксимация экспериментальных данных функциями из класса логистических не учитывает возможное стимулирующее действие малых доз МЭ в системе. Поэтому при обобщении результатов мониторинга возникают трудности, которые связаны с тем, что отклики биологической системы на влияния являются различными и динамичными. Возникает проблема обобщения разных откликов при условиях неопределенности, существование нелинейных связей в системе почва – растение. Пути её решения является разработка новых способов, подходов для введения шкалы качества с целью обеспечения однозначности оценок показателей содержания ТМ и экологического состояния почвы при загрязнении. Разработка новых способов и подходов относительно расчетов экологических нормативов содержания макро - и МЭ /компонентов в системе почва-растение

является актуальной как в теоретическом плане (разработка подходов к определению нормы функционирования систем) так и в прикладном аспекте их воплощения (расчет статистической нормы содержания элементов /компонентов систем любой природы).

Качество информации при расчете нормативов содержания МЭ и ТМ/ компонентов в системе почва-растение определяется требованиями к полноте данных, точности результатов, экспрессности их получения. Известен способ оценки результатов установления аттестованных значений состава природных сред [1], базирующийся на статистических методах обработки данных и установлении закономерностей функций распределения результатов в аналитических интервалах методик выполнения измерений. Недостатком такого способа являются не учет частой асимметричности и многомодальности распределения значений показателей содержания МЭ и ТМ в системе почва – растение. Поэтому при статистической обработке выборок данных, возникают погрешности в оценке их достоверности. Для предотвращения некорректности аналитических сравнений, недостоверных выводов необходимо выявление и исключение из дальнейших расчетов недостоверных результатов измерений, а также систематических погрешностей.

Наиболее близким по технической сути и результату, который достигается, является способ, который предусматривает использование критерия *Abbey* [1]. Однако при возможности оценки долевого вклада каждого компонента смеси отдельно, нами установлена связь критерия *Abbey* со значением стандартного отклонения, что является индикатором влияния числа результатов в выборке на результативный признак аттестованного значения содержания элемента /компонента в системе. При условиях, как правило, ограниченности данных содержания МЭ и ТМ /компонентов в средах, отрицательное влияние этой связи усиливается и приводит к значительному усложнению или невозможности решения поставленной задачи. Поэтому известный рейтинговый критерий *Abbey* нуждается в усовершенствовании.

Вследствие того, что разные типы почв и виды растений являются многокомпонентными, имеют сложный макро - и микро состав, невозможно учесть все существующие взаимодействия физико-химической и биологической природы, влияющие на динамику содержания МЭ и ТМ в системе. Количественные величины содержания большинства металлов приближены к отдельной способности примененных методик, результаты измерений часто являются асимметричными и не отвечают закону нормального распределения данных. Необходимость установления максимума неоднородности в выборке данных элементного/компонентного состава системы

определяется тем, что среднеквадратичное отклонение (σ) и дисперсия (σ^2) – меры, которые характеризуют содержание элементов системы, выступают опосредованной мерой их неоднородности. Однако при асимметричных видах распределения данных содержания МЭ и ТМ в почвах, растениях использование σ и коэффициентов корреляции не работает и оказывает, способствуя дополнительным погрешностям, получению некорректного результата, что может привести к неверным техническим решениям. Кроме того, в связи с быстро прогрессирующим процессом загрязнения известные способы сложно реализовать из-за отсутствия выборки проб целинных (эталонных) почв, растений, расположенных на ограниченной территории.

Цель разработки способа – усовершенствование способа установления нормативных показателей содержания элементов /компонентов системы почва-растение за счет модификации известного критерия оценки элементного /компонентного состава технической системы и его распространение на новый класс объектов, расширение критериев оценки элементного состава системы, повышение экспрессности получения и достоверности данных относительно химического состава объектов окружающей среды, их прогностической ценности, а также увеличение спектра возможностей применения способа при одновременном снижении необходимых затрат на их достижение.

Поставленная цель достигается за счет того, что при установлении аттестованных значений показателей содержания элементов/компонентов, проводят аналитическое их определение и статистическую обработку первичных данных, одноразовое внесение соединений неорганической природы в почву. В пробах почв, растений методом атомно-абсорбционной спектрофотометрии определяют содержание элементов/компонентов, полученные результаты статистически обрабатывают, используя пакет программ *Statistica 7.0*. Далее при линейном тренде учитывают весь массив данных, и результаты их анализа отображают как базовое значение $\pm 10\%$ в качестве доверительного интервала. Оценивают медианы выборок результатов для установления возможного систематического завышения или занижения результатов определения. Проводят аппроксимацию переменных нормальным, логнормальным, равномерным распределениями и сравнение средних двух участков. Оценивают вид распределения данных выборки по статистическим параметрам для приведения выборки данных к симметричному виду. Результаты визуализируют при построении гистограмм распределения данных. Проверку полученных результатов и их соответствие существующим

нормативам и /или выполняют используя СО подобного элементного состава природных сред и условия их соответствия элементному составу.

При отсутствии эталонов сравнения (СО, аналогов тем почвам, растениям, которые анализируются) проверку полученных результатов проводят по коэффициенту детерминации (R^2). Разность гранулометричного, элементного и компонентного состава почв, растений, которые влияют на корректность полученных данных, является преодоленной, данные являются согласованными если $R^2 \geq 0,95$.

При нелинейном тренде распределения данных (асимметричность, многомодальность) используют данные с обязательным включением всех результатов расчета содержания МЭ и ТМ в аттестованной пробе. Дополнительно оценивают статистические параметры конечных выборок данных, определяют аттестованные значения содержания элементов /компонентов системы почва-растение используя модифицированный критерий *Abbey* согласно формуле:

$$R = \frac{N_1 + \frac{1}{2} N_2 + \frac{1}{3} N_3 - N_{ex}}{N_1 + N_2 + N_3 + N_{ex}} \quad (1)$$

где N_1 , N_2 , N_3 – результаты установления аттестованных значений содержимого ХЕ определенных интервалов, N_{ex} – результаты, которые выходят за пределы определенных интервалов.

Модификацию критерия *Abbey* проводят путем замены параметра, который формирует интервалы при вычислении самого критерия, на значение допустимой ошибки аттестованных значений элементного /компонентного состава образцов почв, растений.

Результаты измерений распределяют в зависимости от нахождения в определенном интервале

$$(N_1 = C_{норм} \pm \Delta_{пр}; N_2 = C_{норм} \pm \frac{\Delta_{пр}}{C_{норм}} \pm 1,5\Delta_{пр}; N_3 = C_{норм} \pm \frac{1,5\Delta_{пр}}{C_{норм}} \pm 2\Delta_{пр};$$

N_{ex} - результаты, которые выходят за пределы определенных интервалов), сформированному за учет $\Delta_{пр}$, как допустимой погрешности аттестованного значения $C_{норм}$. Три интервала – необходимое и достаточное условие для установления нормативов содержания каждого МЭ и ТМ в системе почва – растение. Как значение $C_{норм}$ для определенного типа почвы /вида растений принимается значение содержания каждого МЭ и ТМ как средневзвешенная величина. Допустимую погрешность аттестованного значения рассчитывают как 1/3 интервальной оценки допустимых средних

квадратичных отклонений результатов установления их содержания. Результаты, согласно предложенной формуле, оценивают на основании существования тесной корреляционной связи установленных аттестованных значений содержания МЭ и ТМ в почвах, растениях. Количественно выделяют почвы разной буферной способности, семейства растений, которые характеризуются высокими значениями коэффициентов корреляции (r) и положительными значениями модифицированного критерия *Abbey*.

Техническим результатом способа являются обеспечения повышения достоверности полученных данных, экспрессность получения объективных оценок результатов определения содержания элементов / компонентов в разных объектах окружающей среды при увеличении их качества и уменьшении необходимых затрат на их достижение, усовершенствование методологии обработки информации относительно элементного состава естественных (почвы, растения) и техногенных сред (сложные смеси).

Результаты исследований защищены патентом на полезную модель [2]. Работа выполнена в рамках реализации проекта № Ф43/010 "Показатели процессов миграции и аккумуляции тяжелых металлов в почвах разных ландшафтов восточной части европейского континента: обоснование, получение, информативность, практическое использование в экологических целях" 2011–2012 гг. ГФФИ Государственного агентства по вопросам науки, инноваций и информатизации Украины.

Литература

1. Лонцих С. В., Петров Л. Л. Стандартные образцы состава природных сред. Новосибирск, 1988. 276 с.
2. Пат. на корисну модель 70345 UA, Спосіб встановлення аттестованих значень показників вмісту хімічних елементів /компонентів у системі ґрунт-рослина /Самохвалова В. Л., Філатов В. П.; заявник ННЦ ІГА. – U201113037; заявл. 07.11.2011; опубл. 11.06.2012, Бюл. №11.