УДК 631.4

ДЕКОНВОЛЮЦИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ КРИВЫХ ГРАНУЛОМЕТРИЧЕСКОГО СОСТАВА СЛИТЫХ ПОЧВ

© 2019 г. Ю. Н. Водяницкий^{1, *}, Е. Ю. Милановский^{1, 3}, Е. Г. Моргун¹, А. Т. Савичев^{2, 3}

¹МГУ им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, 1, Москва, 119991 Россия ²Геологический институт РАН, Пыжевский пер., 7, Москва, 119017 Россия ³Почвенный институт им. В.В. Докучаева, Пыжевский пер., 7, Москва, 119017 Россия

> *e-mail: yu.vodyan@mail.ru Поступила в редакцию 26.01.2018 г. После доработки 16.11.2018 г. Принята к публикации 06.12.2018 г.

Процедура деконволюции для расщепления исходного спектра гранулометрического состава на составляющие фракции помимо уточнения традиционных показателей дает новую информацию о свойствах отдельных гранулометрических фракций. Благодаря деконволюции удалось выявить фракции, "невидимые" при визуальном анализе исходного спектра частиц. К новым показателям относятся: средний диаметр гранулометрической фракции d_{cp} , величина дисперсии *D* каждой фракции. Деконволюция позволяет характеризовать фракцию не границами, а средним диаметром частиц. Деконволюция показала, что распределение элементарных фракций слитых почв согласуется с границами фракций Международной системой классификации FAO гранулометрического состава и не согласуется с границами классов в классификации Качинского, так как в ней ширина классов варьирует: индекс F = 2 и 5. Преимущество Международной классификации FAO гранулометрического состава в одинаковой ширине фракций с постоянным значением F = 3.2.

Ключевые слова: гранулометрические фракции почв, классификация Качинского, Международная классификация FAO гранулометрического состава, средний диаметр гранулометрической фракции, дисперсия фракции

DOI: 10.1134/S0032180X19070141

введение

Гранулометрический состав — обязательный компонент почвенного исследования. Долгие годы был распространен пипет-анализ по Н.А. Качинскому. При этом предполагалась постоянная плотность вероятности содержания частицами в интервале между фиксированными границами фракций, которые назначены числами кратными пяти: 1, 5, 10, 50 мкм и т. д. [2]. Но еще 30 лет назад было показано, что распределение частиц в принятых границах совсем не однородное, напротив, оно имеет как максимумы, так и минимумы [1, 6, 7].

В России почвоведы пользуются классификацией Качинского, тогда как за рубежом применяют Международную классификацию гранулометрического состава FAO [13]. У них есть как сходства, так и существенные различия. В обеих классификациях частицы мелкозема вплоть до крупного песка делят на 9 фракций. Но у мелкозема разный предел крупности: по Качинскому интервал частиц 0–1000 мкм, по Международной класссификации интервал шире: 0—2000 мкм. Главное отличие классификаций — разные границы между фракциями.

В обеих классификациях с ростом крупности частиц ширина фракций увеличивается. Но это возрастание идет с разным шагом. Выразим ширину фракций индексом F, представляющим отношение диаметров верхней границы $d_{\text{верх}}$ к диаметру нижней границы $d_{\text{низ}}$: $F = d_{\text{верх}}/d_{\text{низ}}$. Именно в значениях индекса ширины фракций F две классификации различаются кардинально. Международная классификация FAO составлена так, чтобы индекс ширины фракций F был постоянным, он принят F = 3.2 [13]. Напротив, индекс ширины фракций в системе Качинского переменный и составляет F = 2 или 5. По сравнению с классификацией FAO одни фракции Качинского оказались зауженными с F = 2 (грубый ил, средняя пыль, средний и крупный песок), а другие с F = 5 чрезмерно расширенными (тонкий ил, мелкая пыль, крупная пыль, мелкий песок). Возникает вопрос: какая из классификаций лучше отражает реальное распределение гранулометрических фракций почв по шкале крупности?

Классический пипет-анализ не может дать ответ на этот важный вопрос. Но ситуация изменилась после появления лазерных дифрактометров. Они обеспечивают быстроту анализа и не нуждаются в большом количестве образца. Главное их преимущество перед пипет-анализом — получение практически непрерывного (а не дискретного) спектра зависимости содержания частиц от их размера. На кривых содержания частиц от их диаметра образуется последовательность минимумов и максимумов. Их интерпретируют следующим образом: положение минимумов на оси диаметров частиц — это границы между фракциями, а величина амплитуды (максимума) пропорциональна доли фракции в данных границах.

У лазерных дифрактометров есть и недостатки. Возникают ошибки в размерах частиц при отклонении формы частиц от сферической [10, 11]. Другой источник ошибок — неучет разной плотности минералов в составе образца. И наконец, невозможно определить содержание коллоидной фракции. Все это уменьшает точность определения гранулометрического состава методом лазерной дифракции.

Уже визуальный анализ дифференциальных кривых лазерной дифракции показывает явное несогласие фактических границ между фракциями с границами, назначенными ранее Качинским.

Тем не менее, очевидно, что все достоинства практически непрерывного распределения частиц по крупности пока не реализованы. В работе "Информационная структура почвенного покрова" Козловский и Горячкин [4] вводят понятие "потенциальная информация" и рассматривают ее значение для почвоведения. Потенциальную информацию определяют как количество информации, зависящее от совокупности релеватных признаков в источнике информации. Мы видим конкретную задачу в том, чтобы извлечь максимум сведений из потенциальной информации, заключенной в кривых распределения частиц от размера. Простой визуальный анализ дифференциальных кривых дает только часть информации о гранулометрическом составе почв.

Возможно, что на дифференциальных кривых происходит наложение друг на друга смежных фракций почвенных частиц, в этом случае доля участия каждой фракции искажается. Явление суперпозиции смежных полос очень часто имеет место в аналитической практике: при рентгенофлуоресцентом анализе, синхротронном рентгеновском анализе, мессбауэровской спектроскопии и т. п. Для осадочных пород смешение гранулометрических фракций было установлено еще в 80-х гг. [14]. Установление точного положения полосы и ее доли в смеси решается путем процедуры деконволюции, для этого используют компьютерные программы. Если провести деконволюцию для расщепления исходного спектра гранулометрического состава на составляющие фракции, это даст новую информацию о свойствах отдельных гранулометрических фракций. При этом, мы не только уточним традиционные показатели гранулометрические состава, но и получим новые характеристики частиц: период *T* и др. Из традиционных показателей уточняем долю каждой из фракций в образце почвы и выявляем новые фракции, "невидимые" при простом визуальном анализе исходной кривой седиментации частиц. К новым показателям гранулометрического состава относятся: величина дисперсии каждой фракции и степени наложения соседних фракций.

Цели работы: предложить методику деконволюции исходных спектров гранулометрического состава, апробировать ее на конкретных объектах: слитых почвах двух разных регионов Мира и сравнить распределение фракций слитых почв в границах классов системы Качинского и в границах классов Международной классификации.

ОБЪЕКТЫ И МЕТОДЫ

Изучали два слитоземных комплексов с микрорельефом гильгай в умеренной и субтропической зонах. На разных элементах микрорельефа увлажненность сильно различается: в почвы микропонижений поступает вдвое больше осадков, чем в почвы микроповышений.

Первый слитоземный комплекс расположен в Центральном Предкавказье на Ставропольской возвышенности (44°38'12" с. ш., 42°14'45" в. д.) на глинистом элювии-делювии майкопских глин в условиях умеренно-континентального климата. В микроповышении образовалась солонцеватая темная почва, на микросклоне — типичная темная слитая, на микропонижении — гидрометаморфизированная темная слитая почва, согласно [3].

Второй слитоземный комплекс расположен на юге США, штат Техас, на второй надпойменной террасе р. Бразос (30°29'21" с. ш., 96°28'44" з. д.) в условиях субтропического климата. Почвообразующие породы — глинистый аллювий пермских и триасовых красноцветных глинистых отложений. Почва на микроповышении и микросклоне классифицируется как типичная темная слитая, а почва на микропонижении — как гидрометаморфизированная темная слитая [3].

Гранулометрический состав почв определялся на лазерном дифракционном анализаторе размера частиц "Analysette 22 comfort" (FRITSCH, Germany) [10]. В приборе используется метод "обратной оптики Фурье" – система сходящегося лазерного луча (гелий—неоновый лазер с длиной волны 632.8 нм).



Рис. 1. Распределение логарифмов диаметров частиц (А) и распределение диаметров частиц в логарифмическом масштабе (Б). Ставрополье, склон, гор. AU, 4–12 см. Точки – исходное дифференциальное распределение; тонкие линии – разложение на элементарные контуры; пунктирная линия – модельное распределение. Пик в районе 5–30 мкм не может быть обнаружен при простом, визуальном анализе исходной дифференциальной кривой.

Перед анализом почвенные образцы в виде суспензии были обработаны ультразвуком без предварительной химической обработки. Исходные образцы почв растирали пестиком с резиновым наконечником и просеивали через сито 0.25 мм. К навеске (0.10–0.13 г) добавляли 30 мл дистиллированной воды и диспергировали почву ультразвуковым диспергатором Digital Sonifir 250 (Branson Ultrasonics) с диспергирующим элементом зондового типа, работающем на частоте 20 кГц, в неимпульсном режиме. Энергия ультразвука – 450 Дж/мл, что достаточно для диспергации образцов большинства почв [12].

Распределение частиц по размерам было получено с использованием полной функции рассеяния Ми для сфер [9], которая обеспечивает более точную оценку размера частиц в глинистой фракции, чем функция Фраунгофера [8].

МЕТОДИКА ДЕКОНВОЛЮЦИИ И ХАРАКТЕРИСТИКА ГРАНУЛОМЕТРИЧЕСКИХ ФРАКЦИЙ

Методика деконволюции. Применительно к расшифровке энергодисперсионного рентгенофлуоресцентного спектра смысл деконволюции подробно изложен в статье Савичева и Степанова [5]. Применим данную методику для деконволюции гранулометрических спектров.

Изложим методику на примере гранулометрического спектра слитой почвы из Ставропольского края, отобранной на микросклоне из поверхностного горизонта, гор. AU (4–12 см). На рис. 1, А точками показан исходный гранулометрический спектр почвы. Поскольку размер частиц варьирует в широком интервале, по оси абсцисс откладываются логарифмы диаметров частиц, то есть спектры отображаются в полулогарифмическом масштабе. Основание логарифма особого значения не имеет, важно, чтобы оно было больше единицы; мы применяли построение диаграмм в натуральных логарифмах. Тогда исходное распределение выглядит так:

$$Y(\ln d), \tag{1}$$

где *d* — диаметр частицы. Исходное распределение представляет сумму отдельных контуров, крылья которых наложены друг на друга. Для простоты программной реализации были выбраны Гауссовы контуры в качестве элементарных. Как будет показано ниже, такой выбор оказался достаточно удачным. Вопрос о выборе формы элементарных контуров является крайне важным и требующим отдельного рассмотрения.

Строим модельное распределение, представляющее сумму Гауссиан:

$$Y_{mod} (\ln d) =$$

= $\sum_{j=1}^{K} A_j \exp\{-[(\ln d_j - \ln d)/D_j]^2\}.$ (2)

Здесь индекс номера линии *j* пробегает значения 1, 2, 3, ..., *K*, где *K* – число линий, A_j – амплитуда *j*-той Гауссианы, d_j – положение вершины *j*-той линии на оси абсцисс (мкм), D_j – дисперсия *j*-той Гауссианы.

Переход к дискретному распределению для заданных диаметров d_i приводит выражения (1) и (2) к виду:

$$Y(\ln d_i) = Y_i,\tag{3}$$

ПОЧВОВЕДЕНИЕ № 9 2019

 $Y_{mod}\left(\ln d_{i}\right) = Y_{modi}.$ (4)

Здесь индекс *i* пробегает значения 1, 2, 3,, *N*, где *N* — число точек измерения.

Модельное распределение находится из условия минимизации отклонения модельного распределения от исходного:

$$\sum_{i=1}^{N} (Y_i - Y_{modi})^2 = \min.$$
 (5)

Однако выражение (5) предполагает одинаковые цены ошибок на малых и больших значениях Y_i , хотя на малых значениях цену ошибки следует повысить. Для этого вводим статистический вес ординаты:

$$G_i = 10/(Y_i + 1)^{1/2},$$
 (6)

и ищем оптимальное модельное распределение из минимизации следующего функционала:

$$\sum_{i=1}^{N} G_i \left(Y_i - Y_{mod \ i} \right)^2 = \min.$$
 (7)

Из условия (7) находим все показатели каждой из гауссиан: амплитуды A_j , положения вершин d_j (d_{cp}) и значение дисперсий D_j . Следует отметить, что задача является линейной только по амплитудам A, и нелинейной по диаметрам максимумов d_{cp} и дисперсиям D. Поэтому необходим перебор положений максимумов и дисперсий с небольшим шагом и на каждом шаге вычисляются амплитуды. Перебор продолжается до получения минимального значения выражения (7).

Из описания применяемого алгоритма видно, что в нем, в отличие от алгоритмов, представленных в Интернете, возможно изменение положений вершин и дисперсий элементарных контуров, а также путем введения статистического веса ординаты повышается цена ошибки на малых значениях ординаты.

Результаты показаны на рис. 1, А. Точками отмечен исходный спектр, а тонкими сплошными линиями — элементарные контуры распределений отдельных фракций. "Чистые" Гауссианы (то есть без их искажений, с нулевыми показателями эксцесса и асимметрии), выбранные в качестве простейшей модели, показали весьма хорошую степень приближения. Ее оценивали по двум критериям: 1 — минимизации отклонения модельного построения от реального, что осушествляется автоматически в ходе вычислений и 2 – отклонению модельного распределения от реального, величина которого оказалось в размерах десятых долей процента, что и является оценкой относительной погрешности модели. С точки зрения почвоведа этого приближения достаточно, чтобы с достаточной точностью определить

ПОЧВОВЕДЕНИЕ № 9 2019

Таблица 1. Характеристики гранулометрических фракций слитой почвы Ставрополья на микросклоне, гор. AU, 4–12 см до (1) и после (2) деконволюции дифференциальных кривых

Пик (вариант) d_{cp} , мкм A $S, \%$ D 1 (1) 7 7 7 7 1 (2) 0.49 1.10 7.2 0.49 2 (1) 28 2 2 1.75 3.86 23.3 0.45 3 (1) 40 40 30 40 5 4 11.59 1.22 9.0 0.55 5 5 11 - - 6		Показатели фракций					
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	Пик (вариант)	$d_{\rm cp}$, мкм	A	<i>S</i> , %	D		
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1 (1)			7			
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1 (2)	0.49	1.10	7.2	0.49		
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	2 (1)			28			
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	2 (2)	1.75	3.86	23.3	0.45		
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	3 (1)			40			
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	3 (2)	4.57	4.98	36.7	0.55		
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	4 (1)			30			
5 (1) 5 (2) 27 11 2 76 22 0 0 62	4 (2)	11.59	1.22	9.0	0.55		
5 (2) 27 11 2 76 22 0 0.62	5 (1)			-			
3(2) 27.11 2.70 22.9 0.02	5 (2)	27.11	2.76	22.9	0.62		
Σ(2) 99.15	Σ(2)		99.15	•			

средний диаметр d_{cp} и другие показатели элементарного контура. Простейшим статистическим критерием для оценки правильности модельного распределения являлся подсчет коэффициента детерминации r^2 между модельным и исходным распределениями. Он был достаточно высоким. Например, для образца, приведенного на рис. 1, коэффициент детерминации $r^2 = 0.9933$.

Для дальнейшего уменьшения относительной погрешности модели (до сотых долей процента) необходим поиск уточненной формы элементарных контуров, что потребует затрат времени и компьютерных ресурсов ориентировочно на два порядка больше, чем в случае "чистых" Гауссиан.

В табл. 1 даны результаты исходной гранулометрической функции и характеристик пяти фракций, полученных после деконволюции образца из ставропольской почвы (микросклон, гор. AU, глубина 4–12 см). Здесь $d_{\rm cp}$ – средние диаметры гранулометрических фракций, A – амплитуды элементарных контуров, S(%) – процентное содержание гранулометрических фракций, D – дисперсии элементарных контуров. До деконволюции процентное содержание определялось суммированием исходного распределения по интервалу между соседними минимумами, после деконволюции – как площади элементарных контуров.

Характеристики гранулометрических фракций. Процедура деконволюции позволяет решить две задачи. Во-первых, можно уточнить обычные показатели, которые определяют из исходной зависимости количества частиц от их диаметра. В рамках этой темы мы рассмотрим два вопроса: уточне-



Рис. 2. Исходное распределение (точки) и разложение на элементарные контуры (тонкие линии) в линейном отображении для начальной области диаграммы (Ставрополье, гор. AU, 4–12 см). Видно отклонение элементарного контура от Гауссовой формы.

ние доли отдельных гранулометрических фракций и выявление новой фракции.

Даже при явном минимуме на исходной кривой доля соседних фракций может быть искажена за счет их суперпозиции. Эффект наложения раскрывается в результате деконволюции исходных спектров. Одновременно удается исправить соотношение между фракциями.

В свете полученных данных о наложении смежных Гауссиан, можем по новому взглянуть на понятие "Граница между гранулометрическими фракциями". Очевидно, что эти границы носят условный характер. Они только помогают нам в классификации почв по степени дисперсности. Но из-за суперпозиции фракций в каждый интервал попадают частицы соседних фракций, определенных методом лазерной дифракции.

Кроме того, деконволюция дает новые характеристики гранулометрического состава. Величины средних диаметров (d_{cp}) всех фракций позволяют определить периоды гранулометрических фракций $T = (d_{cp})_{i+1} : (d_{cp})_{i}$. Чем больше значение T, тем сильнее фракции дифференцированы.

Другой показатель дифференциации гранулометрических фракций: дисперсия Гауссиан. Чем меньше величина дисперсии *D*, тем сильнее выражена дифференциация фракции. По величине *D* можно судить об однородности распределения частиц в данной фракции.

Принятое определение доли фракций по высоте пиков, а границ между ними по минимуму на исходной кривой сопряжено с ошибками. Они возникают в силу неполной дискретности гранулометрических фракций почвы. Если бы каждая фракция была полностью отделена от соседней, то на исходной кривой минимум концентрации снизился бы до нуля. Обычно этого нет, что говорит о суперпозиции фракций.

Более того, в почве может быть самостоятельная гранулометрическая фракция, не видимая при визуальном анализе исходного спектра. Отметим, что при переходе к линейному отображению (рис. 2) форма истинных пиков сильно отличается от Гауссовой; если для логарифмов величин распределение было Гауссовым, но в линейном масштабе оно – логнормальное.

В дальнейшем были подсчитаны средние значения характеристик каждой из фракций и их ошибки (*m*), как для всех выборок, так и отдельно для материнских пород и гумусовых горизонтов.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Подробно рассмотрим характеристики гранулометрических фракций и соотношение между смежными фракциями. Прежде всего, надо разобраться в соответствии диаметров фракций, рамкам групп известных классификаций гранулометрического состава. В России принята классификация Качинского, во многих странах используют классификацию FAO [13].

Положение фракций слитых почв в разных системах классификации гранулометрического состава. Как видно, из табл. 2, в группу мелкой пыли по Качинскому (1–5 мкм) попадают две гранулометрические фракции слитых почв. Например, в ставропольской почве на микроповышении в гор. AU (8–15 см) у этих фракций $d_{\rm cp} = 1.73$ и 4.48 мкм. При этом соседняя группа – средней пыли (5–10 мкм) – оказывается пустой. Такая же странная неравномерность распределения фракций по группам частиц, в системе Качинского, имеет место для всех изученных нами почв.

По иному распределяются элементарные фракции в рамках Международной классификации. Как видно из табл. 2, каждая фракция (и будучи единственной) всех слитых почв попадает в границы частиц, принятых в классификации FAO. То есть каждой группе классификации FAO соответствует единственная элементарная фракция слитых почв.

Таким образом, крупность элементарных фракций слитых почв вполне согласуется с границами групп классификации FAO гранулометрического состава и не согласуется с границами в классификации Качинского. Причина несогласия в том, что у классификации Качинского [2], переменная ширина фракций с индексом F = 2 и 5. В результате в узкие фракции, где F = 2 (грубого ила и средней пыли), средние диаметры элементарных фракций слитых почв не попадают. А причина попадания сразу двух фракций слитых почв в один класс

ДЕКОНВОЛЮЦИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ КРИВЫХ

	Ил		Пыль			Песок		
Горизонт (глубина)	средний крупный		тонкая	тонкая средняя крупп		мелкий		
	(0.2–0.63)	(0.63–2.0)	(2.0-6.3)	(6.3–20)	(20-63)	(63–200)		
		Слитоземный	комплекс в Ста	врополье				
		Мик	сроповышение					
AU (8–15)	0.47/11.7	1.73/33.7	4.5/37.5	13/17.3				
AU (15-36)	0.48/15.3	1.73/37.7	4.4/38.6	9/8.3				
AUv,nc (70–97)	0.48/15.6	1.73/31.0	4.4/39.2	9/14.3				
Cv (150–170)	0.44/15.6	1.84/29.18	4.4/44.4	9/10.9				
		Ν	Іикросклон					
AU (4–8)	0.49/7.2	1.75/23.3	4.6/36.7	12/9.0	27/22.9			
AUv (27–50)	0.46/12.5	1.80/33.9	4.3/37.2	10/16.4				
Vnc (70–105)	0.46/12.3	1.80/29.7	4.4/39.7	13/19.7				
Cv (145–160)	0.46/16.0	1.80/31.4	4.4/43.1	9/10.4				
·		Мин	кропонижение					
AU (0-10)	0.46/6.1	1,80/25.4	4.5/32.6	11/14.4	22/21.8			
AUv (20–40)	0.46/12.1	1.80/33.9	4.4/37.7	10/15.7				
AUv,q (80–109)	0.46/14.0	1.80/33.1	4.4/42.2	10/11.2				
Vd (125–130)	0.46/13.0	1.66/28.4	4.5/41.7	14/17.2				
Cv,q (150–160)	0.46/14.9	1.80/29.6	4.6/44.5	11/11.6				
·		Слитоземн	ый комплекс в	Гехасе	•	•		
		Мик	кроповышение					
AUca (0–10)	0.50/11.1	1.62/40.0	4.6/26.8	15/25.6				
AUca (10–26)	0.53/14.1	1.65/27.6	4.5/25.6		21/28.1	133/5.0		
AUca (26–40)	0.53/15.2	1.58/32.0	4.4/23.9	18/21.4		118/8.0		
Bca,v (40–65)	0.51/14.5	1.79/25.7	4.5/34.9	16/25.6				
Bca,v (65–100)	0.52/10.6	1.65/26.6	4.4/26.8	19/25.2		158/9.1		
Cv,nc (125–180)	0.48/14.7	2.70/31.7	3.7/21.4	8/38.8				
Cv,nc (180–208)	0.49/14.7	1.77/29.6	4.3/35.0	9/20.6				
		Ν	Іикросклон					
AUca (0–10)	0.52/10.2	1.65/25.7	4.4/24.7		22/31.0	92/8.6		
AUca (10–40)	0.53/17.4	1.66/36.7	4.6/24.8	18/21.2				
AUca (40–97)	0.53/15.4	1.55/33.2	4.3/29.5	16/18.4		126/4.0		
Bca,v (97–141)	0.54/17.8	1.55/30.0	4.3/27.5	18/18.7		134/6.2		
Bca,v (141–171)	0.53/17.5	1.58/27.5	4.4/29.4	18/21.8		164/4.4		
Cv,nc (171–202)	0.50/13.6	1.73/32.6	4.6/31.9	15/22.4				
Cv,nc (202–232)	0.48/12.9	1.77/30.3	4.5/38.2	10/18.8				
Cv,nc (264-304)	0.45/7.4	1.84/19.2	4.6/32.7	11/22.7	24/18.6			
Микропонижение								
AUca,v (15–39)	0.54/18.0	1.57/29.3	4.3/30.4	18/18.7		134/3.7		
AUca,v (39–80)	0.51/14.2	1.60/43.8	4.5/22.7	16/18.3		122/1.4		
AUca,v (80–108)	0.53/16.3	1.57/34.7	4.2/29.6	16/13.6		164/6.1		
Bca,v,q (108–140)	0.51/17.9	1.60/41.0	4.5/23.3	16/18.1				
Bca,v,q (140–180)	0.53/18.7	1.60/36.5	4.4/27.7	12/17.2				

Таблица 2. Средний диаметр частиц *d*_{ср} (мкм) фракций/содержание фракций слитых почв (%) по классификации FAO после деконволюции спектров

ПОЧВОВЕДЕНИЕ № 9 2019

ВОДЯНИЦКИЙ и др.

средних диаметров соседних фракций $V_{dcp}, \%$ T D $V_D, \%$ № Фракция (*n*) $d_{\rm cp}$, мкм Слитоземный комплекс в Ставрополье 0.46 ± 0.004 2.0 1 Средний ил (13) 3.0 3.85 0.500 ± 0.003 2 Крупный ил (13) 1.77 ± 0.01 2.7 2.52 0.502 ± 0.010 7.1 3 Тонкая пыль (13) 4.44 ± 0.08 2.0 2.49 0.501 ± 0.008 5.6 4 Средняя пыль (13) 11.04 ± 0.21 2.23 0.598 ± 0.016 9.7 15.2 24.65 5 Крупная пыль (2) 0.635 Слитоземный комплекс в Техасе 1 Средний ил (20) 0.51 ± 0.005 4.6 3.23 0.532 ± 0.002 6.4 2 Крупный ил (20) 1.65 ± 0.019 5.0 0.545 ± 0.009 8.5 2.66 3 Тонкая пыль (20) 4.39 ± 0.041 4.2 3.48 0.580 ± 0.015 11.8

24.4

2.1

16.8

1.41

6.28

 15.30 ± 0.879

 21.65 ± 0.32

 134.49 ± 7.15

Таблица 3. Усредненные значения средних диаметров d_{cp} , дисперсий элементарных контуров *D* и коэффициенты их вариаций *V* гранулометрических фракций слитых почв по классификации FAO. Периоды *T* как отношения средних диаметров соседних фракций

крупности по Качинскому — в чрезмерно широких границах, принятых для мелкой пыли и крупной пыли, у которых F = 5.

Средняя пыль (18)

Крупная пыль (3)

Мелкий песок (10)

Напротив, в Международной классификации гранулометрического состава FAO индекс ширины фракций постоянный, а именно $F \approx 3.2$. Именно этим и определяется преимущество Международной классификации гранулометрического состава FAO перед классификацией Качинского.

В дальнейшем мы рассматриваем гранулометрические фракции почв в рамках Международной классификации FAO.

Средний диаметр фракций и периодичность гранулометрических спектров. Для слитоземного комплекса в Ставрополье усредненные значения средних диаметров каждой из фракций, а также их периода Tдля всех изученных образцов почв сведены в табл. 3. Всего фиксируется 5 фракций: средний ил (0.2–0.63 мкм), крупный ил (0.63–2.0 мкм), тонкая пыль (2.0–6.3 мкм), средняя пыль (6.3– 20 мкм) и крупная пыль (20–63 мкм). Для слитоземного комплекса в Техасе добавляется фракция мелкого песка (63–200 мкм).

Средние диаметры первых, самых тонких трех фракций (среднего и крупного илов и тонкой пыли) варьируют у почв слабо V = 2-3%. Варьирование среднего диаметра средней и крупной пыли гораздо значительнее: V = 14-15%.

Из значений периода T = 2.2-3.8, в среднем 2.8, видно фракции дифферен-цированы на среднем уровне: для осадочных пород по Садовскому T = 3-4.

В слитоземном комплексе в Техасе набор гранулометрических фракций шире (табл. 3). Здесь лазерная дифракция выявила шестую фракцию, мелкий песок с $d_{cp} = 124.5$ мкм, он обнаружен в половине образцов почв. Средние диаметры первых, самых тонких трех фракций варьируют слабее V = 4-5%, чем размеры средней пыли и мелкого песка: V = 17-24%.

 0.729 ± 0.021

 0.373 ± 0.009

12.7

10.7

Фракции техасских почв дифференцированы также как ставропольские, значения периода для илисто-пылеватого диапазона T = 1.4 - 3.5, в среднем 2.7. При этом надо иметь в виду, что из-за малой статистки (n = 2) средний диаметр грубой пыли нельзя признать надежным. Возможно, из-за этого отношения диаметров частиц грубой пыли к крупной пыли занижено (T = 1.4), а к мелкому песку – завышено (T = 6.3).

Уточнение доли отдельных гранулометрических фракций. В слитоземном комплексе в Ставрополье в ряде образцов дековолюция заметно уточняет содержание отдельных фракций. Так, в нижнем слое почвы на возвышенности, исходя из амплитуд *A* исходной кривой, содержание второй фракции определено в 27%, а третьей — в 53%. После деконволюции высота второго пика практически сохранилась, а третьего — существенно снизилась. Расчет площадей показал, что доля крупного ила с $d_{\rm cp} = 1.84$ мкм возросла до 29.1%, а доля тонкой пыли с $d_{\rm cp} = 4.39$ мкм снизилась до 44.4%.

Еще более заметно изменилась доля четвертой фракции (средней пыли) с $d_{\rm cp} = 13.6$ мкм, она возросла с 5 до 17.2%. Таким образом, основной результат уточнения гранулометрического состава образца — сокращение доли тонкой пыли при возрастании долей средней и крупной пыли. Такой же результат получен для всех образцов ставропольских слитых почв. Другими словами, рас-

4

5

6

Почва/порода	<i>d</i> _{ср} , мкм				D			
(число образцов)	средний ил	крупный ил	тонкая пыль	средняя пыль	средний ил	крупный ил	тонкая пыль	средняя пыль
Слитоземный комплекс в Ставрополье								
Почва, Uca (8)	$0.47 \pm \pm 0.005$	$1.77 \pm \pm 0.012$	4.43 ± 20.003	$10.45 \pm \pm 0.165$	$0.50 \pm \pm 0.003$	$0.50 \pm \pm 0.007$	$0.50 \pm \pm 0.011$	$0.57 \pm \pm 0.020$
Порода, Сv (3)	$0.45 \pm \pm 0.007$	$1.81 \pm \pm 0.013$	$4.47 \pm \pm 0.080$	11.19 ± ± 1.034	$0.50 \pm \pm 0.007$	$0.48 \pm \pm 0.017$	$0.49 \pm \pm 0.015$	$0.64 \pm \pm 0.002$
<i>t</i> -критерий	2.32	2.26	4.68*	0.81	0.00	1.09	0.54	3.48*
Слитоземный комплекс в Техасе								
Почва, AUca (9)	$0.52 \pm \pm 0.004$	$1.60 \pm \pm 0.015$	$4.42 \pm \pm 0.041$	17.30 ± ± 0.799	$0.53 \pm \pm 0.001$	$0.56 \pm \pm 0.012$	$0.61 \pm \pm 0.015$	0.75 ± 0.030
Порода, Cv (5)	$0.48 \pm \pm 0.001$	$1.76 \pm \pm 0.075$	$4.33 \pm \pm 0.156$	10.55 ± ± 1.24	$0.53 \pm \pm 0.001$	$0.52 \pm \pm 0.015$	$0.50 \pm \pm 0.021$	$0.66 \pm \pm 0.042$
<i>t</i> -критерий	9.57*	2.10	0.56	4.57*	0.00	2.08	4.27*	1.74

Таблица 4. Усредненные значения средних диаметров *d*_{ср} и дисперсий *D* гранулометрических фракций слитых почв. Наименование фракций дано по классификации FAO

* Достоверно при *P* 0.95.

пределение частиц по шкале крупности стало более равномерным.

В слитоземном комплексе в Техасе в ряде образцов дековолюция также ощутимо уточняет содержание отдельных фракций. Так, в образце почвы на микровозвышенности (гор. Вса, 40– 65 см) содержание тонкой пыли снизилось с 41 до 34.9%, а содержание средней пыли возросло с 20 до 25.6%. Аналогичным образом, содержание средней пыли снизилось с 32 до 23.3% в почве в западине, гор. Вса (108–140 см).

Выявление новой гранулометрической фракции. Самый примечательный результат деконволюции в слитоземном комплексе в Ставрополе – выявление новой (пятой) гранулометрической фракции, не заметной на двух интегральных кривых. Они выявлены в верхних слоях почв на микросклоне и в микрозападине (низине). У почвы на микросклоне, согласно исходной кривой, в верхнем слое (1-9 см) интервал частиц самой крупной фракции очень широк: от 11.6 до 121.5 мкм, что ставит вопрос об однородности этой обширейшей фракции. Аналогично, в низине, у почвы из верхнего слоя (0-10 см), согласно интегральной кривой, интервал частиц самой крупной фракции очень широк: от 10.0 до 73.1 мкм, что вызывает вопрос об однородности этой фракции.

Процедура деконволюции вносит ясность – действительно эти крупные фракции неоднородны, так как расщепление этих исходных спектров на четыре гауссианы не удалось: согласия с исходным интегральным спектром нет. Оно появилось только после привлечения пятой Гауссианы. У ставропольской почвы на микросклоне фракция 11.6—121.5 мкм в действительности состоит из двух фракций со средним диаметром 11.6 и 27.1 мкм. Средний диаметр новой гранулометрической фракции 11.6 мкм близок к диаметрам самой крупной фракции образцов из более глубоких горизонтов того же разреза: 9.9; 12.7 и 9.5 мкм. Но у почвы из верхнего слоя деконволюция выявляет новую самую крупную фракцию, которой нет в образцах из более глубоких горизонтов того же разреза. Средний диаметр новой фракции — 27.1 мкм, ее доля — 22.9%.

Такая же ситуация с гранулометрическим составом ставропольской почвы из верхнего слоя в западине. Здесь также для успешной деконволюции потребовалось внесение пятой Гауссианы. У почвы на поверхности в микронизине средний диаметра новой гранулометрической фракции 10.7 мкм, что близко к диаметрам самой крупной фракции образцов из более глубоких горизонтов того же разреза: 10.0; 10.0; 13.6 и 11.0 мкм. При этом у почвы из верхнего слоя деконволюция выявляет новую самую крупную фракцию, которой нет в образцах из более глубоких горизонтов разреза. Ее средний диаметр – 22.2 мкм, ее доля – 21.8%.

Фракция крупной пыли отсутствует в 18 из 20 образцов техасских почв. На рис. 3 (А и Б) показано положение фракций почв Техаса, отобранных на склоне из гор. B_{Ca} (97–141) и на понижении из гор. AUCa (80–108 см), на которых видно отсутствие отдельных Гауссиан в диапазоне диаметров 20–63 мкм, принадлежащих крупной пыли.

Только в трех образцах техасских почв содержится фракция грубой пыли с $d_{\rm cp}=21.6$ мкм, то-



Рис. 3. Распределение диаметров частиц в логарифмическом масштабе (Техас: A - склон, гор. B_{Ca} , 87– 141 см, \overline{b} – понижение, гор. AU_{Ca} , 80–108 см). Точки – исходное дифференциальное распределение; тонкие линии – элементарные контуры.

гда как в ставропольских почвах эта фракция с близким средним размером $d_{cp} = 24.6$ мкм присутствует во всех образах.

Однородность гранулометрических фракций. Это свойство фракций мы оценивали по величинам их дисперсий. Статистические данные о дисперсии гауссиан каждой из фракций, а также степени варьирования дисперсий в обоих слитоземах показаны в табл. 3.

В ставропольских почвах видим общую закономерность — однородность частиц тонких фракций выше, чем крупных фракций. Так, у трех самых тонких фракций дисперсия гауссиан D = 0.500-0.502, а у самых крупных фракций D == 0.598-0.635. Из этого следует, что крупнопылеватые фракции менее однородные, чем илистые и тонкопылеватые фракции. Интересные результаты дал подсчет зависимости дисперсии фракций от размера частиц ставропольских почв. Коэффициент корреляции зависимости $D \sim d_{cp}$ был ничтожным для самой тонкой фракции со средним диаметром 0.46 мкм: r = 0.06. Но он возрос до r = 0.59 для самой крупной фракции со средним диаметром 11.0 мкм. Прямая зависимость дисперсии от размера крупных частиц указывает, что по мере роста крупности частиц однородность фракций снижается. Таким образом, степень выветрелости крупных частиц различается в отдельных генетических горизонтах. Какой либо закономерности в степени варьирования дисперсий у фракций не видно.

В техасских почвах однородность илистых и пылеватых фракций ниже, чем в ставропольских почвах. Относительно высокая дисперсия тонких фракций техасских почв отражает их меньшую выветрелость по сравнению с частицами ставропольских почв.

В то же время фракция мелкого песка в техасских почвах отличается высокой однородностью D = 0.373 и слабой выветрелостью, вероятно из-за доминирования кварца.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Процедура деконволюции для расщепления исходного спектра гранулометрического состава на составляющие фракции помимо уточнения традициионных показателей дает новую информацию о свойствах отдельных гранулометрических фракций. Разработанная методика дековолюции исходных спектров гранулометрического состава апробирована на конкретных объектах: слитых почвах двух разных регионов Мира. Благодаря деконволюции удалось выявить фракции, "невидимые" при визуальном анализе исходного спектра частиц. К новым показателям относятся: средний диаметр гранулометрической фракции *d*_{ср} и величина дисперсии *D* каждой фракции.

Распределение элементарных фракций слитых почв вполне согласуется с границами фракций классификации FAO гранулометрического состава и не согласуется с границами классов в классификации Качинского, так как в ней ширина классов варьирует: индекс F = 2 и 5. Преимущество классификации гранулометрического состава FAO в одинаковой ширине фракций с постоянным значением F = 3.2.

Благодарность. Авторы благодарят Ю.А. Жукову и А.В. Юдину за помощь в проведении исследований. Отдельная благодарность С.А. Шобе — за просмотр рукописи и полезные советы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Водяницкий Ю.Н. Установление оптимальных границ для пылеватых фракций почв // Докл. АН СССР. 1988. Т. 303. № 1. С. 207–209.
- 2. *Качинский Н.А.* Механический и микроагрегатный состав почвы, методы его изучения. М.: Изд-во АН СССР, 1958. 190 с.
- Классификация и диагностика почв России. Смоленск: Ойкумена, 2004. 342 с.
- Козловский Ф.И., Горячкин С.В. Информационная структура почвенного покрова: поверхности раздела и внутренняя масса // Память почв. М.: Изд-во ЛКИ, 2008. 692 с.
- Савичев А.Т., Степанов С.С. Учет наложения линий и аппроксимация фонового излучения в рентгенофлуоресцентном и микрозондовом энерго-дисперсионном анализах // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2007. № 2. С. 85–89.
- Садовский М.А. О распределении размеров твердых отдельностей // Докл. АН СССР. 1983. Т. 269. № 1. С. 69–72.
- Садовский М.А., Болховитинов Л.Г., Писаренко В.Ф. О свойствах дискретности горных пород // Изв. АН СССР. Сер. Физика Земли. 1982. Т. 312. С. 3–18.

- 8. *de Boer G.B., de Weerd C., Thoenes D., Goossens H.W.* Laser diffraction spectrometry: Fraunhofer diffraction versus Mie scattering // Particle and Particle Systems Characterization. 1987. V. 4. P. 14–19.
- 9. *Kerker M*. The scattering of light and other electromagnetic radiation. Academic Press, N.Y., 1969.
- Konert M., Vandenberghe J. Comparison of laser grain size analysis with pipette and sieve analysis: a solution for the underestimation of the clay fraction // Sedimentology. 1997. V. 44. P. 523–535.
- 11. Kun A., Katona O., Sipos G., Barta K. Comparison of pipette and laser diffraction methods in determining the granulometric content of fluvial sediment samples // J. Environ. Geography. 2014. V. 6. P. 49–54.
- 12. Schmidt M.W.I., Rumpel. C., Kögel-Knabner I. Evaluation of an ultrasonic dispersion procedure to isolate primary organomineral complexes from soils // Europ. J. Soil Sci. 1999. № 1. V. 50. P. 87–94.
- Schulte P., Lehmkuhl F. The difference of two laser diffraction pattern as an indicator for post-depositional grain size reduction in loess-paleosol sequence // Paleogeography, Paleoclimatology, Paleoecology. 2017. V. 509. P. 126–136.
- Walton E.K., Stephens W.E., Shawa M.S. Reading segmented grain-size curves // Geological Magazine. 1980. V. 117. № 6. P. 517–644.

Deconvolution of Vertisols' Differential Grain-Size Curves

Yu. N. Vodyanitskii^{a, *}, E. Yu. Milanovskiy^{a, c}, E. G. Morgun^a, and A. T. Savichev^{b, c}

^aLomonosov Moscow State University, Moscow, Leninskie Gory, 1, 119234 Russia ^bGeological Institute, Russian Academy of Sciences, Moscow, Pyzhevsky per., 7, 119017 Russia ^cDokuchaev Soil Science Institute, Moscow, Pyzhevvsky per., 7a, 119017 Russia *e-mail: vu.vodyan@mail.ru

The deconvolution procedure for splitting the initial spectrum of the grain-size composition into constituent fractions in addition to clarifying the traditional indicators gives new information about the properties of individual grain-size fractions. Thanks to the deconvolution, it was possible to identify fractions that are "not visible" in the visual analysis of the initial particle spectrum. The new indicators include: the average diameter of the grain-size fraction d_{aver} , the dispersion value D of each fraction. Deconvolution allows us to characterize the fraction not by boundaries, but by the average particle diameter. Deconvolution revealed that the distribution of vertisols basic factions was consistent with the boundaries of the factions of the classification FAO and the particle size distribution is not consistent with the boundaries of the classes in the classification of Kachinskii (Russia), as in its width classes varies: index F = 2 and 5. The advantage of the classification FAO of particle size fractions is the same width with a constant value F = 3.2.

Keywords: soil grain-size classification by Kachinskii, International classification of particle size FAO, average diameter of grain fraction, dispersion of fraction