

**Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Самарский государственный технический университет»**

На правах рукописи



**БЫКОВА ТАТЬЯНА ВЛАДИМИРОВНА**

**Система методов оперативной оценки биотопов для ликвидации  
последствий их загрязнения поллютантами**

Специальность 1.5.15. Экология

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата технических наук

Научный руководитель:  
доктор технических наук,  
доцент  
Ермаков Василий Васильевич

Самара – 2026

## ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	5
ГЛАВА 1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И НОРМАТИВНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ДИАГНОСТИКИ БИОТОПОВ ТЕХНОГЕННО ТРАНСФОРМИРОВАННЫХ ТЕРРИТОРИЙ .....	13
1.1 Биотопы техногенно трансформированных территорий как объекты экологических исследований .....	13
1.2 Нормативно-методические основы оценки состояния загрязнённых грунтов .	17
1.3 Пространственная неоднородность загрязнения как методическая проблема экологической диагностики.....	21
1.4. Современные инструментальные методы диагностики загрязнения грунтов.	24
1.5 Инфракрасная спектроскопия и методы обработки спектральных данных в задачах экологической диагностики.....	25
1.6 Выводы по главе 1 .....	32
ГЛАВА 2. РАЗРАБОТКА И ОБОСНОВАНИЕ МЕТОДИКИ СПЕКТРАЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКИ ЗАГРЯЗНЁННЫХ ГРУНТОВ .....	34
2.1 Формирование экспериментальной базы почвенно-грунтовых образцов.....	34
2.2 Лабораторное определение физико-химических характеристик образцов.....	35
2.3 Методика спектральных измерений .....	39
2.4 Выводы по главе 2 .....	43
ГЛАВА 3. РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ СПЕКТРАЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКИ СОСТОЯНИЯ ТЕХНОГЕННО ТРАНСФОРМИРОВАННЫХ БИОТОПОВ .....	44
3.1 Спектральные характеристики натуральных и модельных образцов и предварительная обработка данных .....	44
3.2 Анализ взаимосвязи спектральных характеристик и агрохимических свойств грунтов.....	51
3.3 Индексный подход к оценке агрохимических характеристик грунтов.....	60
3.4 Индексный подход к диагностике загрязнения нефтепродуктами .....	67
3.5 Формирование системы оперативной оценки биотопов .....	74
3.6 Выводы по главе 3 .....	77

ГЛАВА 4. ОБОСНОВАНИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ СИСТЕМЫ ОПЕРАТИВНОЙ ОЦЕНКИ БИОТОПОВ ПРИ ЛИКВИДАЦИИ ПОСЛЕДСТВИЙ ЗАГРЯЗНЕНИЯ	79
4.1 Теоретическое моделирование пространственной структуры загрязнения и схем обследования.....	79
4.2 Характеристика обследуемых биотопов .....	82
4.3 Анализ практики инженерно-экологических обследований на техногенно нарушенных территориях.....	85
4.3.1 Особенности пространственно-временной структуры мониторинга на промышленной площадке.....	85
4.3.2 Особенности пространственной неоднородности загрязнения почв на территории размещения отходов спиртового производства .....	90
4.4 Апробация системы спектральной диагностики на техногенно трансформированных территориях .....	93
4.4.1 Организация полевых работ.....	93
4.4.2 Анализ результатов поверхностной контактной БИК - съёмки .....	95
4.4.3 Анализ вертикального распределения нефтяного загрязнения по данным глубинной контактной БИК - съёмки.....	99
4.4.4 Сопоставление контактной БИК - съёмки с традиционным объединённым пробоотбором.....	102
4.5 Выводы по главе 4 .....	104
ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....	106
СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ .....	108
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ЛИТЕРАТУРНЫХ ИСТОЧНИКОВ.....	110
ПРИЛОЖЕНИЕ 1. РАСШИРЕННЫЕ ДАННЫЕ АГРОХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ОБРАЗЦОВ ГРУНТОВ .....	130
ПРИЛОЖЕНИЕ 2. СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАТУРНЫХ ОБРАЗЦОВ ГРУНТОВ.....	134
ПРИЛОЖЕНИЕ 3. СПЕКТРАЛЬНЫЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ДАННЫЕ ПО ПОВЕРХНОСТНЫМ ТОЧКАМ .....	140

ПРИЛОЖЕНИЕ 4. СПЕКТРАЛЬНЫЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ДАННЫЕ ПО ГЛУБИНЫМ ПРОБАМ.....	141
ПРИЛОЖЕНИЕ 5. ПАТЕНТ РФ .....	144
ПРИЛОЖЕНИЕ 6. АКТЫ И СПРАВКИ О ВНЕДРЕНИИ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ .....	145

## ВВЕДЕНИЕ

**Актуальность темы исследования.** В условиях интенсивного промышленного освоения и длительного антропогенного воздействия природные биотопы подвергаются трансформации, сопровождающейся загрязнением грунтовой среды и формированием геохимических аномалий техногенного происхождения. На объектах накопленного экологического вреда загрязнение формируется под воздействием множества источников и процессов миграции веществ, вследствие чего его пространственная структура приобретает выраженный мозаичный характер.

Современные инженерно-экологические исследования, основанные на отборе проб и лабораторном анализе, обеспечивают высокую точность определения содержания загрязняющих веществ, однако характеризуют состояние среды лишь в отдельных точках наблюдений. Высокая пространственная неоднородность техногенных грунтов приводит к необходимости увеличения плотности пробоотбора, росту объёмов лабораторных исследований, увеличению сроков работ и экономических затрат.

Дополнительные трудности связаны со сложным строением техногенных грунтов, включающих смеси природных и антропогенных материалов, строительные и органические включения, а также продукты трансформации загрязняющих веществ. В подобных условиях традиционные методы дискретного анализа не всегда позволяют оперативно выявлять локальные зоны загрязнения и особенности их пространственного распределения.

В связи с этим актуальной является разработка системы методов оперативной оценки состояния нарушенных биотопов на основе анализа грунтовой среды. Такие методы должны обеспечивать получение пространственно детализированной информации непосредственно в процессе обследования территорий и способствовать повышению эффективности мероприятий по ликвидации последствий загрязнения и восстановлению нарушенных территорий.

Одним из перспективных направлений решения данной задачи является применение спектральных методов анализа, в частности ближней инфракрасной спектроскопии. Спектральные методы позволяют регистрировать изменения отражательных характеристик грунтов без сложной пробоподготовки и обеспечивают высокую оперативность получения данных. Однако применение спектроскопических методов для оперативной оценки состояния техногенно трансформированных биотопов требует разработки специализированных методических подходов, учитывающих высокую пространственную неоднородность объектов исследования.

**Степень разработанности темы исследования.** В настоящее время опубликовано большое количество научных работ, посвящённых исследованию состояния геосреды, процессов миграции загрязняющих веществ и формированию техногенных геохимических аномалий. Теоретические основы изучения техногенно нарушенных территорий представлены в трудах А.И. Перельмана, М.А. Глазовской, Г.В. Добровольского, Н.С. Касимова, М.С. Панина, Ю. Одума, М. Бигона и других исследователей.

В последние десятилетия активно развиваются спектральные методы исследования почв и грунтов. Значительный вклад в развитие спектральной диагностики внесли R.A. Viscarra-Rossel, E. Ben-Dor, B. Stenberg, A.M. Mouazen, J.B. Reeves, K.D. Shepherd, D.J. Brown, C.W. Chang, J.M. Soriano-Disla и другие авторы.

Вопросы обработки спектральной информации и построения калибровочных моделей рассмотрены в работах A. Savitzky, M.J.E. Golay, R.J. Barnes, M.S. Dhanoa, S. Wold, M. Sjöström, V.N. Vapnik, L. Breiman, J. Xu и других исследователей.

Отечественными исследователями активно развиваются методы спектрального и дистанционного анализа состояния почвенно-грунтового покрова, а также подходы к экологическому мониторингу техногенно нарушенных территорий. Данным направлениям посвящены работы Д.И. Руховича, И.Ю. Савина, Е.Ю. Прудниковой, М.Р. Шаяхметова, С.Н. Канищева, А.Л. Иванова, А.В.

Хабарова, П.В. Королёвой, Т.В. Пономарёвой, К.Л. Чертеса, В.В. Ермакова и других исследователей.

Несмотря на развитие спектральных методов исследования и накопленный опыт их применения в экологическом мониторинге, вопросы оперативной оценки состояния техногенно нарушенных биотопов в условиях высокой пространственной неоднородности грунтовой среды остаются недостаточно разработанными. Существенную сложность при проведении инженерно-экологических обследований представляет получение достоверной информации о пространственном распределении загрязнения.

В настоящее время отсутствуют методические подходы, позволяющие оперативно выявлять зоны загрязнения и получать пространственно детализированную информацию о состоянии геосреды. Это ограничивает возможности обоснования мероприятий по ликвидации последствий загрязнения и восстановлению нарушенных биотопов.

**Целью работы** является разработка системы оперативной идентификации источников эмиссии загрязняющих веществ, их локализации и предотвращения деградации биотопов в результате загрязнения поллютантами.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Провести анализ современных научных и нормативно-методических подходов диагностики состояния техногенно трансформированных биотопов и выявления источников загрязнения в грунтовой среде.
2. Сформировать экспериментальную базу из натуральных и модельных образцов почвогрунтов с различным составом, характеризующим уровень техногенного воздействия на них.
3. Установить зависимости между спектральными характеристиками и состоянием геосреды, а также определить особенности спектрального отклика почвогрунтов в ближнем инфракрасном диапазоне спектра.

4. Разработать методические подходы к обработке спектральных данных, а именно процедуры предобработки и методы многомерного анализа для обеспечения количественной оценки состава грунтов.

5. Сформировать систему спектральных индексов для определения диагностических признаков загрязнения и агрохимического состояния почвогрунтов.

6. Провести экспериментальную апробацию разработанного метода на модельных и производственных объектах и определить возможности его применения для оперативной идентификации источников загрязняющих веществ и локализации зон загрязнения биотопов.

#### **Научная новизна:**

1. Впервые разработан метод оперативной идентификации источников эмиссии загрязняющих веществ в биотопах техногенно трансформированных территорий, основанный на применении контактной ближней инфракрасной спектроскопии и индексной обработке спектральных данных, позволяющий проводить экспресс-оценку состава и загрязнённости грунтов без пробоподготовки.

2. Предложен индексный подход к интерпретации спектров ближней инфракрасной области для диагностики состояния техногенно трансформированных грунтов, обеспечивающий выявление спектральных признаков загрязнения нефтепродуктами и изменений агрохимических характеристик.

3. Установлены количественные зависимости между спектральными характеристиками грунтов в ближнем инфракрасном диапазоне и агрохимическими показателями, что позволяет использовать методы многомерной калибровки для оценки их содержания по данным спектральных измерений.

4. Обоснованы методические требования к проведению контактных спектральных обследований техногенно трансформированных территорий, обеспечивающие повышение достоверности выявления источников загрязнения и локализации зон их распространения.

**Объект исследования:** биотопы техногенно трансформированных территорий, характеризующиеся наличием источников поступления загрязняющих веществ и изменёнными свойствами геосреды.

**Предмет исследования:** закономерности распределения загрязняющих веществ в биотопах техногенно трансформированных территорий и методические подходы к их оперативной идентификации и локализации на основе спектральных методов анализа.

**Теоретическая и практическая значимость:**

1. Сформирован и систематизирован массив спектральных характеристик грунтов различного состава, включающий образцы, для которых определён ряд агрохимических показателей, а также модельные образцы с заданным содержанием нефтепродуктов.

2. Разработанный метод обработки спектральной информации и сформированные массивы спектральных данных внедрены в практическую деятельность ООО «УкуЛаб» и используются при интерпретации результатов спектроскопических измерений, сопоставлении спектральных признаков с физико-химическими характеристиками грунтов и построении количественных моделей оценки загрязнения.

3. Предложенный метод контактной ближней инфракрасной спектроскопии апробирован при проведении экологических обследований территорий, нарушенных антропогенной деятельностью, и использован при выполнении работ по рекультивации техногенно деградированных земель на территории Самарской области, что позволило повысить оперативность диагностики состояния грунтов и локализации зон загрязнения.

4. Результаты диссертационного исследования используются в образовательном процессе ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет» при преподавании дисциплин «Основы планирования и математической обработки результатов эксперимента», «Методы исследования и оценки экологической опасности объектов техносферы» и «Методы и приборы контроля окружающей среды».

5. На основе результатов исследования разработан и запатентован способ определения содержания фосфора в почве (патент РФ № 2827683 С1 от 01.10.2024, заявка № 2023132097 от 06.12.2023). Предложенное техническое решение обеспечивает повышение оперативности и точности определения фосфорсодержащих соединений в грунтах и может использоваться при проведении экологического мониторинга, агрохимических обследований и контроле эффективности рекультивационных мероприятий.

**Методология и методы исследования.** Методологической основой разработанной системы исследования является сочетание спектральных, лабораторно-химических и статистических методов анализа. Спектральные измерения выполнялись методом спектроскопии диффузного отражения в ближнем инфракрасном диапазоне спектра (645-1085 и 1600-2400 нм) с использованием контактного зондирования поверхности грунтов. Определение содержания нефтепродуктов в почвенных образцах проводилось гравиметрическим методом в соответствии с методикой ПНД Ф 16.1:2:2.2:2.3.64-10. Агрохимические показатели почвогрунтов определялись с использованием стандартных методик агрохимического анализа, применяемых в почвоведении и экологических исследованиях. Обработка спектральных данных включала процедуры предобработки спектров, расчёт спектральных индексов и применение методов многомерной статистики. Построение калибровочных моделей и статистическая обработка результатов выполнялись в программной среде The Unscrambler.

**Соответствие диссертации специальности, по которой она представлена к защите.** Диссертационное исследование соответствует п. 7 паспорта специальности 1.5.15. Экология (технические науки) «Эколого-методические основы ..., системы защиты биотопов от деградации и загрязнения поллютантами».

**Положения, выносимые на защиту:**

1. Метод оперативной диагностики состояния техногенно трансформированных биотопов, основанный на контактной ближней инфракрасной спектроскопии и индексной обработке спектральных данных,

позволяющий проводить экспресс-оценку состава и загрязнённости геосреды без предварительной пробоподготовки образцов;

2. Система спектральных индексов, обеспечивающая количественную оценку содержания нефтепродуктов и фосфорсодержащих соединений в грунтах по данным ближней инфракрасной спектроскопии;

3. Калибровочные модели многомерного анализа, позволяющие определять агрохимические показатели грунтов различного состава по спектральным характеристикам ближней инфракрасной области;

4. Методические требования к проведению контактных спектральных обследований техногенно трансформированных территорий, обеспечивающие повышение достоверности выявления источников загрязнения и локализации зон их распространения.

**Достоверность результатов.** Достоверность положений и выводов, сформулированных в диссертационном исследовании, подтверждается репрезентативностью и значительным объемом экспериментальных данных, включающих натурные и модельные образцы грунтов различного происхождения и состава. Сопоставление данных, полученных методом ближней ИК-спектроскопии, с результатами независимого химико-аналитического контроля подтвердило согласованность количественных оценок состава почвогрунтов. Статистическая обработка экспериментальных данных выполнена с применением методов многомерного анализа (PCA, PLS), что позволило идентифицировать устойчивые спектральные признаки, характеризующие содержание нефтепродуктов и агрохимикатов. Дополнительную верификацию обеспечили контрольные измерения, проведённые в аккредитованной лаборатории Научно-аналитического центра промышленной экологии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Самарский государственный технический университет» (аттестат аккредитации РОСС RU.0001.512985).

**Апробация результатов работы.** Основные положения диссертации и отдельные фрагменты проведенных исследований были доложены и обсуждены на XXIX и XXX Международных научных конференциях студентов, аспирантов и

молодых учёных «Ломоносов» (г. Москва, 2022, 2023); Всероссийском молодёжном научном форуме «Science of the Future» (г. Орёл, 2023); XI Международном молодёжном форуме «Наука. Образование. Производство» (г. Белгород, 2023); Всероссийской научно-практической конференции «Ашировские чтения» (г. Самара, 2023, 2025); Всероссийской научно-практической конференции «Экологический мониторинг опасных промышленных объектов: современные достижения, перспективы и обеспечение экологической безопасности населения» (г. Саратов, 2024); II Международной научно-практической конференции молодых учёных, аспирантов и студентов «Путохинские чтения» (г. Кинель, 2024); XX Всероссийской конференции-конкурсе студентов и аспирантов «Актуальные проблемы недропользования» (г. Санкт-Петербург, 2024); XXV и XXVI Международных научно-практических конференциях «Актуальные проблемы экологии и природопользования», РУДН (г. Москва, 2024, 2025).

**Личный вклад соискателя** заключается в выполнении экспериментальных исследований, обработке и интерпретации полученных данных, а также в разработке и обосновании методических подходов. Публикации, содержащие результаты работы, подготовлены лично и в соавторстве.

**Публикации по результатам исследований.** Основное содержание диссертации изложено в 12 публикациях, в том числе 2 статьи – в журналах, рекомендованных ВАК РФ. Опубликовано 1 монография и получен один патент на изобретение.

**Структура и объем работы.** Диссертационная работа изложена на 146 листах машинописного текста и состоит из введения, 4 глав, списка использованных источников из 146 наименований, содержит 29 рисунков, 20 таблиц и 6 приложений.

# ГЛАВА 1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И НОРМАТИВНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ДИАГНОСТИКИ БИОТОПОВ ТЕХНОГЕННО ТРАНСФОРМИРОВАННЫХ ТЕРРИТОРИЙ

## 1.1 Биотопы техногенно трансформированных территорий как объекты экологических исследований

В экологических исследованиях термин «биотоп» используется для обозначения пространственно ограниченного участка среды, характеризующегося определённым сочетанием абиотических факторов и формирующего условия существования биологических сообществ. В классических работах по экологии биотоп рассматривается как совокупность физических и химических характеристик среды, включающих геологическое строение, почвенный покров, гидрологические условия, микроклимат и другие параметры, определяющие структуру и функционирование экосистем [35, 65, 78].

С позиций экосистемного подхода биотоп выступает абиотической основой биоценоза и определяет пространственную организацию экосистем. В трудах Ю. Одума показано, что свойства абиотической среды во многом определяют устойчивость биологических сообществ и характер их взаимодействия с окружающей средой [65]. Аналогичные положения отражены в работах М. Бигона и соавторов, где подчёркивается роль пространственной структуры среды и её физико-химических параметров в распределении популяций и формировании экологических ниш организмов [35].

В геоэкологии и ландшафтной геохимии биотоп рассматривается не только как среда обитания организмов, но и как пространственная единица природной среды, в пределах которой протекают процессы миграции вещества и трансформации химических соединений. В работах А. И. Перельмана показано, что миграция химических элементов в ландшафтах определяется взаимодействием почвенного покрова, водной среды, атмосферы и биоты [71]. Дальнейшее развитие эти представления получили в исследованиях М. А. Глазовской, посвящённых геохимической структуре природных и техногенных ландшафтов и закономерностям перераспределения химических элементов в геосистемах [43]. В

данном контексте биотоп может быть интерпретирован как функциональное пространство, в котором сопряжены процессы аккумуляции, миграции и трансформации вещества.

Важную роль в функционировании экосистем играет почвенно-грунтовый покров, участвующий в биогеохимических процессах. Почва обеспечивает аккумуляцию и миграцию химических элементов, а также обмен веществ между компонентами природной среды. В исследованиях Г. В. Добровольского и Е. Д. Никитина почва рассматривается как один из основных компонентов биосферы, определяющий взаимодействие литосферы, гидросферы, атмосферы и биоты [46]. В пределах почвенно-грунтового массива происходят накопление, перераспределение и преобразование загрязняющих веществ.

В условиях интенсивного хозяйственного освоения значительная часть природных биотопов подвергается антропогенной трансформации [45, 81]. Развитие промышленности, урбанизация, строительство инфраструктуры, добыча полезных ископаемых и размещение отходов производства приводят к существенным изменениям структуры поверхностных отложений и физико-химических свойств грунтовой среды [80]. В результате формируются территории с изменёнными природными условиями, которые в геоэкологических исследованиях рассматриваются как техногенно трансформированные биотопы [32, 37, 89].

Под биотопами техногенно трансформированных территорий понимаются участки природной среды, в пределах которых структура грунтового массива, геохимические процессы и экологические функции экосистем существенно изменены под воздействием длительной хозяйственной деятельности человека [36, 39, 49]. Для таких территорий характерны нарушение природной структуры грунтов, формирование техногенных отложений и изменение направленности миграции химических элементов в почвенно-грунтовой среде.

Одной из характерных особенностей техногенно трансформированных территорий является формирование насыпных и переработанных грунтов [64, 92]. Такие образования возникают в результате строительной деятельности,

размещения отходов производства и проведения рекультивационных работ. Техногенные грунты отличаются высокой неоднородностью состава, наличием антропогенных включений и значительной вариабельностью физико-химических свойств [42, 74, 124]. В пределах одного участка возможно резкое изменение состава грунтов и свойств среды, что существенно осложняет их экологическую оценку [51].

Техногенная трансформация сопровождается поступлением в почвенно-грунтовую толщу различных загрязняющих веществ. На территориях промышленного освоения наиболее распространёнными загрязнителями являются тяжёлые металлы, нефтепродукты, полициклические ароматические углеводороды и другие токсичные соединения [41, 59, 61, 66]. В результате формируются техногенные геохимические аномалии, характеризующиеся повышенным содержанием загрязняющих веществ и представляющие потенциальную экологическую опасность [52, 54].

Геохимические последствия антропогенной трансформации подробно рассмотрены в ряде исследований. Н. С. Касимов и соавторы отмечают, что урбанизация и промышленное освоение территорий сопровождаются формированием техногенных геохимических аномалий и выраженной пространственной неоднородностью распределения химических элементов в поверхностных отложениях [54]. Аналогичные закономерности приводятся в работе М. С. Панина, где показано, что техногенные ландшафты характеризуются сложной системой миграции и перераспределения химических элементов [68].

В настоящем исследовании биотоп техногенно трансформированной территории рассматривается не только как среда обитания или геохимическая система, но как объект инженерно-экологического анализа. В пределах такого биотопа совмещаются процессы накопления, трансформации и вторичной миграции загрязняющих веществ, что позволяет рассматривать его как функциональную единицу диагностики состояния окружающей среды и обоснования природоохранных мероприятий.

Антропогенное воздействие на геологическую среду может приводить к изменению природных геохимических и геодинамических процессов [40, 70]. Согласно данным ряда исследований, техногенная деятельность формирует новые эколого-геодинамические условия и способна оказывать существенное влияние на устойчивость природных экосистем [55, 67, 97]. В частности, М. А. Харькина отмечает, что трансформация геосреды в результате хозяйственной деятельности может сопровождаться развитием подтопления территорий, активизацией склоновых процессов, формированием техногенного карста и деградацией природных экосистем [91].

Помимо изменения природных процессов, техногенная трансформация территорий сопровождается формированием специфической пространственной структуры загрязнения. Одной из характерных особенностей техногенно трансформированных территорий является сложная пространственная структура загрязнения, проявляющаяся в формировании геохимических аномалий мозаичного типа, обусловленных неравномерным распределением источников техногенного воздействия и особенностями миграции загрязняющих веществ в почвенно-грунтовой среде. Такая пространственная неоднородность является важной характеристикой техногенных ландшафтов и должна учитываться при проведении экологических исследований и мониторинга состояния геосреды [50].

В условиях решения задач ликвидации последствий загрязнения биотопы техногенно трансформированных территорий рассматриваются не только как объекты наблюдения, но и как объекты управления. В данном случае биотоп целесообразно интерпретировать как функциональную систему, в пределах которой почвенно-грунтовой покров выступает основным аккумулятором загрязняющих веществ, а миграционные потоки определяют их перераспределение. При этом растительный покров может рассматриваться как дополнительный индикатор состояния среды, отражающий интегральный эффект воздействия загрязняющих веществ.

Загрязнение почвенно-грунтовой среды оказывает непосредственное влияние на состояние биотопов, определяя изменение условий существования

растительных сообществ, нарушение процессов миграции вещества и снижение экологической устойчивости территорий [32, 62, 97]. В этой связи своевременное выявление источников поступления загрязняющих веществ и локализация зон их распространения рассматриваются как необходимое условие предотвращения дальнейшей деградации техногенно трансформированных биотопов.

Высокая пространственная неоднородность загрязнения и сложная структура техногенных грунтов обуславливают необходимость применения методов, обеспечивающих получение детализированной информации о состоянии биотопа непосредственно в процессе обследования. Это определяет актуальность разработки системы методов оперативной оценки, позволяющей выявлять источники загрязнения, устанавливать границы зон их распространения и обосновывать мероприятия по восстановлению нарушенных территорий.

Рассмотрение биотопов техногенно трансформированных территорий как сложных геоэкологических систем с выраженной пространственной неоднородностью и активными миграционными процессами определяет необходимость разработки методов их оперативной диагностики. В рамках настоящего исследования такой подход реализуется применительно к биотопам Самарской области, что позволяет не только выявлять особенности распределения загрязняющих веществ, но и обосновывать инженерные решения по локализации источников загрязнения, снижению антропогенной нагрузки и предотвращению дальнейшей деградации нарушенных территорий.

## **1.2 Нормативно-методические основы оценки состояния загрязнённых грунтов**

Оценка состояния грунтов на техногенно трансформированных территориях выполняется в рамках действующей системы санитарных, экологических и инженерных нормативов. Результаты таких исследований используются для решения двух взаимосвязанных задач: установления санитарной допустимости дальнейшего использования территории и обоснования проектных решений по рекультивации нарушенных земель [44, 88]. Соответственно, перечень

исследуемых показателей формируется с учётом требований санитарного законодательства, нормативных документов в области инженерно-экологических изысканий и стандартов, регулирующих восстановление нарушенных земель [1, 2].

Санитарные требования к качеству почв населённых территорий установлены СанПиН 2.1.3684-21 [2]. Документ распространяется на почвы и грунтовые смеси, используемые при благоустройстве и озеленении, и предусматривает обязательный лабораторный контроль их химического состава. Минимальный перечень показателей включает тяжёлые металлы (свинец, кадмий, цинк, медь, никель, мышьяк и ртуть), органические токсиканты, прежде всего бенз(а)пирен и нефтепродукты, показатель кислотности (рН), а также суммарный показатель загрязнения. Указанные параметры рассматриваются как основные индикаторы техногенного воздействия на почвенную среду и используются при санитарной оценке состояния почв [2, 26].

Интерпретация результатов анализа выполняется путём сопоставления фактических концентраций загрязняющих веществ с гигиеническими нормативами, установленными СанПиН 1.2.3685-21, содержащим предельно допустимые и ориентировочно допустимые концентрации химических веществ в компонентах окружающей среды [1].

Методические подходы к санитарной оценке загрязнения почв изложены в МУ 2.1.7.730-99 [26]. Документ предусматривает использование суммарного показателя загрязнения ( $Z_c$ ), отражающего совокупное содержание приоритетных загрязняющих веществ. Расчёт данного показателя позволяет отнести почвы к различным категориям загрязнения и определить ограничения на дальнейшее использование территории. Результаты санитарной оценки используются при принятии проектных решений, включая разработку мероприятий по рекультивации нарушенных земель.

Объём и состав исследований почвенно-грунтового покрова определяется программой инженерно-экологических изысканий, выполняемых для обоснования проектных решений. Общие требования к организации таких работ установлены СП 47.13330.2016 [3], а специальные положения по проведению экологических

исследований содержатся в СП 502.1325800.2021 [4]. Действующие нормативные документы не устанавливают единого перечня химических показателей или фиксированного объема лабораторных анализов, обязательных для всех объектов. Перечень определяемых параметров, количество проб и объем аналитических работ формируются разработчиками программы изысканий с учетом особенностей территории, характера антропогенного воздействия и задач проектирования.

Отбор проб почв и подготовка их к лабораторному анализу выполняются в соответствии с требованиями ГОСТ 17.4.3.01-2017, ГОСТ 17.4.4.02-2017 и ГОСТ Р 58595-2019 [20-22], обеспечивающими единообразие процедур пробоотбора и сопоставимость получаемых результатов.

Требования к восстановлению нарушенных земель установлены ГОСТ Р 59057-2020 [23]. Стандарт регламентирует порядок разработки и реализации мероприятий по рекультивации с учетом предполагаемого направления последующего использования территории. В случаях, когда проектом предусматривается биологический этап рекультивации, на нарушенной территории формируется плодородный слой, обеспечивающий развитие растительного покрова и восстановление экологических функций почвенного покрова.

При формировании плодородного слоя применяются требования стандартов системы охраны природы серии ГОСТ 17.5. В частности, ГОСТ 17.5.3.05-84 устанавливает требования к качеству наносимого плодородного слоя, включая повышенное содержание гумуса и элементов питания по сравнению с исходными грунтами и отсутствие опасных концентраций токсичных веществ [6]. Основные характеристики плодородного слоя приведены в ГОСТ 17.5.3.06-85 [7]. К ним относятся содержание гумуса, реакция среды, содержание обменного натрия, водорастворимых солей и гранулометрический состав. Наряду с указанными характеристиками при обследовании техногенно трансформированных территорий нередко оценивается обеспеченность почв элементами минерального питания растений, поскольку этот показатель отражает потенциальное плодородие формируемого почвенного слоя. В почвоведении обеспеченность элементами питания рассматривается как один из факторов, определяющих способность почвы

поддерживать развитие растительного покрова. Наиболее важными макроэлементами являются азот, фосфор и калий, которые потребляются растениями в наибольших количествах и используются при оценке потенциального плодородия почв [8, 13, 14].

Контроль качества рекультивированных земель осуществляется на этапе приёмки выполненных работ. ГОСТ Р 59057-2020 предусматривает оценку показателей, характеризующих соответствие выполненных работ проектным решениям [23]. К ним относятся наличие и объём неиспользованного плодородного слоя, мощность и равномерность его нанесения, состояние поверхности рекультивируемой территории и сформированность растительного покрова. Для нефтезагрязнённых территорий дополнительно контролируется содержание нефтеуглеводородов в поверхностном слое грунта мощностью до 20 см, а также максимальные значения содержания нефтяных углеводородов в более глубоких горизонтах. Остаточное содержание нефтяных загрязнений должно соответствовать допустимым уровням, установленным региональными нормативами.

Дополнительным источником информации при обосновании перечня загрязняющих веществ, подлежащих контролю в ходе инженерно-экологических исследований, являются данные государственного мониторинга почв. Методические основы таких наблюдений изложены в РД 52.18.718-2008 [25]. К числу приоритетных загрязняющих веществ относятся тяжёлые металлы, мышьяк, фтор, нефть и нефтепродукты, а также некоторые неорганические соединения, включая нитраты и сульфаты.

На региональном уровне перечень контролируемых компонентов уточняется на основе данных наблюдательной сети территориальных органов Росгидромета. Поскольку рассматриваемые в работе объекты расположены на территории Самарской области, в качестве источника региональной информации использованы материалы Приволжского управления по гидрометеорологии и мониторингу окружающей среды. По данным региональных наблюдений для Самарской области характерно загрязнение почв тяжёлыми металлами и нефтепродуктами, а в

сельскохозяйственных районах дополнительно контролируется содержание хлорорганических и фосфорорганических пестицидов [98].

Проведенный анализ нормативно-методической базы показывает, что оценка состояния загрязнённых грунтов основывается на сочетании санитарных требований, нормативов инженерно-экологических изысканий, стандартов рекультивации нарушенных земель и данных государственного экологического мониторинга. Санитарные нормативы определяют базовый перечень токсикологических показателей и критерии оценки загрязнения почв, тогда как дополнительные физико-химические и агрохимические характеристики используются для обоснования проектных решений по восстановлению нарушенных территорий.

### **1.3 Пространственная неоднородность загрязнения как методическая проблема экологической диагностики**

Для техногенно трансформированных территорий характерно неравномерное распределение загрязняющих веществ в почвенно-грунтовой среде. В природных ландшафтах миграция химических элементов определяется геохимическими закономерностями, связанными с рельефом, водным режимом, составом пород и биогеохимическими процессами [43, 71]. В условиях антропогенного воздействия структура загрязнения дополнительно осложняется влиянием локальных источников эмиссии, особенностями техногенного рельефа, фильтрационными потоками, неоднородностью состава грунтов и процессами вторичного перераспределения вещества [32, 54, 74].

Исследования урбанизированных и промышленных территорий показывают, что техногенные загрязнения формируют сложные пространственные поля с чередованием участков фоновых и повышенных концентраций [52, 54, 92]. В работах Н. С. Касимова и соавторов установлено, что распределение химических элементов в городских грунтах тесно связано с функциональной структурой территории и интенсивностью антропогенной нагрузки [54]. Наиболее высокие концентрации загрязняющих веществ приурочены к промышленным зонам,

транспортным магистралям и участкам длительного техногенного воздействия. При этом геохимические аномалии имеют сложную конфигурацию и редко формируют однородные загрязнённые зоны.

Сходные закономерности выявлены и в современных исследованиях, посвящённых пространственной структуре загрязнения городских почв тяжёлыми металлами и органическими поллютантами. Так, N. E. Kosheleva и соавторы установили, что пространственная структура загрязнения почв Москвы определяется сочетанием плотности застройки, транспортной нагрузки и особенностей городского землепользования [118]. В работе E. E. Golia и соавторов подчёркивается, что даже в пределах близких по функциональному назначению территорий распределение потенциально токсичных элементов может существенно различаться вследствие локальных особенностей техногенной нагрузки и свойств почвенного покрова [116]. Аналогичные выводы приводятся Chen K. и соавторами для полициклических ароматических углеводородов, пространственная структура которых определяется сочетанием региональных и локальных факторов загрязнения [111].

Особенно сложный характер пространственная неоднородность приобретает на территориях, где происходило длительное накопление отходов, перемещение грунтов или многократное изменение функционального использования участка. В таких условиях современная структура загрязнения отражает не только расположение исходных источников эмиссии, но и последствия последующего техногенного перераспределения вещества. Существенное влияние оказывает неоднородность самих техногенных грунтов, формирующихся в результате смешения различных типов природного и искусственного материала [42, 74].

Высокая пространственная изменчивость характерна и для нефтепродуктов - одного из наиболее распространённых загрязнителей техногенно трансформированных территорий. По данным А. Н. Геннадиева, Ю. И. Пиковского и соавторов, нефтяные углеводороды способны активно перераспределяться в геосреде под действием фильтрационных, сорбционных и капиллярных процессов [41]. На их миграцию существенно влияют гранулометрический состав грунтов,

степень увлажнения, содержание органического вещества и наличие техногенных включений. Вследствие этого нефтяное загрязнение часто имеет очаговый характер, а концентрации углеводородов могут резко изменяться на небольших расстояниях. В диссертационной работе М. В. Быковой показано, что пространственная структура нефтяного загрязнения в урбанизированных территориях отличается выраженной мозаичностью и зависит как от расположения источников загрязнения, так и от особенностей строения техногенных отложений [38].

Указанные особенности существенно осложняют экологическую диагностику состояния техногенно нарушенных территорий. В инженерно-экологических изысканиях оценка загрязнения традиционно основана на системе точечного пробоотбора с последующим лабораторным анализом образцов грунта [3, 4]. Размещение точек наблюдений определяется площадью участка, предполагаемыми источниками загрязнения, инженерно-геологическими условиями и требованиями нормативных документов. Однако результаты лабораторных исследований характеризуют состояние среды только в пределах конкретных точек отбора проб и не позволяют напрямую оценивать пространственную структуру загрязнения между ними.

При выраженной неоднородности техногенных геохимических полей подобный подход имеет ряд ограничений. При недостаточной плотности сети наблюдений локальные зоны загрязнения могут не фиксироваться, а границы аномалий определяются с высокой степенью неопределённости [52, 63, 86]. Особенно это характерно для территорий со сложным строением техногенных грунтов и неоднородным распределением загрязняющих веществ по глубине. В работе Е. А. Новых и соавторов отмечается, что существующие схемы инженерно-экологических изысканий не всегда обеспечивают достаточную детальность пространственной оценки загрязнения почвогрунтов [63].

Повышение достоверности экологической диагностики требует увеличения плотности сети пробоотбора и объёма лабораторных анализов [69]. Однако такой подход сопровождается ростом продолжительности исследований, увеличением

стоимости работ и усложнением организации полевых обследований [58, 90]. Кроме того, даже значительное увеличение количества проб не всегда позволяет полностью воспроизвести сложную пространственную структуру загрязнения, особенно в условиях локальных техногенных аномалий.

Пространственная неоднородность загрязнения является одной из характерных особенностей техногенно трансформированных территорий и существенно влияет на достоверность экологической диагностики. Мозаичная структура техногенных геохимических полей и локальный характер распределения загрязняющих веществ ограничивают возможности традиционного точечного пробоотбора и обуславливают необходимость применения методов, обеспечивающих получение более детализированной пространственной информации о состоянии грунтов непосредственно в процессе обследования территории. В условиях решения задач локализации источников загрязнения и предотвращения дальнейшей деградации биотопов особую актуальность приобретают подходы, позволяющие повысить оперативность и пространственную детальность экологических исследований.

#### **1.4. Современные инструментальные методы диагностики загрязнения грунтов**

Оценка состояния загрязнённых грунтов при проведении инженерно-экологических исследований основана преимущественно на лабораторном определении содержания загрязняющих веществ и физико-химических характеристик почвенно-грунтовой среды. Состав выполняемых исследований определяется особенностями обследуемой территории, характером техногенного воздействия и предполагаемым составом загрязняющих веществ [3, 4]. В ходе исследований определяют содержания тяжёлых металлов, нефтепродуктов, полициклических ароматических углеводородов и других токсичных соединений, а также агрохимические показатели грунтов, включая содержание органического вещества, азота, подвижных форм фосфора и калия, кислотность и содержание водорастворимых солей [61, 87, 118].

Для решения указанных задач применяются методы атомно-абсорбционной спектроскопии, индуктивно связанной плазмы, рентгенофлуоресцентного анализа, газовой хроматографии, вольтамперометрии, инфракрасной спектроскопии экстрактов, а также фотометрические, флуориметрические, титриметрические и гравиметрические методы анализа [24, 25, 28, 60]. Применение указанных методов позволяет получать количественные характеристики состава грунтов с высокой аналитической точностью и выполнять санитарно-гигиеническую оценку состояния территории [63, 72].

Вместе с тем проведение лабораторных исследований связано с выполнением полного цикла аналитических процедур, включающего отбор, транспортировку, подготовку и последующий анализ проб. При обследовании техногенно нарушенных территорий это увеличивает сроки и стоимость работ, особенно при необходимости высокой плотности наблюдений. Поэтому в инженерно-экологических исследованиях всё более широко применяются инструментальные методы полевой диагностики, позволяющие получать предварительную информацию о состоянии грунтов непосредственно в процессе обследования территории [139, 141].

### **1.5 Инфракрасная спектроскопия и методы обработки спектральных данных в задачах экологической диагностики**

Инфракрасная спектроскопия в последние годы рассматривается как одно из наиболее перспективных направлений инструментального анализа почв и грунтов в задачах экологического мониторинга и инженерно-экологических исследований [126]. Расширение области применения метода связано с развитием портативных спектральных систем и возможностью получения информации о составе почвенно-грунтовой среды без выполнения сложной пробоподготовки [136].

Принцип инфракрасной спектроскопии основан на регистрации взаимодействия электромагнитного излучения с веществом. Формирование спектрального отклика определяется колебательными переходами химических связей, вследствие чего отражательные спектры почв и грунтов содержат

информацию о минеральном составе, содержании органического вещества, влаги и других компонентах геосреды [48, 102, 112].

В почвенной спектроскопии принято выделять средний инфракрасный диапазон (MIR, 4000-600 см<sup>-1</sup>) и ближний инфракрасный диапазон (NIR, 780-2500 нм). MIR-спектроскопия характеризуется наличием интенсивных фундаментальных полос поглощения и преимущественно используется при лабораторном исследовании минерального и органического состава почв [129]. В отличие от неё, ближняя инфракрасная спектроскопия, включая видимый и ближний инфракрасный диапазоны (vis-NIR), основана на регистрации обертонов и комбинационных колебаний химических связей и допускает проведение измерений в режиме диффузного отражения непосредственно по поверхности твёрдого образца [110].

Развитие методов почвенной спектроскопии поддерживается на международном уровне. Продовольственная и сельскохозяйственная организация ООН (FAO) рассматривает vis-NIR-спектроскопию как перспективный инструмент цифрового почвенного картографирования, мониторинга состояния почв и формирования глобальных спектральных библиотек [104, 107, 134]. В рамках международных инициатив подчёркивается необходимость стандартизации спектральных измерений, расширения калибровочных баз данных и повышения сопоставимости спектральных моделей для различных типов почв.

Наиболее широкое распространение метод получил при оценке свойств почв, непосредственно влияющих на формирование спектрального отклика. В первую очередь это относится к содержанию органического вещества, поскольку органические соединения существенно влияют на форму спектральной кривой и интенсивность поглощения в ближней инфракрасной области [76]. Для моделей прогнозирования содержания органического вещества в ряде исследований получены высокие значения коэффициентов детерминации (до  $R^2=0,87$ ) при использовании комплексных спектральных параметров [123, 135]. Современные работы также демонстрируют возможность оценки содержания органического

вещества непосредственно в полевых условиях с использованием портативных спектральных систем [119].

Высокая информативность спектральных данных характерна и для оценки влажности почв и грунтов [75, 142]. Вода имеет выраженные полосы поглощения в ближней инфракрасной области, поэтому изменение влажности существенно влияет на форму спектра. С одной стороны, это позволяет использовать vis-NIR-спектроскопию для оценки влагосодержания, с другой - делает влажность одним из факторов, влияющих на точность определения других компонентов почвенной матрицы.

Спектральные данные также используются при оценке гранулометрического состава почв, прежде всего содержания глинистых фракций. Информативность vis-NIR-спектроскопии в данном случае обусловлена наличием спектральных признаков глинистых минералов, связанных с гидроксильными группами и связанной водой. Вследствие этого прогноз содержания тонкодисперсных фракций основывается на статистических взаимосвязях между спектральными характеристиками образцов и результатами лабораторного гранулометрического анализа [136].

По мере развития методов математической обработки спектральных данных область применения vis-NIR-спектроскопии существенно расширилась. В зарубежных исследованиях показана возможность оценки общего азота, катионообменной ёмкости, карбонатности, кислотности почв и ряда других агрохимических показателей [114, 131]. Вместе с тем большинство указанных параметров не обладает собственными выраженными полосами поглощения в ближнем инфракрасном диапазоне. Вследствие этого их прогнозирование носит преимущественно косвенный характер и основывается на статистических взаимосвязях с органическим веществом, минералогическим составом, влажностью и другими характеристиками почвенной матрицы.

Аналогичный подход используется при диагностике тяжёлых металлов [59, 61]. Поскольку большинство металлов не формирует собственных интенсивных полос поглощения в vis-NIR-диапазоне, оценка их содержания осуществляется по

косвенным спектральным признакам, связанным с органическим веществом, соединениями железа, глинистыми минералами и другими компонентами почвы. В отдельных исследованиях для ряда элементов получены значения коэффициента детерминации до  $R^2 = 0,8$  и выше, однако устойчивость подобных моделей в значительной степени определяется типом почв, диапазоном концентраций и репрезентативностью калибровочной выборки.

В отличие от тяжёлых металлов, углеводороды обладают собственными спектральными признаками, связанными с колебаниями С-Н-связей. Наиболее информативные области в ближнем инфракрасном диапазоне располагаются в интервалах около 1700-1760 нм и 2290-2330 нм [99, 127]. Наличие данных спектральных особенностей обуславливает возможность применения vis-NIR-спектроскопии при диагностике нефтяного загрязнения грунтов. Современные исследования также рассматривают методы обнаружения и интерпретации углеводородного загрязнения на основе гиперспектральных данных [109, 121]. Для техногенно трансформированных территорий это имеет практическое значение не только с точки зрения количественной оценки содержания нефтепродуктов, но и в задачах оперативной локализации участков загрязнения при проведении экологических обследований и рекультивационных работ.

Практическое применение данного подхода подтверждается наличием нормативной базы. В Российской Федерации действует ГОСТ Р 54039-2010, регламентирующий определение содержания нефтепродуктов с использованием БИК-спектроскопии в диапазоне массовой доли нефтепродуктов от 0,1 до 10,0% [17]. Согласно стандарту, метод основан на измерении диффузного отражения в области 800-2400 нм и пересчёте спектрального сигнала в содержание нефтепродуктов с помощью градуировочной модели, построенной по образцам с известными значениями, определёнными аттестованными базовыми методами. В то же время сам ГОСТ фактически фиксирует ключевое ограничение БИК-подхода - зависимость результата от качества градуировки. Градуировочный массив должен включать не менее 100 образцов. При этом он должен охватывать весь диапазон концентраций нефтепродуктов, а также вариации физического и химического

состава исследуемых почв. Кроме того, стандарт указывает на необходимость отдельных градуировок для разных диапазонов содержания нефтепродуктов, почв с различным содержанием органического вещества, а также образцов, подготовленных разными способами.

Следовательно, наличие стандарта не снимает проблему устойчивости спектральной диагностики. Напротив, оно показывает, что применение БИК-спектроскопии требует строгого контроля условий измерений, состава калибровочной выборки и способа подготовки проб. При изменении влажности, гранулометрического состава, содержания гумуса, степени выветривания нефтепродуктов или типа почвенной матрицы спектральный отклик может существенно изменяться. Это ограничивает переносимость калибровочных моделей между почвами различного генезиса и техногенными грунтами сложного состава.

Отечественные исследования также посвящены анализу спектральной отражательной способности почв, оценке содержания органического вещества, созданию спектральных библиотек и разработке подходов к обработке спектральных данных [56, 82-85, 93-96]. Полученные результаты подтверждают перспективность применения БИК-спектроскопии в задачах экологического мониторинга, однако одновременно указывают на необходимость использования методов математической обработки спектров и построения устойчивых калибровочных моделей [34, 47].

Сложность интерпретации спектров почв и грунтов обусловлена тем, что почвенная матрица является многокомпонентной системой. Спектральный отклик формируется одновременно минеральным составом, органическим веществом, влажностью, гранулометрическими характеристиками, состоянием поверхности и присутствием загрязняющих соединений. В результате полосы поглощения перекрываются, а отдельный компонент редко может быть определён только по одной спектральной особенности [112]. Поэтому информативность анализа определяется не изолированными длинами волн, а общей структурой спектрального сигнала.

В связи с этим практическое применение ИК-спектроскопии невозможно без предварительной обработки спектральных данных. Наиболее распространёнными процедурами являются сглаживание, коррекция базовой линии, нормализация, преобразование отражения в поглощение и расчёт производных спектров [133]. Для уменьшения влияния рассеяния применяются стандартное нормальное преобразование (SNV) и мультипликативная коррекция рассеяния (MSC) [101]. Эти методы позволяют снизить влияние шума, различий в освещённости, неоднородности поверхности и гранулометрического состава образцов.

После предварительной обработки спектральные данные анализируются с использованием методов хемометрики и машинного обучения. Наиболее распространены метод главных компонент (PCA), регрессия на частичных наименьших квадратах (PLSR), метод опорных векторов (SVM), случайный лес (Random Forest), градиентный бустинг и нейросетевые подходы [106, 140, 143, 144]. Их применение позволяет устанавливать статистические зависимости между спектрами и свойствами почв даже тогда, когда исследуемый показатель не имеет выраженной индивидуальной полосы поглощения.

Наряду с полным спектральным моделированием используется индексный подход [73, 114, 145]. Он основан на расчёте отношений, разностей или других комбинаций отражения на отдельных длинах волн, чувствительных к определённым компонентам среды. По сравнению с многопараметрическими моделями спектральные индексы отличаются более простой интерпретацией и удобны для экспресс-оценки состояния грунтов. Однако большинство таких индексов разработано преимущественно для дистанционного или лабораторного гиперспектрального анализа, поэтому их применение в контактной диагностике загрязнённых грунтов требует дополнительной проверки и адаптации [33, 145].

Наиболее распространённые спектральные индексы, применяемые при анализе почв и загрязнённых грунтов, представлены в таблице 1.

### Применяемые спектральные индексы диагностики грунтов

Индекс	Формула	Используемые длины волн	Назначение	Тип зондирования
HD [120]	$HD = \frac{A + C}{2B}$	A = 2297 нм, B = 2313 нм, C = 2329 нм	Обнаружение углеводородов	Дистанционное и наземное гиперспектральное зондирование
HI [100]	$HI = (\lambda_A - \lambda_B) \cdot \frac{R_C - R_A}{\lambda_C - \lambda_A} + (R_A - R_B)$	A = 1705 нм, B = 1729 нм, C = 1741 нм	Обнаружение углеводородов	Дистанционное гиперспектральное зондирование
NDWI [115]	$NDWI = \frac{R_{860} - R_{1240}}{R_{860} + R_{1240}}$	860 нм, 1240 нм	Оценка влажности	Дистанционное NIR/SWIR-зондирование
MSI [117]	$MSI = \frac{R_{1600}}{R_{820}}$	820 нм, 1600 нм	Оценка влажностного состояния	Контактное и дистанционное спектральное зондирование
NDCI [103]	$NDCI = \frac{R_{2200} - R_{2100}}{R_{2200} + R_{2100}}$	2100 нм, 2200 нм	Оценка содержания глинистых минералов	Гиперспектральное дистанционное зондирование
CI [117]	$CI = \frac{R_{2330}}{R_{2200}}$	2200 нм, 2330 нм	Выявление карбонатов	Контактная и дистанционная MIR/NIR-спектроскопия

Примечание - R - коэффициент спектрального отражения на соответствующей длине волны,  $\lambda$  - длина волны, нм.

Следовательно, инфракрасная и особенно ближняя инфракрасная спектроскопия представляет собой перспективный инструмент экспресс-диагностики почв и техногенно трансформированных грунтов. Метод позволяет оперативно получать интегральную информацию о состоянии геосреды и выявлять пространственные аномалии, связанные с загрязнением и изменением агрохимических характеристик. Вместе с тем эффективность спектральной диагностики ограничивается сложностью почвенной матрицы, неоднородностью техногенных грунтов и зависимостью количественных результатов от качества калибровочных моделей. В связи с этим разработка устойчивых методов предварительной обработки спектров, выбора информативных признаков и адаптации спектральных индексов к задачам контактной диагностики

загрязнённых грунтов является актуальной задачей инженерно-экологических исследований и имеет значение для повышения оперативности выявления источников загрязнения и предотвращения дальнейшей деградации техногенно нарушенных биотопов.

## 1.6 Выводы по главе 1

1. Биотопы техногенно трансформированных территорий представляют собой сложные геоэкологические системы, характеризующиеся нарушением природной структуры грунтового массива, изменением направленности миграции химических элементов и формированием пространственно неоднородных техногенных геохимических аномалий.

2. В ходе анализа действующей нормативно-методической базы для инженерно-экологических изысканий и проведения рекультивационных работ было установлено, что диагностика загрязнённых грунтов проводится путем осуществления длительного лабораторного анализа.

3. Для техногенно трансформированных территорий характерно мозаичное распределение загрязняющих веществ, что обусловлено сочетанием локальных источников эмиссии, процессов миграции вещества и неоднородности состава техногенных грунтов. В связи с этим традиционный точечный пробоотбор снижает эффективность получения информации о пространственном распределении загрязнения.

4. Современные инструментальные методы диагностики позволяют повысить оперативность экологических исследований. Так, БИК - спектроскопия является одним из перспективных методов получения экспресс - информации о состоянии грунтовой среды. Однако она имеет ряд ограничений из-за сложности интерпретации данных и влияния физико-химических свойств почвенной матрицы на результаты измерений.

5. Проведённый анализ научных и нормативно-методических подходов подтверждает актуальность разработки системы оперативной диагностики,

обеспечивающей повышение пространственной детальности экологических обследований и возможность выявления источников загрязнения на техногенно трансформированных территориях.

## ГЛАВА 2. РАЗРАБОТКА И ОБОСНОВАНИЕ МЕТОДИКИ СПЕКТРАЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКИ ЗАГРЯЗНЁННЫХ ГРУНТОВ

### 2.1 Формирование экспериментальной базы почвенно-грунтовых образцов

С целью формирования экспериментальной базы, обеспечивающей сопоставимость результатов спектральных измерений при различных типах почвенной матрицы, были отобраны почвенные и грунтовые образцы, различающиеся по генезису, гранулометрическому составу и содержанию органического вещества. Пробоотбор осуществлялся на территории Самарской области на фоновых участках и сельскохозяйственных угодьях в соответствии с требованиями ГОСТ 17.4.3.01-2017 [20].

Фоновые участки, расположенные вне зон техногенного воздействия, использовались для получения исходной почвенной матрицы, не содержащей нефтяного загрязнения, что обеспечило корректность последующего лабораторного моделирования. Дополнительно в работе использовались архивные образцы фоновых почв, ранее отобранные и охарактеризованные Научно-аналитическим центром промышленной экологии ФГБОУ ВО «СамГТУ», что позволило расширить вариативность экспериментального материала.

В качестве модельных почвенно-грунтовых матриц были использованы чернозёмные почвы, а также песчаные и глинистые грунты, что обусловлено необходимостью охвата контрастных условий, определяющих процессы взаимодействия загрязняющих веществ с почвенно-грунтовой средой.

Образцы чернозёма были отобраны на сельскохозяйственных территориях лесостепной зоны Самарской области. Почвы характеризовались развитой агрегатной структурой, тёмной окраской и повышенным содержанием органического вещества. Данный тип использовался как модель органоминеральной среды, в которой существенное влияние на процессы сорбции и формирование спектральных характеристик оказывают гумусовые соединения [110, 141].

Песчаные грунты представлены образцами лёгкого минерального состава с низким содержанием органического вещества. Для них характерны высокая фильтрационная способность и слабое удержание загрязняющих веществ, что определяет повышенную миграционную подвижность углеводородов в геосреде [41, 43, 71].

Для глинистых грунтов характерно преобладание тонкодисперсного материала и выраженных сорбционных свойств. Из-за развитой удельной поверхности подобных грунтов нефтепродукты могут аккумулироваться или менять характер распределения в почвенной матрице [54].

В настоящем исследовании гранулометрические характеристики образцов учитывались косвенно, основное внимание уделялось их различиям по содержанию органического вещества, влажности и другим особенностям в формировании спектрального сигнала.

Количественные значения физико-химических и агрохимических характеристик образцов приведены в разделе 2.2 и приложениях диссертационной работы. Указанные параметры использовались при интерпретации спектральных данных и построении калибровочных зависимостей.

Доставка образцов и весь последующий комплекс лабораторных работ выполнялись в аккредитованной лаборатории Научно-аналитического центра промышленной экологии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Самарский государственный технический университет» (аттестат аккредитации РОСС RU.0001.512985).

## **2.2 Лабораторное определение физико-химических характеристик образцов**

На следующем этапе была осуществлена серия лабораторных процедур, включающих подготовку образцов, их последующий анализ, а также формирование модельных систем с контролируемым уровнем нефтяного загрязнения.

Подготовка образцов проводилась в лабораторных условиях и включала удаление растительных остатков и механических включений, просеивание через сито с размером ячейки 1 мм и доведение образцов до воздушно-сухого состояния

при температуре  $(20 \pm 2)$  °С до постоянной массы. Указанные процедуры соответствуют требованиям ГОСТ 17.4.3.01-2017 и ГОСТ 17.4.4.02-2017 и были направлены на унификацию состояния образцов перед проведением лабораторных и спектральных исследований [20, 21].

Для всех природных образцов контролировалось содержание нефтепродуктов с целью подтверждения их исходного состояния перед использованием в спектральных экспериментах. Данный этап был необходим для исключения влияния остаточного нефтяного загрязнения на формирование спектрального отклика исследуемых почвенно-грунтовых образцов и обеспечения корректности последующего моделирования техногенного воздействия. Определение выполнялось гравиметрическим методом в соответствии с действующими нормативными документами [30]. Во всех случаях содержание нефтепродуктов оказалось ниже предела обнаружения, что подтвердило возможность использования данных образцов в качестве фоновой почвенной матрицы.

Для натуральных образцов дополнительно определялся комплекс агрохимических показателей, включающий содержание основных элементов минерального питания и органического вещества. Всего было исследовано 83 образца. Полученные данные использовались при анализе влияния свойств почвенной матрицы на формирование спектрального отклика.

В ходе лабораторных испытаний содержание нитратного азота определялось фотометрическим методом с использованием салициловой кислоты, нитритного азота – по реакции Грисса, валовых форм фосфора и серы – после кислотного озоления [9, 27, 29, 31]. Содержание подвижных форм калия и натрия устанавливалось пламенно-фотометрическим методом [10]. Дополнительно оценивались физико-химические характеристики исследуемых образцов, включая содержание органического углерода, влажность и зольность, определяемые гравиметрическим методом [11, 12, 15]. Обобщённые результаты анализа агрохимических показателей представлены в таблице 2, расширенные данные приведены в приложении 1.

**Диапазоны значений агрохимических и физико-химических показателей  
исследованных натуральных образцов**

Наименование		P, мг/кг	NO <sub>3</sub> , мг/кг	S, мг/кг	Na, мг/кг	K, мг/кг	NO <sub>2</sub> , мг/кг	C, %	W, %	A, %
Площадка №1	min	1097,25	2,20	319,77	22,00	3,90	0,95	0,83	1,10	91,53
	max	1600,00	26,54	722,68	932,00	17,20	1,86	6,17	2,77	96,71
Площадка №2	min	1141,75	0,41	233,24	17,00	2,30	0,25	0,15	2,99	86,00
	max	1364,75	16,12	1219,41	154,00	13800	1,20	5,94	12,10	96,28
Площадка №3	min	1088,75	0,74	263,00	<10,00	<1,00	0,40	0,25	1,70	81,78
	max	1321,50	9,44	4450,90	650,00	170,00	19,50	6,52	11,70	97,77
Площадка №4	min	800,00	0,08	230,00	<10,00	<1,00	0,25	0,15	1,10	86,00
	max	1256,18	12,46	5703,00	290,00	27,20	1,49	6,02	12,10	96,71
Площадка №5	min	1044,00	4,88	<20,00	<10,00	12,90	0,25	0,59	2,44	58,42
	max	1399,00	5,03	2100,00	7600,00	13600	0,56	13,19	28,39	95,00
Площадка №6	min	926,50	0,49	210,90	12,00	1,20	0,18	0,24	0,21	60,05
	max	1428,00	16,45	1763,70	4290,00	36,40	1,02	24,40	27,85	98,76

Перед формированием модельных загрязнений образцы проходили предварительную подготовку, аналогичную подготовке натуральных почв. В качестве загрязняющих веществ использовались сырая нефть, турбинное масло ТП-22 и петролейный эфир, различающиеся по фракционному составу и физико-химическим свойствам.

Сырая нефть представляла собой пробу, отобранную на территории Радаевского месторождения Самарской области. Для исследуемой пробы были определены основные физико-химические характеристики. Было установлено, что плотность нефти при 20°C составила около 0,89 г/см<sup>3</sup>, а динамическая вязкость около 45 мПа·с, что характерно для нефти с высоким содержанием тяжёлых углеводородных компонентов.

Фракционный состав нефти включал широкий интервал температур кипения, что говорит об одновременном присутствии летучих и высококипящих соединений. Углеводороды формируют спектральный отклик в ближнем инфракрасном диапазоне за счёт колебаний связей С-Н в алифатических и ароматических структурах [41].

Турбинное масло ТП-22 применялось в качестве стандартизированного нефтепродукта, свойства которого регламентированы ГОСТ 9972-2020 [5]. Масло

характеризуется узким фракционным составом, высокими температурами кипения (выше 300°C), а также стабильными значениями плотности и вязкости. В отличие от сырой нефти, данный продукт представляет собой более однородную углеводородную систему, практически не содержащую лёгких фракций. Использование масла ТП-22 обусловлено необходимостью введения в эксперимент модельного вещества с воспроизводимыми физико-химическими и спектральными характеристиками. Его применение также согласуется с требованиями ГОСТ Р 54039-2010, регламентирующего определение содержания нефтепродуктов в почвах методом инфракрасной спектроскопии, в рамках которого используются эталонные нефтепродукты для построения калибровочных зависимостей [17].

Петролейный эфир использовался как модельный лёгкий углеводородный растворитель (фракция 40-70 °С), представляющий смесь низкомолекулярных алифатических углеводородов. Он характеризуется низкой плотностью, малой вязкостью и высокой летучестью, что обуславливает его быстрое испарение и высокую миграционную подвижность в почвенно-грунтовой среде [41]. В спектральном отношении данный растворитель формирует отклик, характерный для лёгких алифатических углеводородов, с выраженными полосами поглощения, связанными с валентными колебаниями связей С-Н [112].

Диапазон концентраций загрязняющих веществ составлял 0,1-50,0% (масс.) и был выбран с учётом необходимости охвата как нормативно значимых уровней остаточного загрязнения (ГОСТ Р 57447-2017), так и условий, характерных для аварийных проливов [19].

Экспериментальная выборка включала 216 модельных образцов с различными сочетаниями типа почвы, вида нефтепродукта и уровня загрязнения, а также 3 фоновых контрольных образца. Для каждого сочетания готовилось не менее трёх параллельных образцов. Внесение нефтепродуктов осуществлялось в расчётном количестве с последующим тщательным перемешиванием до достижения однородной структуры. При работе с вязкими загрязнителями (сырая нефть, турбинное масло ТП-22) применялось послойное внесение с промежуточным перемешиванием. Операции с петролейным эфиром выполнялись

в вытяжном шкафу при температуре не выше 18 °С для минимизации потерь за счёт испарения.

После приготовления навески выдерживались в закрытых контейнерах при  $(20 \pm 2)$  °С в течение 48 часов для достижения сорбционно-равновесного состояния. Выдерживание в течение указанного времени согласуется с литературными данными [125], согласно которым стабилизация оптических характеристик нефтезагрязнённых почв происходит в течение 24-48 часов после контакта с углеводородами.

Подготовленные натурные и модельные образцы сформировали экспериментальную базу, охватывающую широкий диапазон концентраций загрязняющих веществ, типов матриц и агрохимических характеристик.

### **2.3 Методика спектральных измерений**

Регистрация спектров почвенных образцов выполнялась методами контактной ближней инфракрасной (БИК) спектроскопии с использованием двух типов приборов, различающихся по спектральному диапазону, конструкции и функциональному назначению.

Для задач, связанных с моделированием нефтяного загрязнения и построением спектральных индексов нефтепродуктов, применялся портативный спектрометр Thermo Scientific MicroPHAZIR RX, работающий в диапазоне 1600-2400 нм. Данная область включает обертоны и комбинационные колебания связей С-Н, О-Н и N-H, характерные для углеводородов, влаги и органических компонентов почвенной матрицы [129]. Прибор регистрирует спектр диффузного отражения, формирующийся в поверхностном слое образца. Основные технические характеристики спектрометра приведены в таблице 3.

Перед началом серии измерений выполнялась калибровка прибора по встроенному эталону отражения. Контроль корректности базовой линии осуществлялся через каждые 20 измерений. Для регистрации спектров навески помещались в стеклянные чашки Петри слоем не менее 1 см и устанавливались

непосредственно на измерительное окно прибора. Влияние стекла оценивалось экспериментально путём регистрации спектров эталонного отражателя с чашкой и без неё. Среднее относительное отклонение в диапазоне 1600-2400 нм составило 1,6%, что не превышало аппаратную погрешность прибора и подтвердило корректность использования стеклянных чашек при измерениях.

Таблица 3

**Основные технические характеристики прибора  
Thermo Scientific microPHAZIR RX [137]**

Параметр	Значение
Спектральный диапазон	1600-2400 нм
Метод регистрации	диффузное отражение
Тип спектроскопии	ближняя инфракрасная (БИК)
Спектральное разрешение	не указано производителем
Источник излучения	вольфрамовая лампа
Время регистрации спектра	менее 3 с
Тип детектора	не указано производителем
Масса прибора	1,25 кг
Режим измерений	контактный

Для каждого образца регистрировалось не менее пяти последовательных спектров с поворотом и перемещением чашки между измерениями. Полученные спектры усреднялись, что снижало влияние неоднородности поверхности. После завершения серии навеска перемешивалась и повторно измерялась для оценки воспроизводимости. Схема геометрии контактной регистрации представлена на рисунке 1.

Для регистрации спектральных характеристик природных почв в диапазоне 645-1085 нм использовался миниатюрный спектрометр Ocean Optics STS-NIR, оснащённый контактным отражательным зондом. Указанный диапазон чувствителен к суммарному влиянию органического вещества, железосодержащих минералов, влажности и особенностей почвенной матрицы [110, 141]. Хотя выраженные полосы поглощения биогенных элементов в данной области отсутствуют, изменения их содержания отражаются на общей форме спектрального сигнала [112, 129].

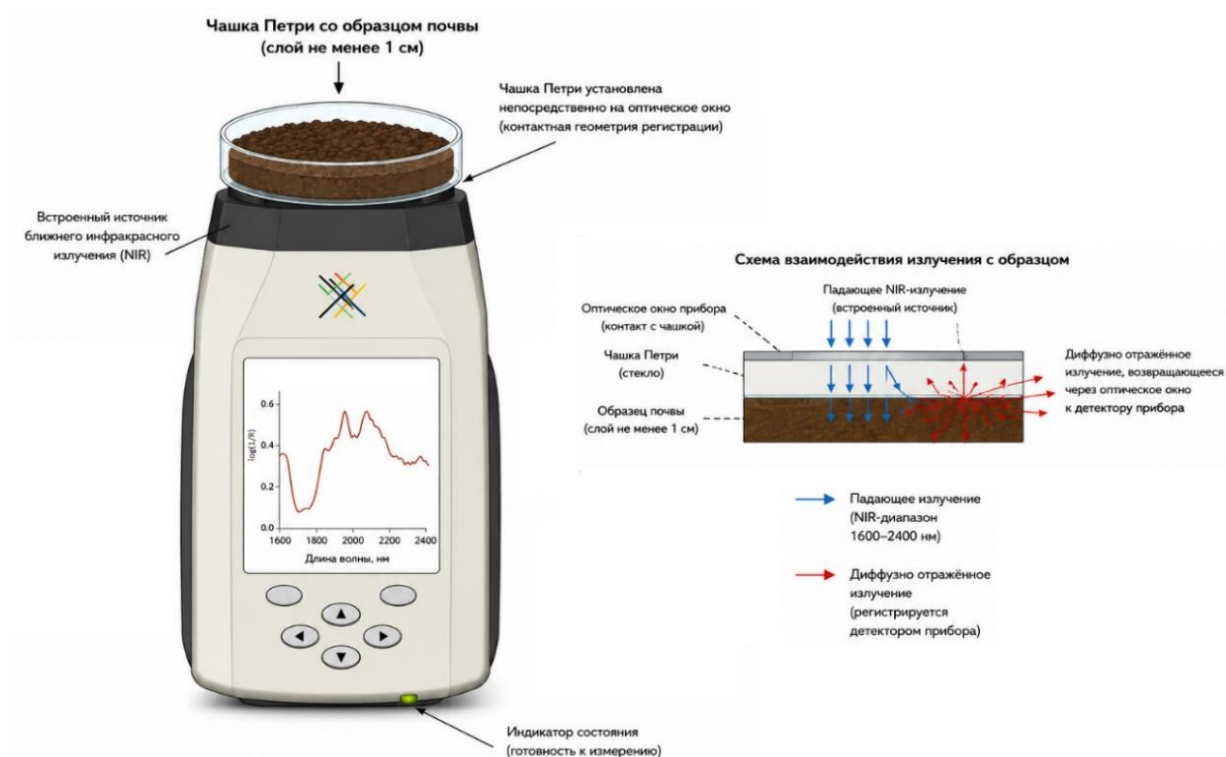


Рисунок 1. Схема геометрии контактной регистрации спектров диффузного отражения (спектрометр Thermo Scientific microPHAZIR RX)

Контактный зонд обеспечивал непосредственное прилегание оптической головки к поверхности образца, что позволяло проводить измерения в условиях стабильной геометрии освещения и минимизировать влияние внешних источников света. Встроенный осветитель формировал воспроизводимые условия регистрации спектров, а процедура измерения сводилась к установке зонда на поверхность навески и автоматической регистрации сигнала.

Оптическая схема прибора обеспечивала спектральное разрешение порядка 1 нм и стабильную регистрацию сигнала при многократных измерениях. Основные технические характеристики спектрометра приведены в таблице 4.

Навески почв помещались в неглубокие чашки Петри слоем не менее 1 см, после чего контактный зонд устанавливался непосредственно на поверхность образца. Перед началом работы выполнялась двухточечная калибровка, включавшая регистрацию тёмного сигнала и спектра эталонного отражателя. Для каждого образца регистрировалось не менее пяти спектров с перемещением зонда между измерениями. Стабильность регистрации контролировалась измерением контрольного образца через каждые 20 измерений.

### Основные технические характеристики спектрометра Ocean Optics STS-NIR [128]

Параметр	Значение
Спектральный диапазон	645-1085 нм
Метод регистрации	диффузное отражение
Тип спектроскопии	ближняя инфракрасная (БИК)
Спектральное разрешение	2,2 нм
Источник излучения	встроенный осветитель
Время интегрирования	1,56 мс - 6 с
Тип детектора	CMOS
Масса прибора	70,4 г
Режим измерений	контактный

Схема геометрии контактной регистрации представлена на рисунке 2.

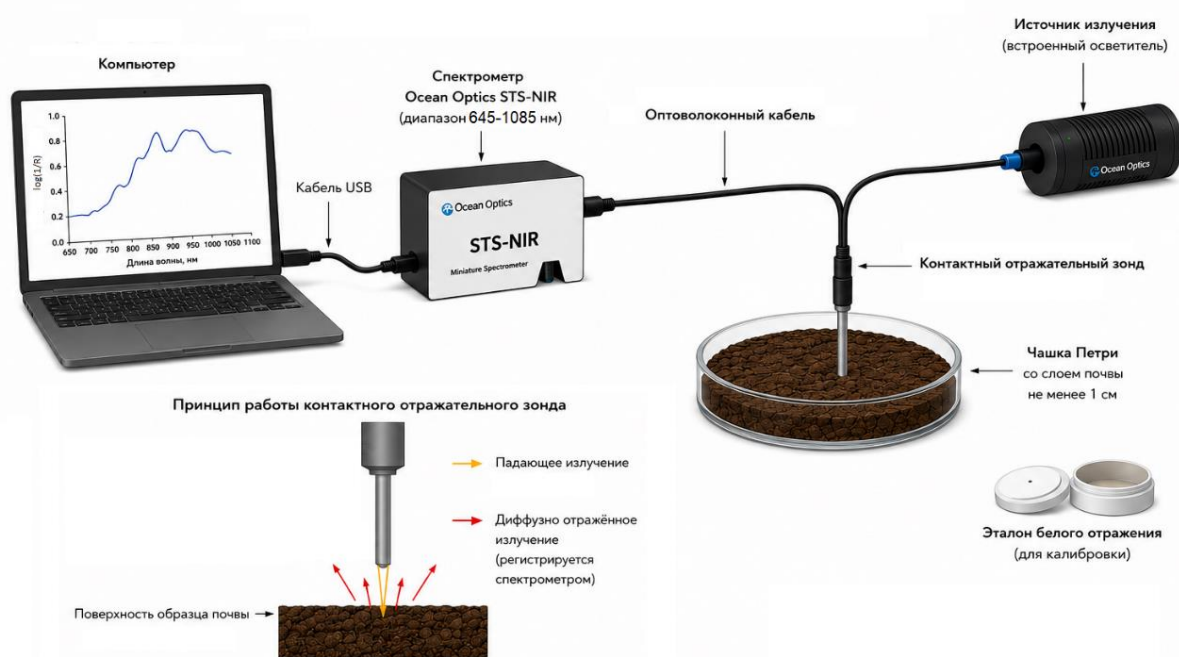


Рисунок 2. Схема регистрации спектров диффузного отражения с использованием спектрометра Ocean Optics STS-NIR и контактного отражательного зонда

Используемая методика регистрации обеспечила получение воспроизводимых спектров, пригодных для последующего расчёта спектральных индексов и построения калибровочных моделей.

## 2.4 Выводы по главе 2

1. Сформирована экспериментальная база для разработки методики спектральной диагностики загрязнённых грунтов, включающая почвенно-грунтовые образцы, различающиеся по содержанию органического вещества и сорбционными свойствами.

2. Выполнен комплекс лабораторных исследований, включающий подготовку образцов, определение агрохимических и физико-химических характеристик, а также контроль исходного содержания нефтепродуктов. Установлено, что природные образцы могут использоваться в качестве фоновой матрицы при моделировании загрязнений.

3. Сформированы модельные образцы с контролируемым содержанием нефтепродуктов в диапазоне 0,1-50,0% масс. В качестве загрязняющих веществ использовались сырая нефть, турбинное масло ТП-22 и петролейный эфир, различающиеся по составу и физико-химическим свойствам.

4. Разработана методика контактной регистрации спектров загрязнённых грунтов с использованием спектрометров Thermo Scientific MicroPHAZIR RX и Ocean Optics STS-NIR, обеспечивающая воспроизводимую регистрацию спектров диффузного отражения в ближнем инфракрасном диапазоне.

5. Показано, что выбранная схема подготовки образцов и спектральных измерений обеспечивает получение данных, пригодных для расчёта спектральных индексов, анализа спектральных закономерностей и построения диагностических зависимостей для задач оперативной диагностики грунтов.

## ГЛАВА 3. РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ СПЕКТРАЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКИ СОСТОЯНИЯ ТЕХНОГЕННО ТРАНСФОРМИРОВАННЫХ БИОТОПОВ

### 3.1 Спектральные характеристики натуральных и модельных образцов и предварительная обработка данных

Регистрация спектров отражения проводилась в ближнем инфракрасном диапазоне в соответствии с установленной методикой.

Первичный массив включал спектры почвенно-грунтовых образцов, отобранных на различных агрохимически нагруженных площадках. Усреднённые спектральные кривые представлены на рисунке 3. Различия между площадками проявляются преимущественно в уровне отражения и наклоне континуума, что связано с вариациями содержания органического вещества, влажности и минеральных компонентов матрицы. Наибольшие различия наблюдаются для образцов с повышенным содержанием органического вещества и зольных компонентов, что сопровождается изменением общего уровня отражения в ближней ИК-области.

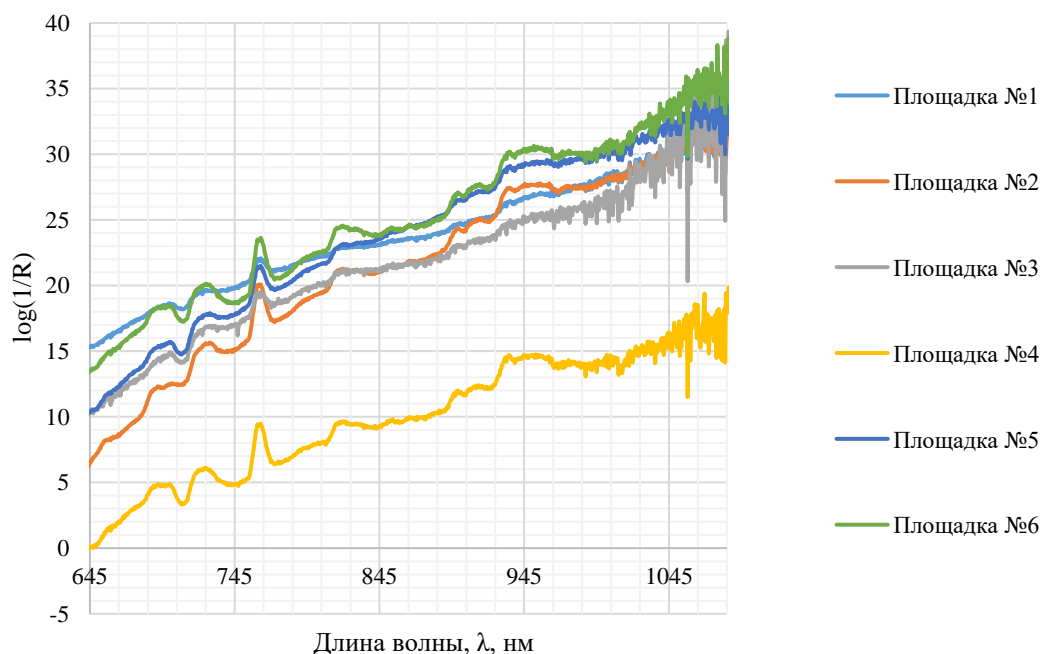


Рисунок 3. Спектральные кривые почвенно-грунтовых образцов, зарегистрированных спектрометром Ocean Optics STS-NIR

Полные массивы индивидуальных спектров измерения для натуральных образцов представлены в приложении 2.

В области свыше 1050 нм отмечается увеличение шумовой составляющей, обусловленное характеристиками детектора спектрометра Ocean Optics STS-NIR. Указанный участок был исключён из последующей обработки и многомерного анализа.

Для оценки влияния состава матрицы были зарегистрированы спектры фоновых образцов различного типа (рисунок 4). Спектральные кривые имеют сходный общий характер, что отражает единый механизм поглощения в ближнем инфракрасном диапазоне. Различия между образцами проявляются преимущественно в уровне оптической плотности и степени выраженности отдельных участков спектра.

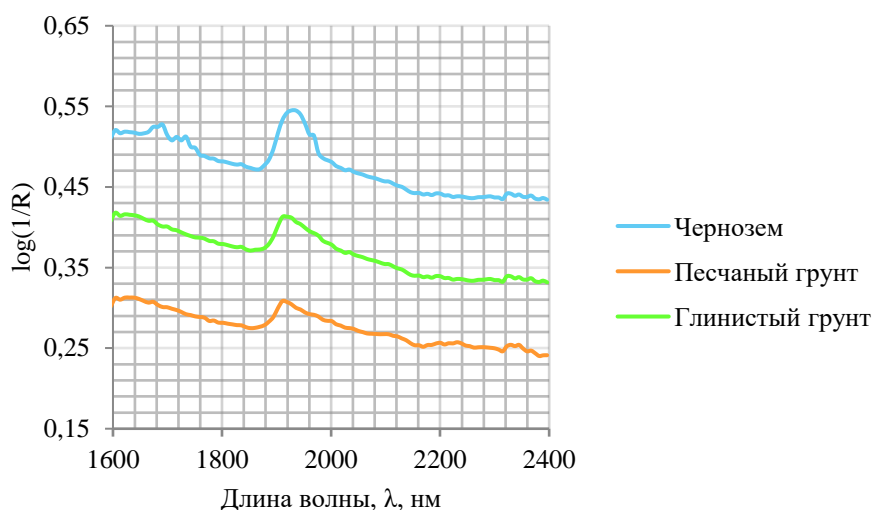


Рисунок 4. Спектры фоновых почвенно-грунтовых образцов (диапазон 1600-2400 нм)

Во всех образцах наблюдается перегиб спектральной кривой в области 1900-1950 нм, предположительно связанный с остаточной влагой и поглощением молекул воды в ближнем инфракрасном диапазоне [136]. Для чернозёма также отмечается более выраженная спектральная особенность в области 1700-1750 нм, которая может быть обусловлена вкладом органического вещества и связанной влаги.

Чернозём характеризуется более высоким уровнем фонового поглощения, связанным с повышенным содержанием органического вещества [53, 85]. Песчаный грунт демонстрирует более сглаженный континуум и меньшую выраженность локальных спектральных особенностей вследствие низкого содержания органической и тонкодисперсной фракций [136]. Глинистый грунт занимает промежуточное положение и характеризуется умеренно выраженными перегибами спектральной кривой, обусловленными особенностями минерального состава и сорбционных свойств.

Внесение нефтепродуктов приводит к изменению формы спектральных кривых и появлению диагностических полос, связанных с валентными и комбинационными колебаниями связей С-Н [127]. Спектры, представленные на рисунках 5-7, получены для одинаковой концентрации нефтепродукта (5% масс.), что обеспечивает сопоставимость спектрального отклика различных грунтовых матриц.

В случае петролейного эфира (рисунок 5) спектральные изменения выражены сравнительно слабо и проявляются преимущественно в области 1700-1750 нм.

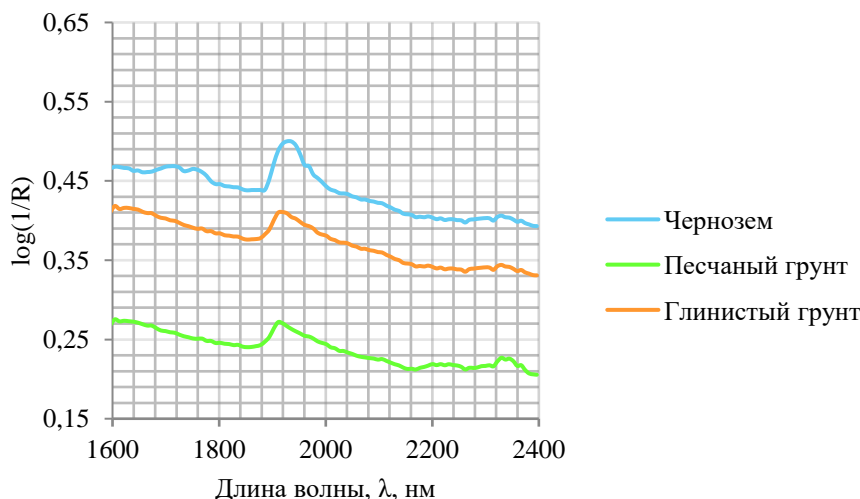


Рисунок 5. Спектры почвенно-грунтовых образцов, загрязнённых петролейным эфиром (диапазон 1600-2400 нм)

Комбинационная полоса 2300-2350 нм, характерная для углеводородов [112, 127], фиксируется неустойчиво. Это связано с высокой летучестью лёгких фракций и слабой сорбцией петролейного эфира на поверхности почвенно-грунтовых

частиц. Наиболее выраженные изменения наблюдаются для песчаного грунта, обладающего меньшей сорбционной ёмкостью и более низким фоновым поглощением.

Для сырой нефти (рисунок 6) характерно формирование устойчивых диагностических полос в областях 1700-1750 нм и 2300-2350 нм, соответствующих колебаниям связей С-Н углеводородных соединений. Наиболее контрастный спектральный отклик наблюдается для песчаного грунта. В чернозёме диагностические полосы частично сглаживаются фоновым поглощением органического вещества. Для глинистого грунта характерна промежуточная интенсивность спектральных изменений, обусловленная сочетанием сорбционных свойств и минерального состава.

В области 2250-2350 нм для песчаного грунта наблюдается наиболее выраженный рост интенсивности сигнала, что свидетельствует о меньшем влиянии фонового органико-минерального поглощения и более высокой контрастности углеводородных полос.

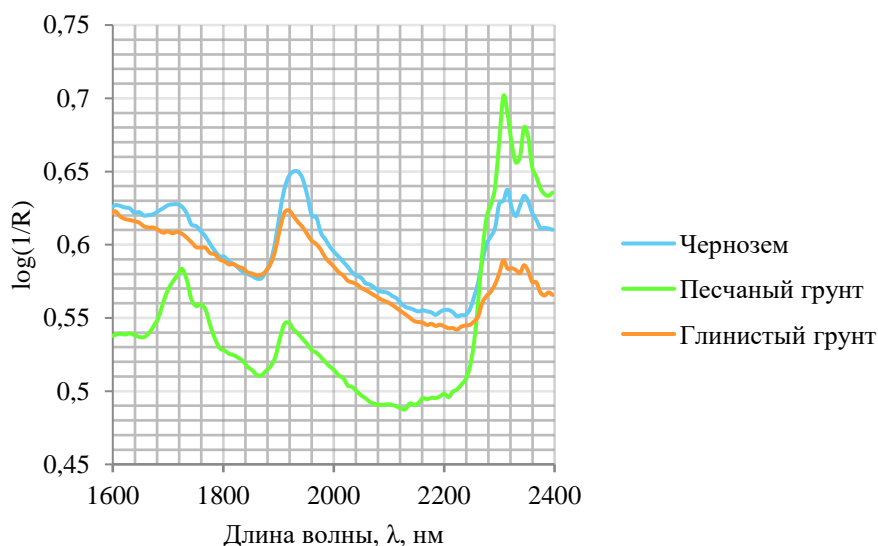


Рисунок 6. Спектры почвенно-грунтовых образцов, загрязнённых сырой нефтью (диапазон 1600-2400 нм)

Спектры образцов, загрязнённых турбинным маслом ТП-22 (рисунок 7), сохраняют характерные полосы углеводородов. По сравнению с сырой нефтью наблюдаются различия в интенсивности и форме диагностических областей, что

связано с особенностями группового состава нефтепродукта. Наиболее выраженные спектральные изменения также наблюдаются для песчаного грунта, тогда как в чернозёме и глинистом грунте часть диагностических полос сглаживается фоновым поглощением матрицы.

Для турбинного масла ТП-22 в области 2300-2350 нм формируются более узкие и интенсивные максимумы, что может быть связано с преобладанием алифатических углеводородных компонентов и более однородным групповым составом по сравнению с сырой нефтью [112].

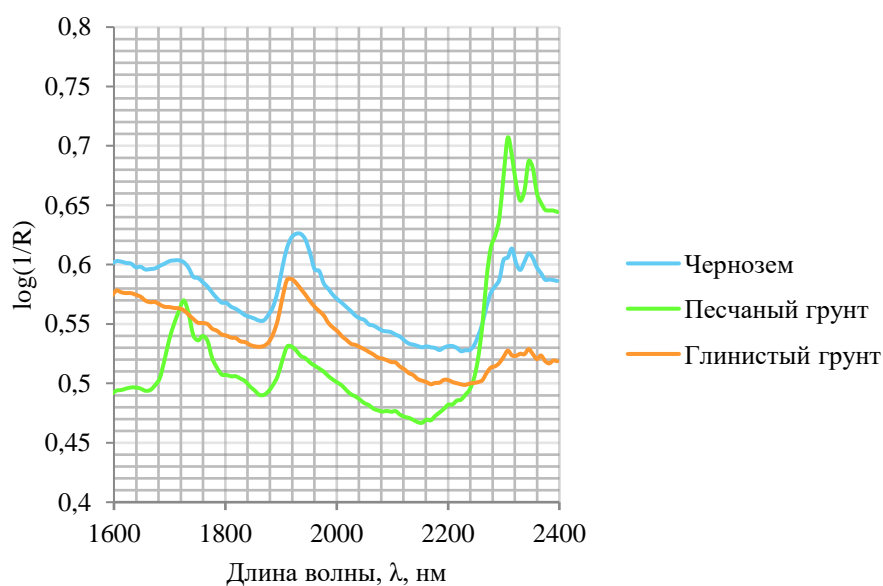


Рисунок 7. Спектры почвенно-грунтовых образцов, загрязнённых турбинным маслом ТП-22 (диапазон 1600-2400 нм)

Концентрационная зависимость спектрального отклика представлена на рисунке 8 (а). При низких концентрациях нефти (до 1% масс.) изменения формы спектральной кривой ограничиваются преимущественно вариациями наклона континуума. Начиная с 5% масс. формируются устойчивые минимумы в диагностических областях С-Н, а при концентрациях свыше 30% масс. наблюдается насыщение спектрального отклика и уменьшение различий между высококонцентрированными образцами. Данные особенности отражают нелинейный характер изменения спектрального сигнала при увеличении содержания нефтепродукта.

Для устранения вариаций, не связанных непосредственно с химическим составом образцов, к спектрам применялись процедуры предварительной обработки, предусмотренные программным обеспечением спектрального комплекса. Выполнялись операции взвешивания и автошкалирования, компенсирующие изменения интенсивности сигнала, возникающие вследствие нестабильности освещения, различий положения образца на измерительном окне и локальной неоднородности поверхности. Проведённая обработка обеспечивала приведение спектров к сопоставимому динамическому диапазону и повышала корректность последующего анализа формы спектральных кривых.

После автошкалирования спектры нормировались методом Standard Normal Variate (SNV), устраняющим аддитивные и мультипликативные искажения, обусловленные различиями в плотности укладки, пористости и гранулометрическом составе. Метод SNV реализуется путём центрирования и масштабирования каждого спектра относительно его собственных статистических параметров. Формула расчета имеет следующий вид [101]:

$$A'_i = \frac{A_i - \bar{A}}{S}, \quad (1)$$

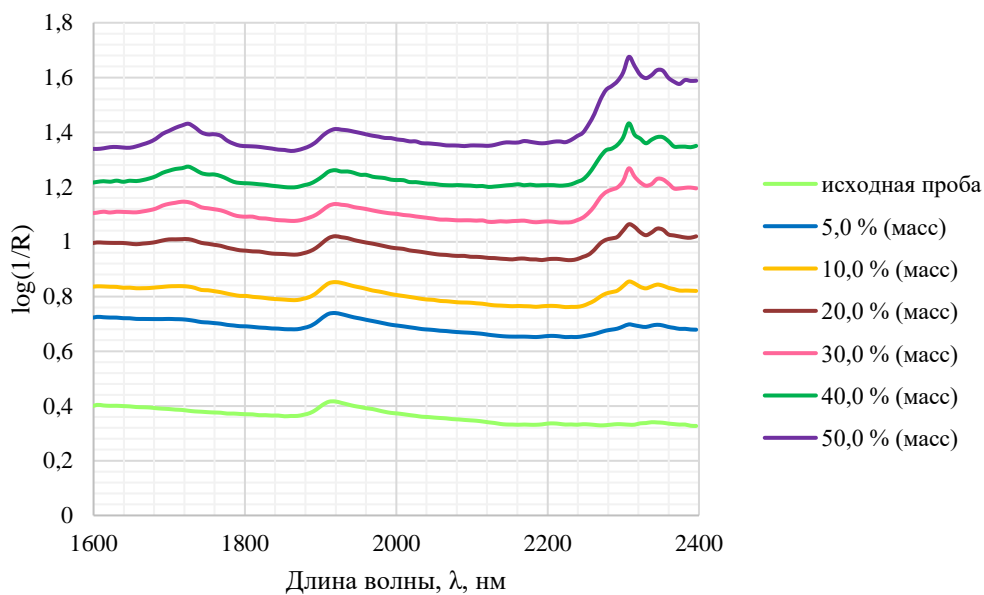
где  $A_i$ - интенсивность при длине волны  $\lambda_i$ ,

$\bar{A}$  - среднее значение интенсивности по всему спектру,

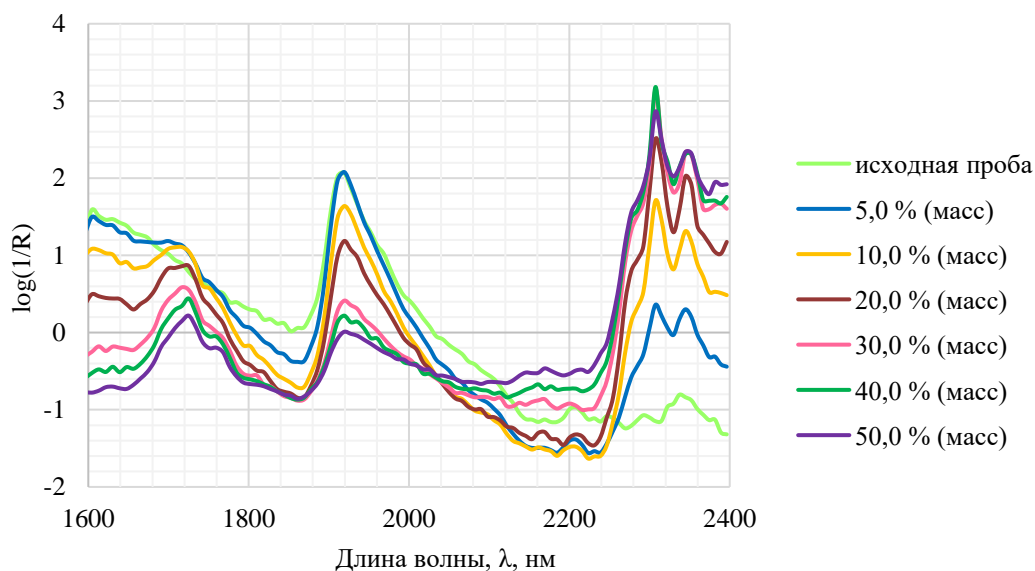
S- стандартное отклонение.

Пример результата нормализации SNV приведён на рисунке 8 (б). После обработки усиливается выраженность диагностических полос С-Н, а спектры приобретают сопоставимый вид.

Для визуализации и интерпретации в настоящем разделе приведены усреднённые спектральные кривые, характеризующие типовые особенности отклика почвенно-грунтовых образцов. Усредненные зависимости использовались для повышения наглядности представления результатов и сопоставления спектральных особенностей исследуемых образцов.



(а)



(б)

Рисунок 8. Пример влияния предобработки SNV на форму спектра нефтезагрязнённого образца:

- (а) Спектральные кривые, полученные при съёмке спектров с исследуемых образцов,  
 (б) Обработка сигнала методом Standard Normal Variate (SNV)

Комплекс применённых процедур обеспечил формирование однородного массива спектральных данных, пригодного для дальнейшей многомерной обработки, построения калибровочных моделей и сопоставления спектральных характеристик с содержанием целевых компонентов.

### **3.2 Анализ взаимосвязи спектральных характеристик и агрохимических свойств грунтов**

Для установления взаимосвязи между спектральными характеристиками почв и содержанием агрохимических показателей был выполнен многомерный анализ, основанный на методах главных компонент (PCA) и частичных наименьших квадратов (PLS). Использование методов многомерной статистики позволяет учитывать совокупный вклад спектральных признаков и выявлять скрытые взаимосвязи, недоступные при анализе отдельных спектральных диапазонов.

Исходные спектры регистрировались в диапазоне 645-1085 нм, соответствующем переходной зоне между красной и ближней инфракрасной областями. Сигнал в данном интервале определяется высокочастотными обертонами и комбинационными полосами колебаний связанной воды и органических функциональных групп (О-Н, N-Н, С-Н), а также слабовыраженным вкладом минеральной матрицы [102, 126]. При этом диагностические полосы отдельных химических компонентов в указанном диапазоне практически отсутствуют, что исключает возможность их прямой идентификации и обуславливает необходимость применения многомерных методов анализа для извлечения скрытой структуры данных [143].

Моделирование исходной выборки методом главных компонент (PCA) (рисунок 9) показало, что несколько образцов существенно отличаются от общей совокупности данных. Наибольшее удаление от основных кластеров наблюдалось у образцов площадки №5, а также у отдельных образцов, относящихся к площадкам №2 и №6. Эти точки смещены вдоль обеих компонент (ГК1 и ГК2) и располагаются за пределами группировок, характерных для остальных площадок. Их изолированное положение связано с аномальными значениями отдельных химических показателей. Наибольший вклад в смещение этих образцов вносила переменная, отражающая содержание калия, что свидетельствует о существенном вкладе данного показателя в вариации по компоненте ГК1. Данные натурные пробы

грунтов вносили значительные искажения в структуру обобщённой многомерной модели, поэтому были исключены из дальнейшего расчёта как «выбросы».

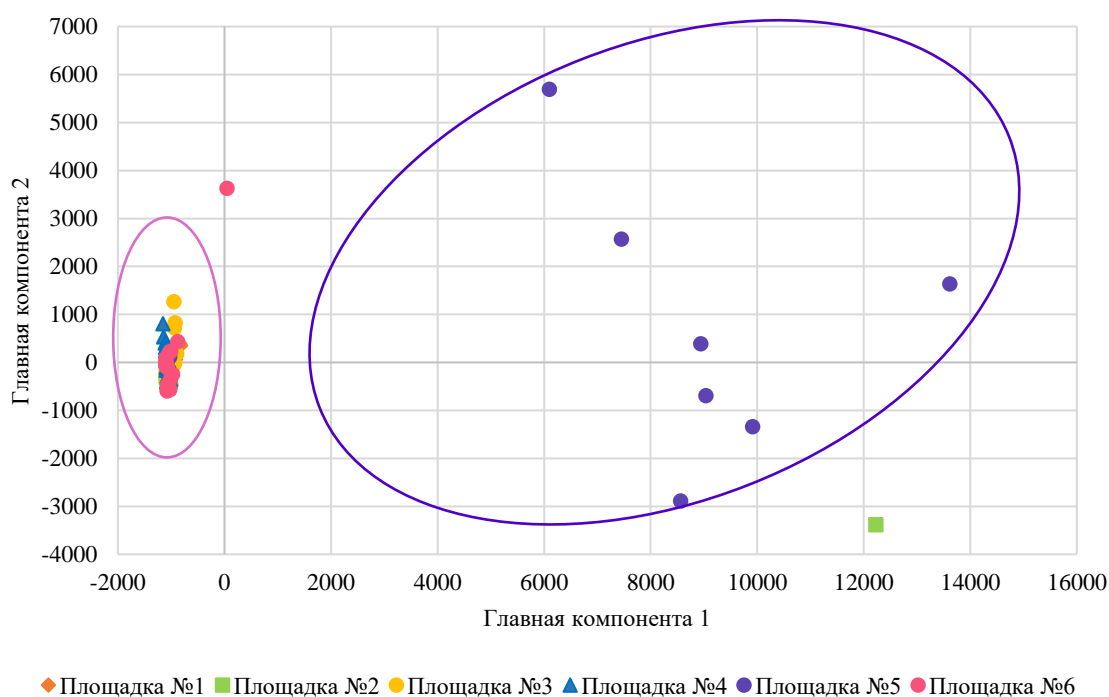


Рисунок 9. Распределение образцов исследуемых площадок в пространстве PC1-PC2

После удаления выбросов в обновлённой PCA-модели (рисунок 10) распределение образцов стало более упорядоченным, а различия между площадками – более выраженными.

Образцы, отобранные с площадки №4 образовали вытянутую группу вдоль оси ГК2, что может быть связано со специфическими особенностями их спектральных характеристик. Образцы с площадок №1, №2 и №6 расположились компактно относительно друг друга, что отражает близость их химического состава и низкую внутригрупповую вариабельность. Для образцов площадки №3 характерно более широкое распределение по оси ГК1 в сравнении с другими, что может свидетельствовать о неоднородности её образцов по химическим показателям и приводить к их смещению относительно остальных площадок.

Полученные результаты подтверждают корректность проведенной предварительной обработки данных и свидетельствуют о том, что PCA - модель адекватно описывает структуру исследуемой выборки.

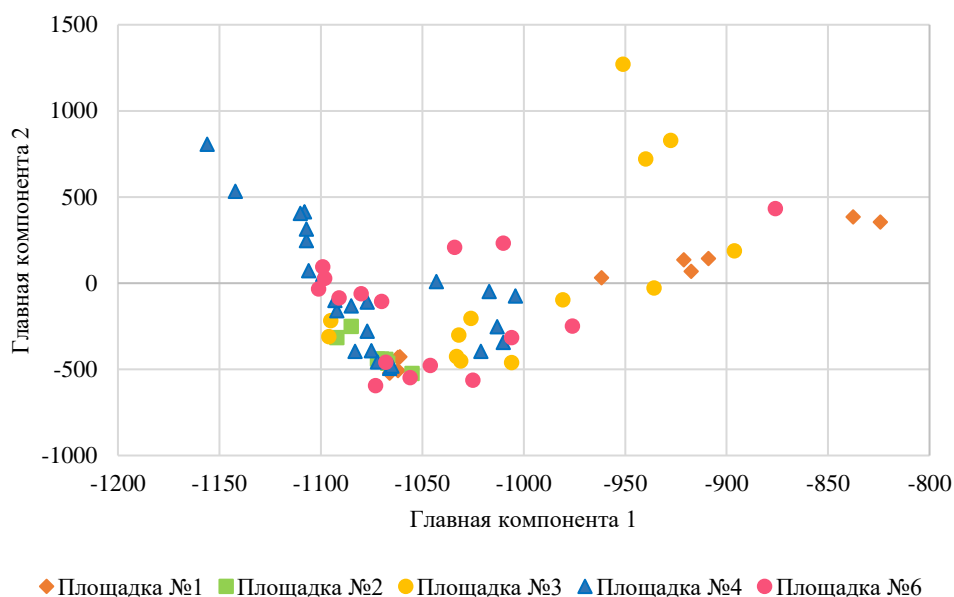


Рисунок 10. PCA-модель распределения образцов площадок (PC1-PC2) после исключения выбросов

Для определения вклада исходных переменных в формирование компонент была построена диаграмма нагрузок (рисунок 11). Положение показателей на плоскости ГК1-ГК2 отражает направленность и относительную величину их влияния на структуру данных. Первая компонента формируется преимущественно за счёт показателей влажности и содержания серы. Их смещение в правую часть графика указывает на важность этих параметров в дифференциации образцов. Такие переменные, как натрий, зольность, органический углерод, нитритный и нитратный азот, сосредоточены вблизи нулевых значений ГК1. Это связано с их меньшим вкладом в формирование первой главной компоненты. Наибольшее смещение от центра оси по второй главной компоненте наблюдается у калия, что еще раз подчёркивает его отличие от остальных показателей, значения нагрузок которых по ГК2 минимальны.

Наибольшее влияние на разделение исследуемых образцов оказывают показатели влажности, содержания серы и калия, тогда как остальные агрохимические показатели характеризуются меньшей информативностью в пространстве главных компонент. Полученные результаты отражают

неоднородный характер влияния исследуемых параметров на структуру спектральных данных.

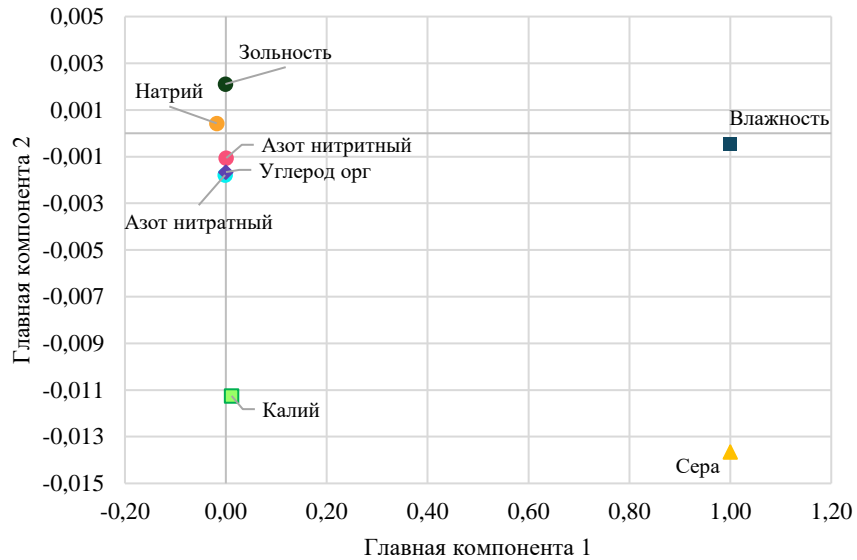


Рисунок 11. График нагрузок переменных на компоненты PCA

Анализ графика доли объяснённой дисперсии (рисунок 12) показал, что общая вариативность данных объясняется в основном первой главной компонентой и составляет 82%. Вклад для второй главной компоненты достигает 14%, тогда как для последующих компонент он минимален. Таким образом, основная структура данных описывается двумя главными компонентами, при этом ГК1 отражает влияние показателей влажности и содержания серы, а ГК2 преимущественно вариации, связанные с содержанием калия.

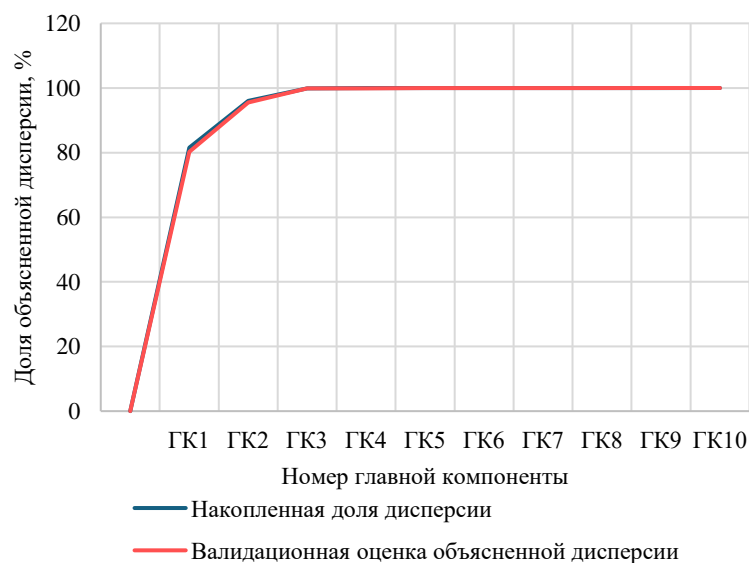


Рисунок 12. Доля объяснённой дисперсии главными компонентами

На основе выявленных зависимостей были построены PLS-модели для определения содержания агрохимических показателей. Качество моделей оценивалось по коэффициенту детерминации валидации ( $R^2$ ), среднеквадратичной ошибке (RMSE) и коэффициенту прогностической способности RPD, определяемому как отношение стандартного отклонения фактических значений показателя к RMSE. В соответствии с общепринятыми критериями интерпретации коэффициента RPD, значения выше 2 свидетельствуют об удовлетворительной предсказательной способности модели и возможности её использования для количественной оценки, тогда как значения выше 3 характеризуют высокую надёжность и аналитическую информативность модели [113, 138].

Наиболее высокую прогностическую способность среди всех исследованных показателей продемонстрировала PLS-модель, разработанная для оценки влажности почв (рисунок 13). Коэффициент детерминации валидации  $R^2 = 0,77$  и среднеквадратичная ошибка прогнозирования  $RMSE = 2,06$  указывают на приемлемую точность модели в пределах рассматриваемого диапазона значений влажности.

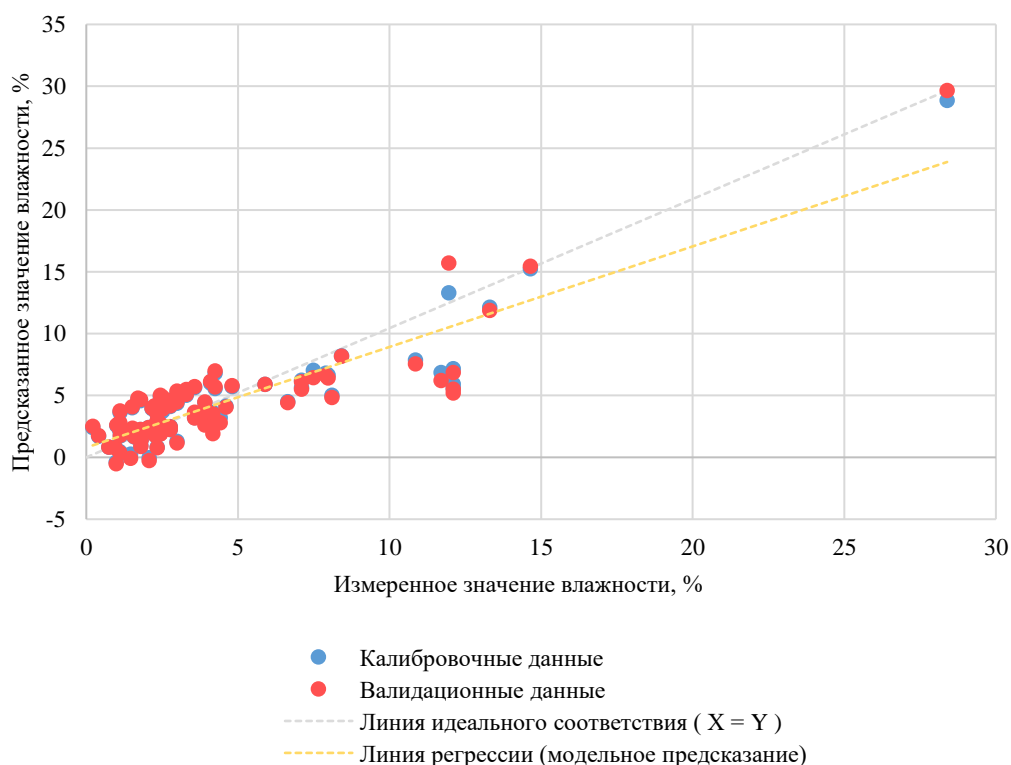


Рисунок 13. Соответствие измеренных и предсказанных значений влажности в модели PLS

Анализ графика соответствия измеренных и предсказанных значений показывает, что в области низких и средних уровней влажности модель обеспечивает устойчивое прогнозирование. В зоне высоких значений наблюдается систематическое занижение предсказаний, что проявляется в наклоне регрессионной прямой, отличающемся от единичного, а также в смещении относительно линии идеального соответствия.

Для натрия построенная PLS-модель демонстрирует высокую степень согласованности между измеренными и предсказанными значениями (рисунок 14).

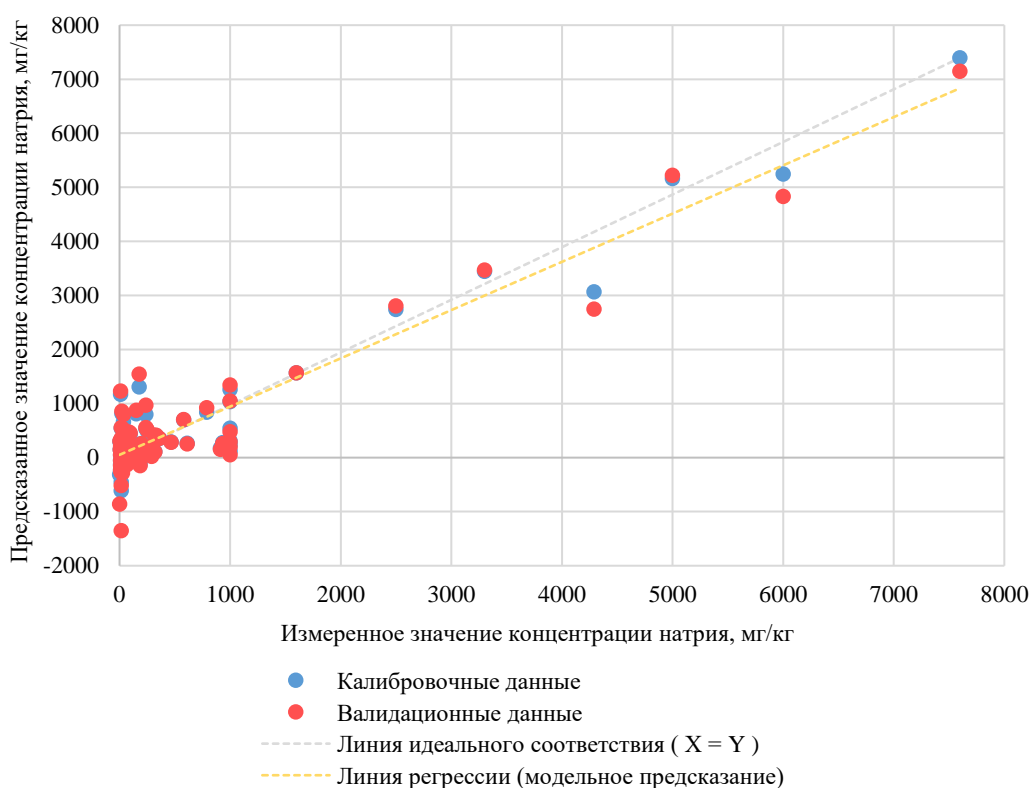


Рисунок 14. Соответствие измеренных и предсказанных значений натрия в модели PLS

Содержание натрия в почвах связано с особенностями минералогического состава, в частности вариациями доли глинистых и карбонатных минералов, что подтверждается литературными данными [108, 126]. Хотя собственные полосы поглощения Na в ближнем ИК-диапазоне не выражены, спектральный отклик минеральной матрицы обеспечивает возможность количественного моделирования его содержания.

Полученные значения коэффициента детерминации валидации ( $R^2 = 0,86$ ) и отношения стандартного отклонения к ошибке предсказания ( $RPD = 2,72$ ) отражают степень соответствия модели экспериментальным данным и указывают на воспроизводимость выявленной зависимости в рамках исследуемой выборки.

Аналогичный механизм формирования спектрального отклика характерен и для фосфора. Его содержание в почве определяется сочетанием фосфатных минералов и органо-минеральных комплексов, при этом регистрируемый спектральный сигнал обусловлен слабовыраженными комбинационными полосами и изменениями структуры почвенной матрицы [130, 132]. Полученные значения коэффициента детерминации валидации  $R^2 = 0,79$  и  $RPD = 1,83$  показывают, что модель корректно отражает общее распределение значений фосфора в выборке. Сопоставление измеренных и предсказанных данных, рассчитанное по модели PLS, приведено на рисунке 15.

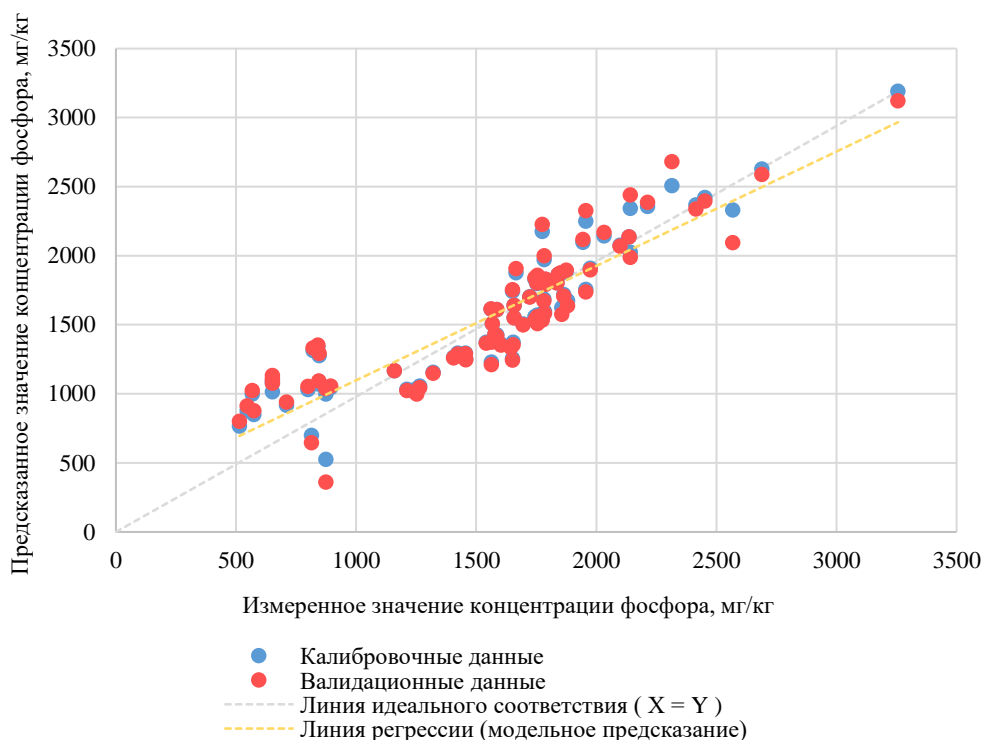


Рисунок 15. Соответствие измеренных и предсказанных значений фосфора в модели PLS

Зольность, характеризующая долю минеральной фракции в почве, демонстрирует выраженную спектральную обусловленность (рисунок 16). Минеральные фракции существенно влияют на форму NIR-спектра, главным

образом через изменение степени рассеяния и поглощения в длинноволновой части диапазона [72]. Полученные значения  $R^2$  валидации (0,75) и RPD (2,03) указывают на высокую стабильность модели и подтверждают её прогностическую надёжность при количественной оценке минеральной составляющей.

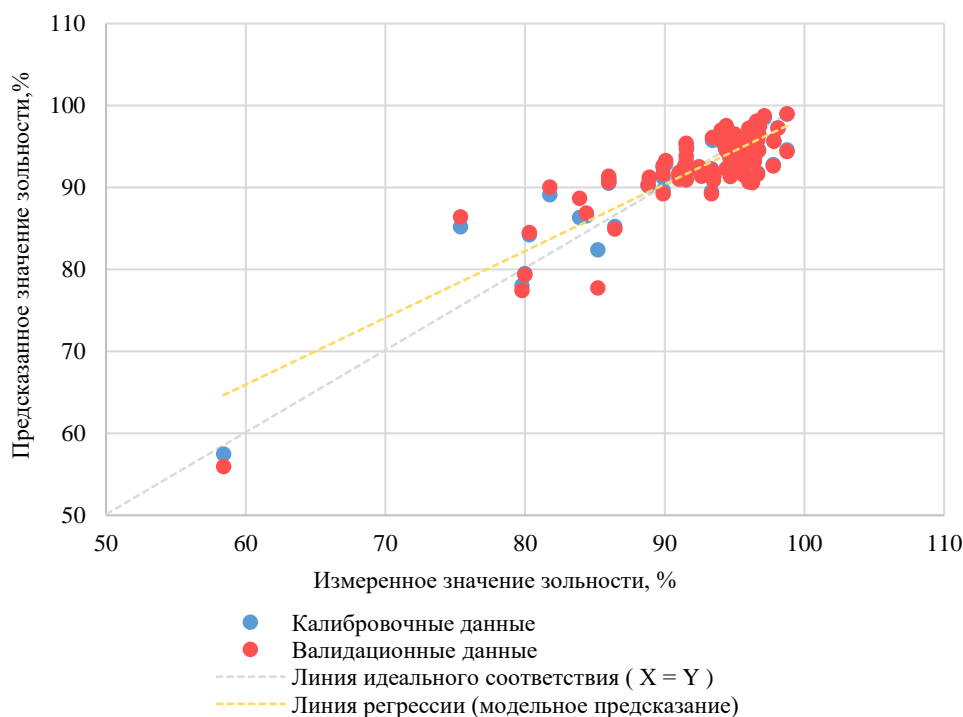


Рисунок 16. Соответствие измеренных и предсказанных значений зольности в модели PLS

Для калия выявлена устойчивая предсказательная способность, обусловленная его связью с минеральной фракцией. Значение  $R^2$  валидации составляет 0,76 при RPD 2,06.

К группе показателей с ограниченной предсказательной способностью относятся органический углерод ( $C_{\text{орг}}$ ), нитратный азот ( $\text{NO}_3^-$ ) и сера (S). Значения  $R^2$  валидации составляют 0,49, 0,52 и 0,58 соответственно, а коэффициенты RPD находятся в диапазоне 1,41-1,55, что соответствует моделям с умеренной информативностью. Ограниченность прогностических возможностей обусловлена тем, что наиболее информативные полосы поглощения, связанные с органическими и серосодержащими соединениями, располагаются преимущественно за пределами рабочего диапазона 645-1085 нм либо проявляются в нём в виде слабых обертоновых и комбинационных полос. Их вклад дополнительно маскируется фоновым

поглощением минеральной матрицы, что снижает чувствительность моделей к вариациям содержания соответствующих компонентов.

Наиболее низкой предсказательной способностью характеризуется нитритный азот ( $\text{NO}_2^-$ ) ( $R^2 = 0,22$ ,  $\text{RPD} = 1,15$ ). Характерные полосы поглощения азотсодержащих соединений располагаются в области выше 1300 нм, то есть вне диапазона регистрации, а низкие концентрации в почвенных образцах дополнительно повышают спектральную неопределённость [122, 146].

Сводные показатели качества построенных PLS-моделей приведены в таблице 5.

Таблица 5

**Статистические параметры PLS-моделей для количественной оценки агрохимических показателей**

Показатель	Рабочий диапазон	$R^2$ (калибровка)	$R^2$ (валидация)	RMSE (валидация)	RPD
Влажность, %	0,21-28,39	0,81	0,77	2,04	2,10
Натрий, мг/кг	0,01-7600	0,90	0,86	483,29	2,72
Фосфор, мг/кг	514-3256	0,84	0,79	246,42	1,83
Калий, мг/кг	0,01-13800	0,83	0,76	1512,37	2,06
Зольность, %	58,42-98,76	0,81	0,75	3,02	2,03
Азот нитратный, мг/кг	0,08-26,54	0,68	0,52	3,50	1,45
Азот нитритный, мг/кг	0,18-19,5	0,56	0,23	2,11	1,15
Органический углерод, %	0,15-24,4	0,68	0,49	2,54	1,41
Сера, мг/кг	0,01-5703	0,67	0,58	628,00	1,55

Представленная таблица обеспечивает комплексную оценку эффективности моделирования и позволяет выполнить сопоставительный анализ предсказательной способности моделей для различных агрохимических показателей.

Полученные результаты подтверждают высокую информативность ближней ИК-спектроскопии для оценки ряда почвенных параметров и демонстрируют возможность построения устойчивых моделей для отдельных агрохимических показателей. В то же время для компонентов, спектральные проявления которых слабо выражены в диапазоне 645-1085 нм, повышение точности прогнозирования возможно за счёт совершенствования методов обработки спектральных данных, направленных на усиление слабых диагностических признаков и снижение влияния минерального фона.

### 3.3 Индексный подход к оценке агрохимических характеристик грунтов

Переход от многомерных спектральных данных к количественным показателям осуществлялся посредством введения спектральных индексов, направленных на выделение устойчивых и воспроизводимых спектральных признаков, чувствительных к варьированию химического состава почв. Индексная форма представления данных снижает влияние факторов внешней variability, таких как текстура, влажность, гранулометрический состав и альbedo поверхности, которые при прямой работе со спектрами проявляются в виде смещения базовой линии и нестабильности интенсивности рассеяния [101, 136].

Для исследуемых агрохимических показателей использование экспертного подхода, основанного на визуальном выделении диагностических полос, оказалось невозможным [33, 105]. В рабочем диапазоне 645-1085 нм данные компоненты не формируют локализованных полос поглощения, их спектральное проявление ограничивается сглаженными изменениями наклона и формы кривой, возникающими под влиянием гумусовых соединений и вариаций минеральной матрицы [136]. Эти изменения не обладают чёткой спектральной структурой, что исключает возможность выбора опорных длин волн методом визуального анализа.

В связи с этим был реализован алгоритмический подход, основанный на выделении опорных точек спектра [33, 105]. На усреднённой спектральной кривой идентифицированы четыре диапазона с характерными перегибами: 700-720, 750-770, 810-830 и 915-935 нм (рисунок 17).

Для каждого участка были определены точки максимального изменения наклона, что позволило сформировать набор простых индексов, рассчитываемых как отношение интенсивностей в соседних опорных точках по формуле (2):

$$K_i = \frac{A_n}{A_{n+1}}, \quad (2)$$

где  $K$  - спектральный индекс состояния,

$A_n$  - значение спектрального сигнала в выбранной опорной точке,

$A_{n+1}$  - значение спектрального сигнала в следующей опорной точке спектральной кривой.

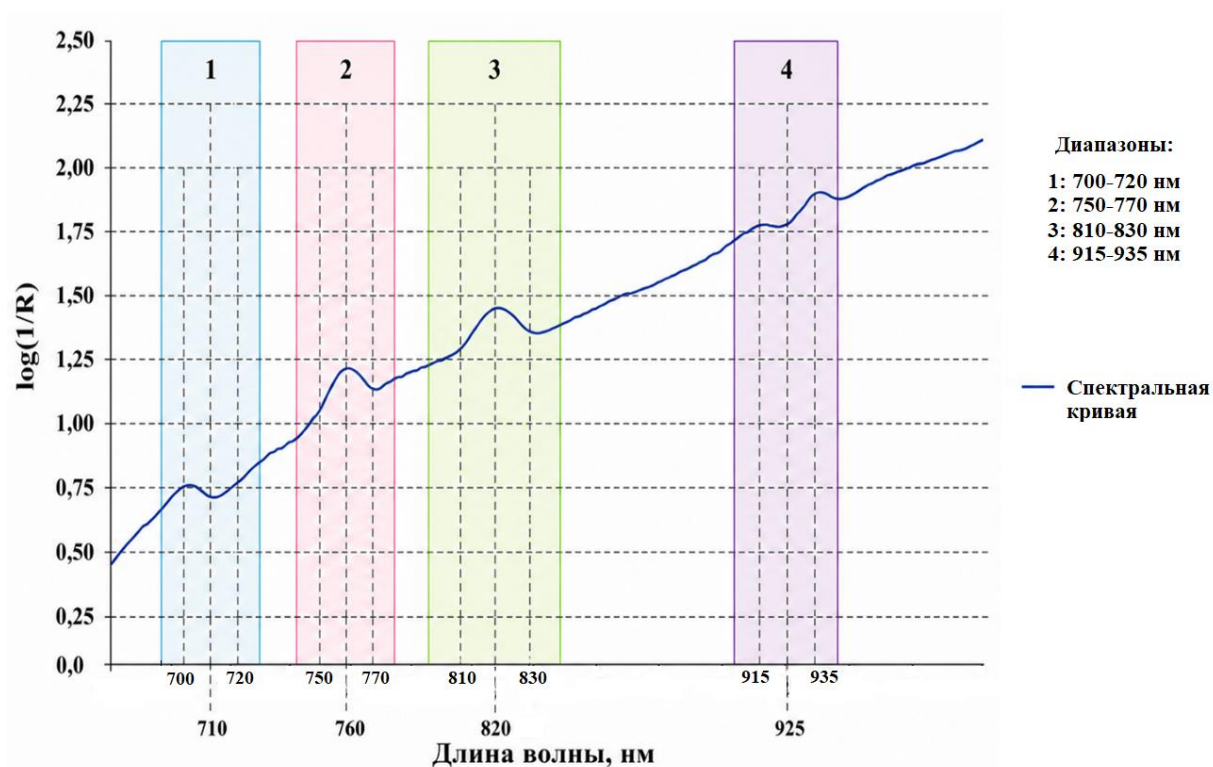


Рисунок 17. Выделение предполагаемых диагностических полос на спектральной кривой для разработки формы индексов состояния

Для оценки диагностических свойств простых индексов был выполнен анализ методом частичных наименьших квадратов (PLS). В нём набор индексов использовался в качестве X-переменных, а показатели химического состава в качестве Y-переменных – то есть откликов. Однако полученная модель не дала достоверного предсказания. Объяснённая дисперсия составила менее 10%, коэффициенты детерминации были низкими ( $R^2 < 0,5$ ), а значения RMSE, наоборот, оставались высокими. При рассмотрении графика нагрузок было установлено, что индексы группируются вблизи начала координат. Данный факт может свидетельствовать об отсутствии устойчивой ковариации ни с одним из исследуемых агрохимических показателей.

Спектральные индексы по расчётной формуле (2) оказались не чувствительными для количественной оценки агрохимических показателей. Из-за отрицательных результатов было принято решение о разработке расширенной

формы расчётного критерия, основанной на анализе относительных вариаций между удалёнными участками спектральной кривой (формула 3).

$$K_i = \frac{A_N - A_n}{A_N}, \quad (3)$$

где  $K$  - спектральный индекс состояния,

$A_N$  - значение спектрального сигнала в точке экстремума, расположенного выше по спектральной кривой,

$A_n$  - значение спектрального сигнала в точке экстремума, расположенного ниже по спектральной кривой.

На основе выделенных опорных точек были вычислены все допустимые комбинации индексов, формирующие набор расширенных параметров (таблица 6).

Таблица 6

**Набор расширенных спектральных индексов, использованных для оценки агрохимических показателей**

Индекс	Используемые длины волн, нм	Формула
$K_1$	710,760	$K_1 = \frac{A_{760} - A_{710}}{A_{760}}$
$K_2$	710,820	$K_2 = \frac{A_{820} - A_{710}}{A_{820}}$
$K_3$	710,925	$K_3 = \frac{A_{925} - A_{710}}{A_{925}}$
$K_4$	760,820	$K_4 = \frac{A_{820} - A_{760}}{A_{820}}$
$K_5$	760,925	$K_5 = \frac{A_{925} - A_{760}}{A_{925}}$
$K_6$	820,925	$K_6 = \frac{A_{925} - A_{820}}{A_{925}}$

Каждый из полученных индексов отражает определённый аспект формы спектральной кривой: степень асимметрии, амплитудные контрасты между функциональными участками, относительное смещение фрагментов спектра. Благодаря этому расширенные индексы обладают более выраженной физико-химической обусловленностью и потенциально большей чувствительностью к агрохимическим показателям.

Полученный массив расширенных индексных переменных был использован для построения моделей PLS, направленных на выявление функциональных связей между спектральными параметрами и агрохимическими показателями почв. Анализ результатов PLS - моделирования показал наличие выраженной структуры многомерного индексно-концентрационного пространства. На графике нагрузок (рисунок 18) расширенные индексы, в отличие от индексов, рассчитанных по формуле (2), не группируются вблизи начала координат и демонстрируют направленное распределение в сторону отдельных химических показателей.

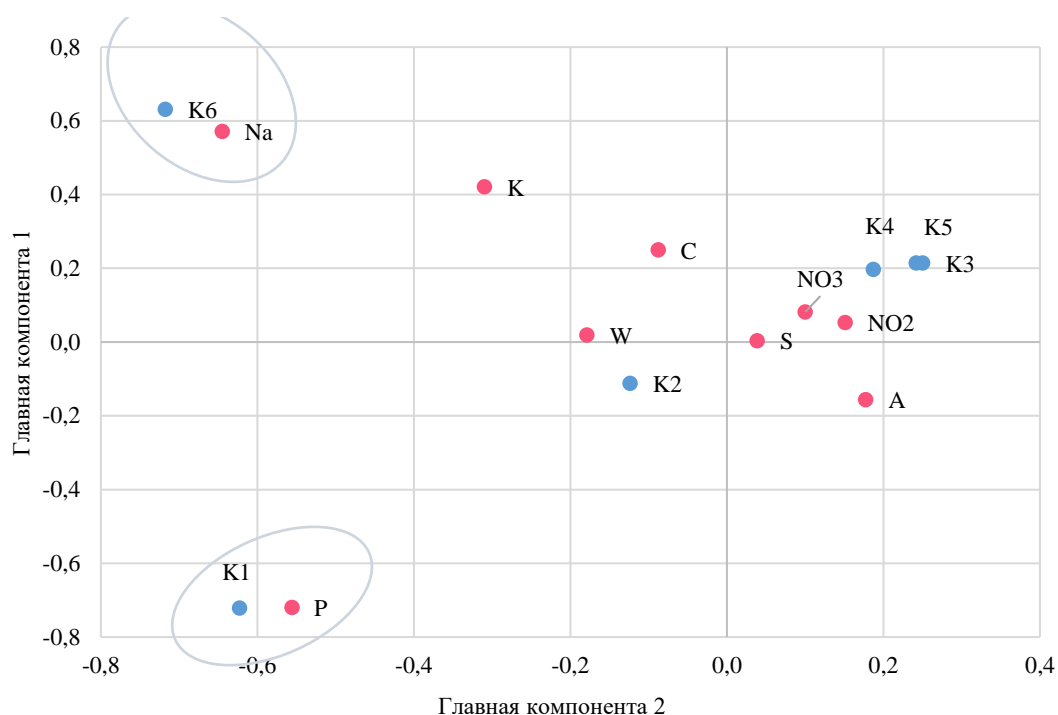


Рисунок 18. График нагрузок PLS для расширенных индексов и агрохимических показателей

По рисунку 18 отчетливо видна выраженная ковариация индекса  $K_1$  с содержанием фосфора, что проявляется в их близком расположении вдоль оси ГК1 в одном направлении. Такой характер взаимного расположения связан с наличием устойчивого латентного фактора, связывающего вариации формы спектральной кривой в выбранных диапазонах с содержанием фосфатных соединений в почве. Для индекса  $K_6$  наблюдается связь с натрием. Остальные индексы и агрохимические показатели характеризуются меньшим вкладом в формирование латентной структуры модели. Разделение индексов по направлениям главных

компонент подтверждает появление информативных спектральных признаков, чувствительных к колебаниям химического состава почв.

Для количественной оценки диагностических свойств каждого индекса был выполнен корреляционный анализ, включающий расчёт коэффициентов Пирсона между всеми индексами и химическими показателями (таблица 7).

Таблица 7

### Корреляционная матрица спектральных индексов и агрохимических показателей

Наименование показателя	K1	K2	K3	K4	K5	K6
Фосфор	<b>0,94</b>	0,01	-0,09	-0,11	-0,09	0,18
Азот нитратный	-0,11	-0,05	0,10	0,03	0,15	-0,05
Сера	-0,04	-0,04	-0,04	0,02	-0,04	-0,04
Натрий	0,22	0,02	-0,05	-0,03	-0,05	<b>0,90</b>
Калий	0,02	0,04	-0,02	-0,02	0,02	0,50
Азот нитритный	-0,18	0,01	-0,01	0,00	-0,01	-0,12
Углерод органический	-0,09	0,03	-0,04	-0,02	-0,03	0,21
Влажность	0,15	0,01	-0,04	0,00	-0,03	0,18
Зольность	-0,05	-0,02	0,05	0,01	0,03	-0,25

Полученные данные подтверждают связь ряда индексов с отдельными агрохимическими показателями. Ярко выраженная зависимость наблюдается для индекса  $K_1$  и содержанием фосфора ( $r = 0,94$ ), что согласуется с данными PLS-моделирования. Индекс  $K_1$  также демонстрирует положительную корреляцию с натрием и калием, что может быть связано с влиянием минеральной матрицы и сорбционных свойств почвы на изменение фосфорсодержащих соединений [108, 132]. Согласно данным корреляционного анализа индекс  $K_6$  коррелирует с содержанием натрия ( $r = 0,90$ ).

Для оценки информативности отдельных спектральных индексов были построены однофакторные PLS-модели. Индекс  $K_1$ , включённый в модель в качестве единственной независимой переменной, сформировал устойчивую линейную зависимость между расчетным параметром и содержанием фосфора в почве. Были получены удовлетворительные статистические показатели ( $R^2 = 0,89$ ,

RMSE = 151,38 мг/кг), свидетельствующие о высокой степени согласования модели с экспериментальными данными.

Анализ диаграммы соответствия измеренных и предсказанных значений (рисунок 19) показывает, что распределение точек вдоль регрессионной прямой носит систематический характер и не содержит выраженных отклонений, указывающих на структурные нарушения модели. Это позволяет сделать вывод о том, что индекс  $K_1$  отражает спектральные вариации почвенной матрицы, ассоциированные с содержанием фосфора, и способен количественно описывать изменения концентрации фосфора в исследуемых образцах.

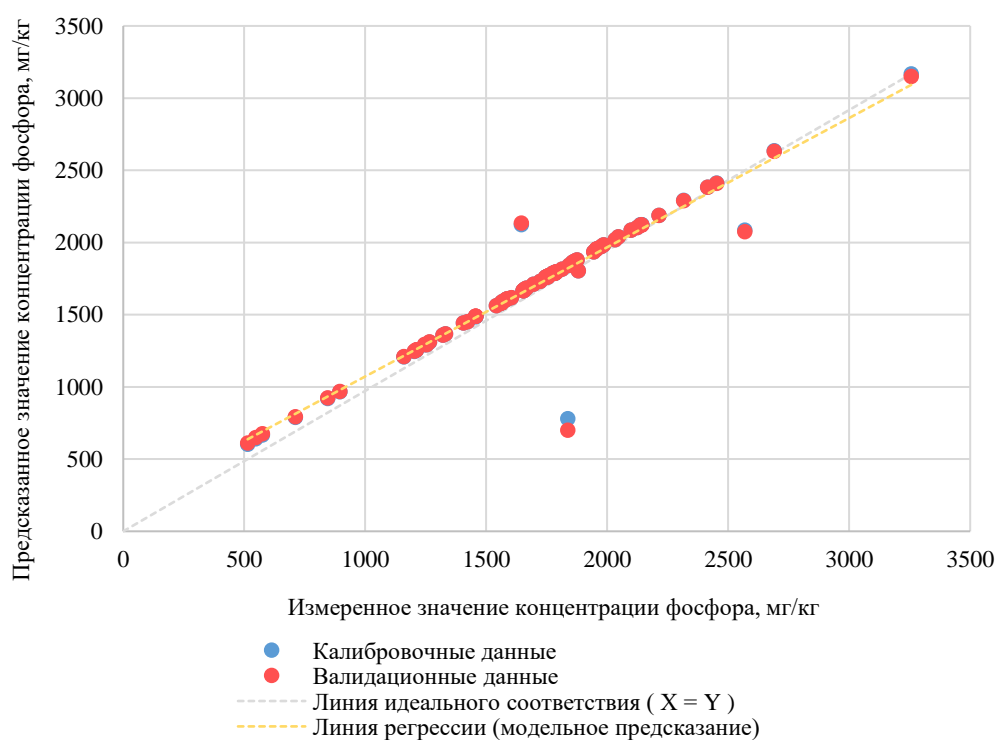


Рисунок 19. Соотношение измеренных и предсказанных значений содержания фосфора в однофакторной PLS-модели на основе индекса  $K_1$

Аналогичная процедура, выполненная для индекса  $K_6$ , показала наличие количественной зависимости с содержанием натрия ( $R^2 = 0,78$ , RMSE = 609,36 мг/кг) (рисунок 20). Несмотря на то, что точность модели уступает результатам, полученным при использовании полного спектрального диапазона, модель на основе индекса  $K_6$  обеспечивает корректное количественное прогнозирование и

воспроизводит общий характер вариаций содержания натрия в исследуемой выборке.

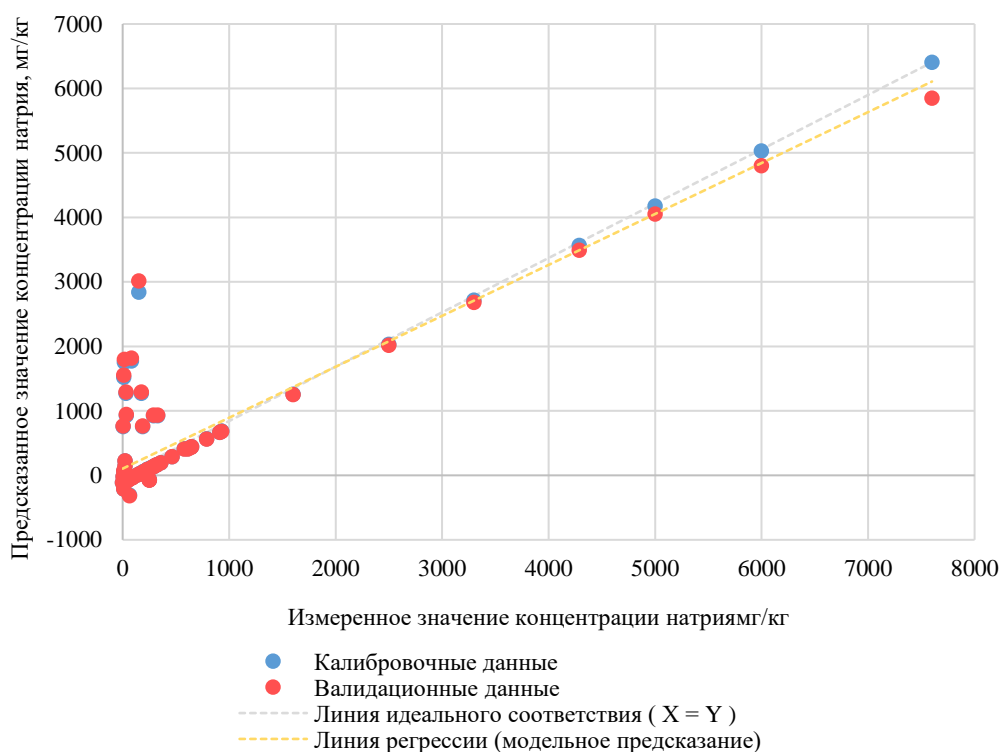


Рисунок 20. Соответствие измеренных и предсказанных значений содержания натрия в однофакторной PLS-модели на основе индекса  $K_6$

Для оценки степени сохранения диагностической информации при переходе от полного спектра к индексному представлению выполнено сравнение качества моделей двух типов. Показатели, полученные на полном спектре, и соответствующие результаты для индексных моделей приведены в таблице 8.

Анализ демонстрирует, что индекс  $K_1$  обеспечивает точность, сопоставимую и даже превосходящую спектральную модель для фосфора, тогда как индекс  $K_6$  воспроизводит основную вариацию содержания натрия, однако остаётся количественно применимым. Полученные результаты показывают, что переход от полного спектрального описания к индексному представлению не сопровождается потерей диагностически значимой информации при условии корректного выбора опорных точек и учёта структурных особенностей спектральной кривой.

### Сравнение точности моделей, основанных на полном спектре и индексных переменных

Показатель	Модель «спектр-параметр»			
	R <sup>2</sup> (калибровка)	R <sup>2</sup> (валидация)	RMSE (валидация)	RPD
Натрий, мг/кг	0,90	0,86	483,29	2,72
Фосфор, мг/кг	0,84	0,79	246,42	1,83
Показатель	Модель «индекс-параметр»			
	R <sup>2</sup> (калибровка)	R <sup>2</sup> (валидация)	RMSE (валидация)	RPD
Натрий, мг/кг	0,81	0,78	609,36	2,16
Фосфор, мг/кг	0,89	0,88	153,66	2,93

Расширенные индексы позволяют выделить спектральные признаки, отражающие вариации содержания отдельных почвенных компонентов, и формировать количественные модели, сопоставимые по точности с результатами, полученными на исходных спектрах. Таким образом, индексный подход демонстрирует эффективность в выделении информативных участков спектра и может рассматриваться как эффективный вспомогательный инструмент количественной диагностики агрохимических показателей почв.

#### 3.4 Индексный подход к диагностике загрязнения нефтепродуктами

Оценка нефтяного загрязнения по спектральным данным обладает рядом принципиальных отличий от определения агрохимических показателей. В БИК - области углеводороды формируют чётко выраженную комбинационную полосу валентных колебаний связей С-Н в диапазоне 2290-2330 нм. Этот спектральный признак характерен для широкого класса нефтепродуктов, что исключает необходимость дополнительного поиска диагностического диапазона или его статистической оптимизации.

В рамках настоящего исследования экспертный подход использовался не для выявления полосы поглощения, а для адаптации индекса к формату контактной БИК-регистрации и уточнения положения трёх опорных точек внутри заранее известного диапазона.

В дистанционном зондировании указанная полоса широко используется при расчёте углеводородного индекса HD, который рассматривается как бинарный или ранговый показатель наличия нефтяного загрязнения. Однако его исходная формула разработана для отражательных спектров, что некорректно для БИК-спектроскопии, формирующей абсорбционные кривые, представленные оптической плотностью  $A(\lambda)$ . Прямое перенесение отражательного индекса в абсорбционный формат методологически неверно, так как увеличение содержания углеводородов приводит к снижению коэффициента отражения, тогда как оптическая плотность при этом возрастает. Этот факт делает невозможным применение исходной формулы. Для корректного перехода от отражения к поглощению потребовалось преобразование структуры индекса, сохранив его физический смысл, но согласовав с природой контактных измерений.

Для решения данной задачи был разработан модифицированный индекс HD', основанный на соотношении оптических плотностей в области диагностической полосы поглощения нефтепродуктов. Индекс рассчитывался как отношение оптической плотности в центре диагностической полосы к среднему значению оптической плотности на её флангах (формула 4):

$$HD' = 10^3 \cdot \left( \frac{2 \cdot A_B}{(A_A + A_C)} - 0,98 \right), \quad (4)$$

где  $A_A$ ,  $A_B$ ,  $A_C$  - оптическая плотность на длинах волн 2297, 2313 и 2329 нм соответственно.

С целью повышения наглядности интерпретации спектральных различий между пробами исходные значения индекса были приведены к масштабированной форме, обеспечивающей более отчётливое разделение диапазонов загрязнения при сохранении линейной связи с концентрацией нефтепродуктов. Использование масштабированного представления позволило повысить визуальную различимость изменений спектрального отклика в области малых вариаций исходного отношения

оптических плотностей без изменения физического смысла индекса и характера калибровочной зависимости.

На первом этапе была исследована зависимость величины  $HD'$  от концентрации нефтепродукта в образцах почвы. Полученная кривая (рисунок 21) характеризуется монотонным увеличением индекса при росте содержания углеводородов, что согласуется с физической природой диагностической комбинационной полосы С-Н. Вместе с тем анализ экспериментальных данных выявил неоднородность поведения индекса в разных концентрационных областях.

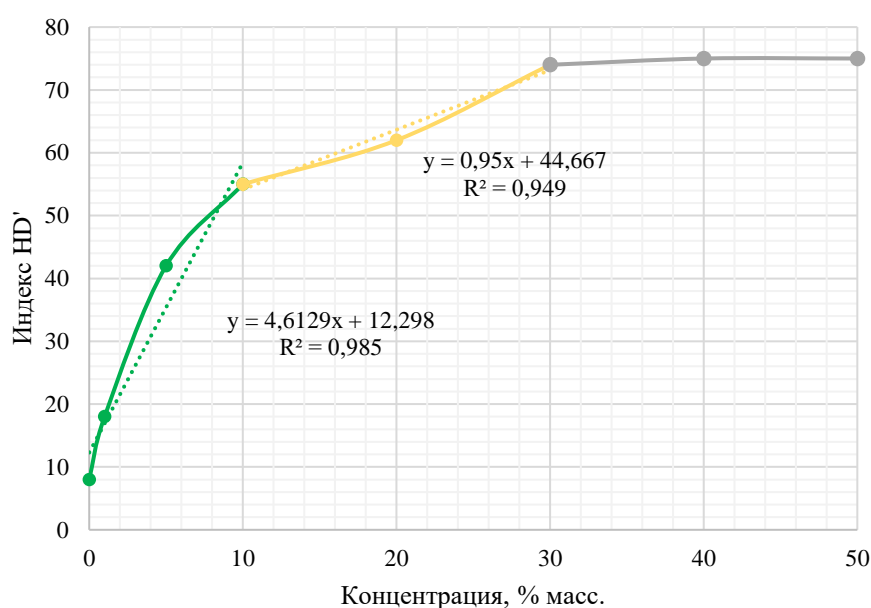


Рисунок 21. Пример зависимости значений индекса  $HD'$  от концентрации загрязнителя

В области низких концентраций (до 10% масс.) величина  $HD'$  возрастает практически линейно, что объясняется пропорциональным усилением интенсивности комбинационной полосы при сохранении структуры поверхности образца. Для концентраций от 10 до 30% масс. характер роста сохраняется, однако наклон зависимости становится более выраженным. Это свидетельствует о том, что в данном диапазоне прирост поглощения происходит быстрее, чем при низких концентрациях, что может быть связано с частичным перекрытием поверхностных пор и изменением локальных условий рассеяния. При концентрациях выше 30% масс. наблюдается переход к режиму насыщения: значения  $HD'$  практически

перестают изменяться. Данный эффект обусловлен формированием на поверхности образца непрерывной нефтяной плёнки, полностью определяющей характер спектрального отклика. После образования плёнки изменения концентрации нефтепродукта в объёме образца не влияют на величину оптической плотности в диагностическом диапазоне, что делает количественное моделирование в этой области невозможным. Поэтому интервал концентраций свыше 30% масс. был исключен из рассмотрения.

Для оценки влияния почвенной матрицы были сопоставлены зависимости  $ND'$  от концентрации нефти для различных типов грунтов (рисунок 22).

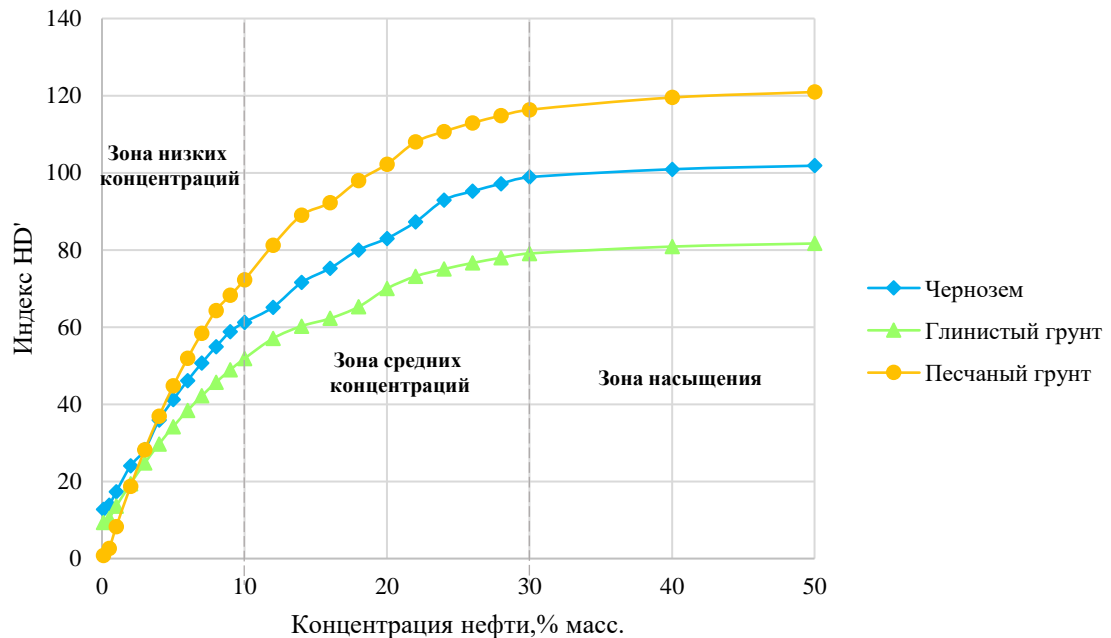


Рисунок 22. Зависимость индекса  $ND'$  от концентрации нефти для различных матриц

Для всех исследованных матриц сохраняется общий характер зависимости. Различия проявляются главным образом в абсолютных значениях индекса. Максимальные значения  $ND'$  получены для песчаного грунта, минимальные — для глинистого. Вероятно, это обусловлено различиями в гранулометрическом составе, поровом пространстве и интенсивности рассеяния излучения.

Таким образом, тип почвы влияет на величину спектрального отклика, но не меняет общий характер концентрационной зависимости. Это означает, что индекс  $ND'$  может использоваться для оценки нефтяного загрязнения в различных

почвенных матрицах, однако для повышения точности целесообразно строить калибровочную зависимость с учётом типа грунта на обследуемом объекте.

Дополнительно было проанализировано влияние типа нефтепродукта на изменение индекса HD' (рисунок 23).

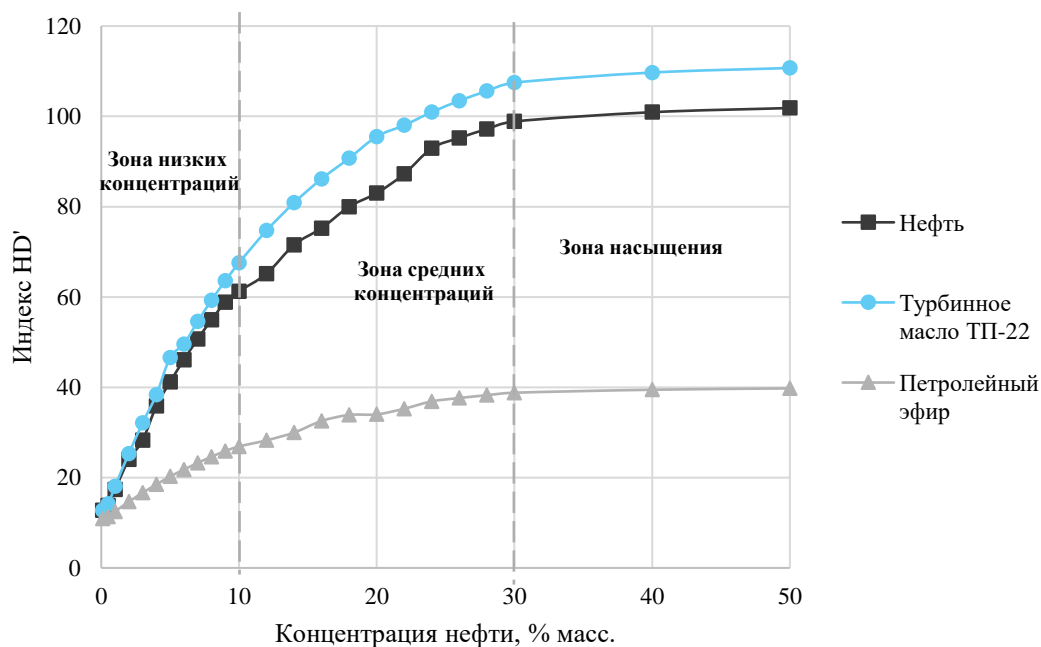


Рисунок 23. Зависимость индекса HD' от концентрации различных нефтепродуктов

Для нефти и турбинного масла ТП-22 зависимости имеют сходный характер: с увеличением концентрации наблюдается выраженный рост HD' с последующим переходом к насыщению. Для петролейного эфира значения индекса ниже во всём исследованном диапазоне, а изменение зависимости выражено слабее. Это связано с меньшей долей тяжёлых углеводородных компонентов и более низкой интенсивностью комбинационной полосы C–H. Следовательно, химический состав загрязнителя влияет на амплитуду спектрального отклика, но не нарушает общей закономерности изменения HD' с ростом концентрации.

Для количественной оценки полученных зависимостей были рассчитаны основные статистические параметры моделей, характеризующие качество калибровки и точность предсказания содержания нефтепродуктов. В качестве оценочных критериев использовались коэффициенты детерминации для калибровочной и валидационной выборок ( $R^2$ ), а также значения

среднеквадратичной ошибки предсказания (RMSE). Полученные результаты представлены в таблице 9.

Таблица 9

**Статистические характеристики моделей количественного определения нефтепродуктов**

Матрица	Загрязнитель	Диапазон	R <sup>2</sup> (калибровка)	R <sup>2</sup> (валидация)	RMSE (валидация)
Чернозем	Нефть	0,00-10,00	0,993	0,990	0,37
	Турбинное масло ТП-22		0,985	0,988	0,46
	Петролейный эфир		0,992	0,991	0,40
	Нефть	10,00-30,00	0,989	0,985	0,86
	Турбинное масло ТП-22		0,949	0,963	1,64
	Петролейный эфир		0,988	0,967	1,26
Глинистый грунт	Нефть	0,00-10,00	0,992	0,989	0,42
	Турбинное масло ТП-22		0,992	0,989	0,44
	Петролейный эфир		0,994	0,989	0,44
	Нефть	10,00-30,00	0,965	0,974	1,21
	Турбинное масло ТП-22		0,974	0,962	1,64
	Петролейный эфир		0,987	0,962	1,59
Песчаный грунт	Нефть	0,00-10,00	0,985	0,982	0,51
	Турбинное масло ТП-22		0,990	0,987	0,49
	Петролейный эфир		0,990	0,987	0,49
	Нефть	10,00-30,00	0,958	0,964	1,43
	Турбинное масло ТП-22		0,999	0,945	1,77
	Петролейный эфир		0,992	0,917	2,00

Для дополнительной оценки точности разработанных моделей была рассчитана средняя относительная погрешность количественного определения

нефтепродуктов. Данный показатель характеризует степень отклонения расчётных значений от фактических концентраций загрязнителя и позволяет оценить точность полученных калибровочных зависимостей. Результаты расчётов представлены в таблице 10.

Таблица 10

**Средняя относительная погрешность количественного определения нефтепродуктов**

Матрица	Загрязнитель	Диапазон	Средняя относительная погрешность, %
Чернозем	Нефть	0,0-10,0	12,34
	Турбинное масло ТП-22		12,89
	Петролейный эфир		11,23
	Нефть	10,0-30,0	3,73
	Турбинное масло ТП-22		7,38
	Петролейный эфир		5,69
Глинистый грунт	Нефть	0,0-10,0	13,11
	Турбинное масло ТП-22		12,23
	Петролейный эфир		13,37
	Нефть	10,0-30,0	4,90
	Турбинное масло ТП-22		7,61
	Петролейный эфир		7,22
Песчаный грунт	Нефть	0,0-10,0	14,23
	Турбинное масло ТП-22		14,06
	Петролейный эфир		14,09
	Нефть	10,0-30,0	6,60
	Турбинное масло ТП-22		8,10
	Петролейный эфир		9,23

Коэффициенты детерминации для калибровочных и валидационных выборок во всех исследованных случаях превышают 0,94. Полученные зависимости сохраняются для различных типов почв и загрязнителей.

Для диапазона 0-10% масс. значения RMSE остаются ниже 0,51% масс. Минимальные абсолютные отклонения в данной области соответствуют близкому к линейному изменению HD' при низких концентрациях нефтепродукта. Средняя относительная погрешность достигает 14,23%, что характерно для области малых концентраций.

Для диапазона 10-30% масс. значения RMSE возрастают до 2,00% масс., тогда как средняя относительная ошибка снижается до 3,73%. Наиболее низкие значения

ошибок получены для черноземных образцов. Для песчаного грунта и петролейного эфира наблюдается снижение точности количественного определения.

Полученные данные показывают, что индекс HD' обеспечивает воспроизводимую количественную связь с содержанием нефтепродукта в диапазоне до 30% масс. При этом точность определения зависит от почвенной матрицы и состава загрязнителя. Поэтому наиболее корректным является применение HD' с построением калибровочной зависимости для конкретного типа почвы или обследуемого объекта.

### **3.5 Формирование системы оперативной оценки биотопов**

Полученные в работе зависимости между спектральными характеристиками и содержанием диагностируемых компонентов, а также разработанные спектральные индексы позволяют перейти от анализа отдельных параметров к их интеграции в систему оперативной оценки состояния биотопов на основе анализа грунтовой среды.

В отличие от лабораторных методов, ориентированных на точечные измерения, спектральный подход обеспечивает получение пространственно детализированной информации. Это важно для техногенно трансформированных территорий, где распределение загрязняющих веществ носит мозаичный характер и определяется сочетанием источников эмиссии и процессов миграции.

Сформированная система оценки базируется на использовании спектральных индексов как диагностических признаков, чувствительных к различным аспектам состояния грунтовой среды. В рамках проведённых исследований выделены две основные группы индексов:

1. Индексы, характеризующие наличие и концентрацию нефтепродуктов,
2. Индексы, отражающие агрохимические свойства грунтов, в том числе содержание элементов питания и органического вещества.

Их совместное использование позволяет оценивать состояние грунтовой среды не только с позиции загрязнения, но и с точки зрения сохранности её

функциональных свойств. При интерпретации результатов основное внимание уделяется характеру изменения значений индексов по площади участка. Участки, на которых наблюдается резкое увеличение значений, как правило, соответствуют зонам локального накопления загрязняющих веществ. Более плавное изменение показателей отражает процессы их перераспределения и миграции. Однородное распределение значений, близких к фоновым, свидетельствует о стабилизированном состоянии грунтовой среды.

На основании результатов проведённых исследований был сформирован алгоритм реализации системы оперативной оценки биотопов с использованием контактной ближней инфракрасной спектроскопии, включающий последовательность этапов от получения спектральных данных до построения пространственной модели состояния грунтовой среды (таблица 11).

Важным условием повышения корректности работы системы является использование локальных калибровочных зависимостей. Как показано в работе, влияние свойств грунтовой матрицы на спектральный отклик зависит от типа диагностируемого показателя. Для агрохимических характеристик влияние матричной структуры препятствует выделению выраженных локальных полос поглощения в исследуемом диапазоне. В то же время индекс  $ND'$ , основанный на полосе колебания связи C-H, продемонстрировал устойчивость к различиям типов исследованных почвогрунтов. Следовательно, использование локальных калибровочных зависимостей может рассматриваться как наиболее предпочтительный способ обследования конкретных территорий.

Таким образом, предложенный подход обеспечивает переход от набора спектральных признаков к полноценной диагностике состояния техногенно трансформированных биотопов. Сформированная система позволяет выявлять пространственную структуру загрязнения и локализовать очаги поступления загрязнителей и предотвратить их дальнейшее распространение.

Таблица 11

**Алгоритм реализации системы оперативной оценки биотопов на основе контактной ближней ИК-спектроскопии**

№ этапа	Наименование этапа	Сущность этапа	Результат
0	Подготовительный этап	Анализ природно-техногенных условий территории, а именно особенностей грунтовой среды, функционального зонирования и рассмотрение потенциальных источников загрязнения. Определение целей обследования, пространственного разрешения и схемы размещения точек измерений.	Обоснование структуры обследования и параметров сети измерений
1	Контактная БИК-спектральная съёмка	Регистрация спектров диффузного отражения в БИК-диапазоне по разработанной сети, учитывающей особенности пространственной структуры объекта	Массив спектральных данных
2	Первичная обработка спектральных данных	Контроль качества измерений, усреднение, предварительная обработка спектров и расчёт спектральных индексов	Система спектральных признаков, пригодных для дальнейшего анализа и интерпретации
3	Выбор контрольных точек	Выделение репрезентативных точек на основе пространственного распределения индексов, включая зоны экстремальных и переходных значений	Образцы для лабораторной верификации и калибровки
4	Лабораторный анализ	Определение содержания диагностируемых компонентов в контрольных пробах с использованием аттестованных методик	Эталонные значения, обеспечивающие привязку спектральных данных к физико-химическим показателям
5	Построение калибровочной зависимости	Установление локальных зависимостей между спектральными индексами и концентрациями диагностируемых компонентов	Калибровочная модель, адаптированная к условиям конкретного биотопа
6	Расчёт и интерпретация распределения показателей	Применение калибровочной модели ко всему массиву спектральных данных с последующим анализом пространственного распределения	Пространственная модель состояния биотопа с выявленными аномальными зонами

### 3.6 Выводы по главе 3

1. Выполнен анализ спектральных характеристик натуральных и модельных почвенно-грунтовых образцов в ближнем инфракрасном диапазоне. Установлено, что различия отклика определяются как составом почвенной матрицы, так и наличием нефтепродуктов. Для нефтезагрязнённых образцов выявлены диагностические области, связанные с комбинационными полосами колебаний связей С-Н в диапазонах 1700-1750 и 2290-2350 нм. Показано, что интенсивность спектральных изменений возрастает с увеличением концентрации нефтепродуктов и зависит от типа грунтовой матрицы.

2. Показано, что предварительная обработка спектров с применением автошкалирования и нормализации методом SNV позволяет снизить влияние вариаций, связанных с неоднородностью поверхности, плотностью укладки и гранулометрическим составом образцов, и сформировать массив данных, пригодный для многомерного анализа и расчёта спектральных индексов.

3. На основе PLS-моделирования построены количественные модели взаимосвязи между спектральными характеристиками в диапазоне 645-1085 нм и рядом агрохимических показателей. Наиболее высокие значения коэффициента детерминации валидации получены для натрия -  $R^2 = 0,86$ , фосфора -  $R^2 = 0,79$ , влажности -  $R^2 = 0,77$ , калия -  $R^2 = 0,76$  и зольности -  $R^2 = 0,75$ . Для нитратного азота, органического углерода, серы и нитритного азота точность моделей была ниже:  $R^2 = 0,52, 0,49, 0,58$  и  $0,23$  соответственно.

4. Разработан индексный подход к оценке агрохимических характеристик грунтов. Установлено, что расширенный индекс  $K_1$  демонстрирует высокую корреляцию с содержанием фосфора,  $r = 0,94$ , а индекс  $K_6$  - с содержанием натрия,  $r = 0,90$ . Однофакторная модель на основе  $K_1$  обеспечила оценку содержания фосфора с  $R^2 = 0,88$  и  $RMSE = 153,66$  мг/кг, а модель на основе  $K_6$  - оценку содержания натрия с  $R^2 = 0,78$  и  $RMSE = 609,36$  мг/кг.

5. Разработан модифицированный углеводородный индекс HD', адаптированный к анализу спектров оптической плотности в контактной БИК-спектроскопии. Для диапазона нефтепродуктов 0-10% масс. калибровочная модель характеризуется  $R^2$  валидации не менее 0,982 и RMSE не более 0,51 % масс., для диапазона 10-30% масс. -  $R^2$  валидации не менее 0,917 и RMSE не более 2,00% масс. При концентрациях выше 30% масс. индекс переходит в область насыщения, что ограничивает его количественное применение.

6. Показано, что в пределах исследованных песчаных, глинистых и черноземных матриц зависимость индекса HD' от концентрации нефтепродуктов сохраняет сходный характер, что свидетельствует о снижении влияния матричных эффектов при использовании относительного индексного показателя.

7. Разработана система оперативной оценки состояния биотопов на основе контактной БИК - спектроскопии, объединяющая методы спектральной регистрации, индексного анализа и локального калибровочного моделирования. Показано, что использование спектральных индексов и построенных калибровочных зависимостей позволяет осуществлять пространственно детализированную диагностику состояния грунтовой среды, выявлять зоны локального загрязнения и оценивать степень техногенной трансформации исследуемых территорий.

## **ГЛАВА 4. ОБОСНОВАНИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ СИСТЕМЫ ОПЕРАТИВНОЙ ОЦЕНКИ БИОТОПОВ ПРИ ЛИКВИДАЦИИ ПОСЛЕДСТВИЙ ЗАГРЯЗНЕНИЯ**

### **4.1 Теоретическое моделирование пространственной структуры загрязнения и схем обследования**

Как показано в главе 1, одним из факторов, существенно осложняющих оценку состояния техногенно трансформированных биотопов, являются неоднородность грунтовой среды и пространственная неоднородность распределения загрязняющих веществ. В подобных условиях применение традиционных схем точечного пробоотбора не всегда позволяет корректно охарактеризовать состояние территории.

Разработанная в главе 3 система оперативной оценки биотопов на основе контактной ближней ИК-спектроскопии ориентирована на повышение пространственной детализации обследования территорий. Для оценки влияния плотности наблюдений на достоверность результатов выполнено теоретическое моделирование различных схем обследования в условиях неоднородного распределения загрязняющих веществ.

В качестве расчетной области использован участок размером 10×10 м, разбитый на регулярную сетку с шагом 1 м, что соответствует 100 элементарным ячейкам. Такое дискретное представление позволяет воспроизвести характерные масштабы неоднородности, наблюдаемые на техногенно нарушенных территориях.

В рамках анализа были рассмотрены два сценария пространственного распределения загрязняющего компонента. Первый сценарий описывает условно равномерное распределение загрязняющего компонента, при котором концентрации близки к среднему значению 2,0% масс. и колеблются в пределах  $\pm 0,2$  %. Пример такого распределения представлен на рисунке 24 (а). Второй сценарий моделирует мозаичную структуру, включающую локальные зоны повышенного уровня загрязнения (до 5,0% масс.) на фоне участков с низкими концентрациями порядка 0,5% масс. Данный вариант отражает

условия неравномерного распределения загрязняющих веществ и локальной аккумуляции загрязнителей (рисунок 24, б).

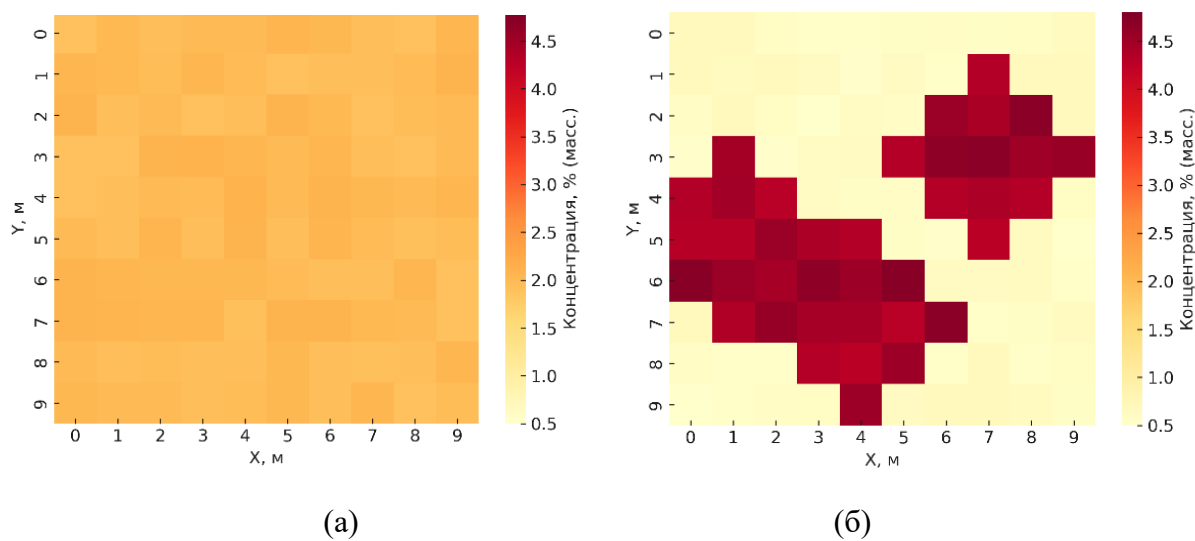


Рисунок 24. Карта распределения загрязнения:

а - равномерное распределение, б - мозаичное распределение

Для обоих сценариев были смоделированы две схемы обследования. Первая схема соответствовала традиционному пробоотбору по типу «конверта», применяемому согласно ГОСТ 17.4.3.01-2017 (рисунок 25, а) [20], вторая - сеточному контактному обследованию с шагом 1 м (рисунок 25, б).

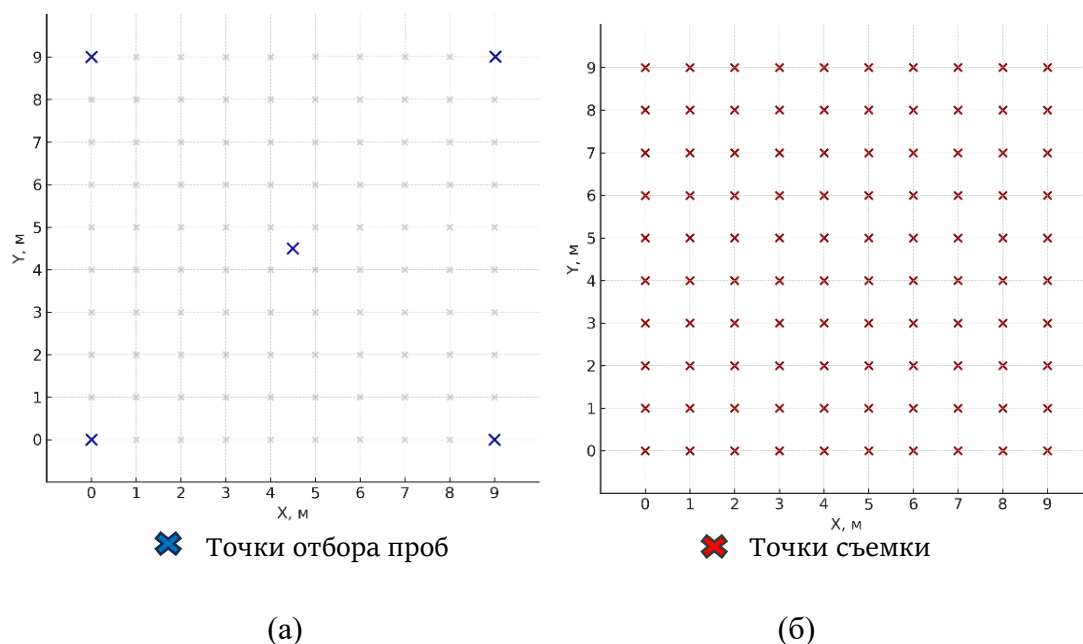


Рисунок 25. Схема плотности обследования территории:

а - отбор проб методом «конверта», б - съемка методом контактной спектроскопии

Для сопоставления схем оценивались среднее значение, стандартное отклонение, коэффициент вариации, систематическое смещение и среднеквадратическая ошибка (RMSE). Расчёты проводились с использованием подходов, регламентированных ГОСТ ISO 5725-1-2002 и ГОСТ Р 8.736-2011 [16, 18]. Сравнение результатов для равномерного и мозаичного сценария представлено в таблице 12 и 13 соответственно.

Таблица 12

**Сравнение статистических показателей точности методов при равномерном распределении загрязнения**

№	Показатель	Метод «конверта»	Сеточное контактное обследование
1	Среднее значение, % масс.	2,01	2,00
2	Стандартная ошибка среднего значения	0,03	0,01
3	Относительная погрешность, %	0,69	<0,0001
4	Среднеквадратичная ошибка (RMSE)	0,014	0,0001
5	Количество измерений	5	100

Таблица 13

**Сравнение статистических показателей точности методов при мозаичном (очаговом) распределении загрязнения**

№	Показатель	Метод «конверта»	Сеточное контактное обследование
1	Среднее значение, % масс.	1,36	2,08
2	Стандартная ошибка среднего значения	0,75	0,19
3	Относительная погрешность, %	34,61	<0,0001
4	Среднеквадратичная ошибка (RMSE)	0,72	0,005
5	Количество измерений	5	100

При равномерном распределении загрязнения обе схемы давали близкие оценки среднего содержания. Тем не менее сеточное обследование характеризовалось меньшей вариабельностью, что обусловлено более полным охватом площади участка. Это свидетельствует о том, что даже при

слабовыраженной неоднородности увеличение плотности наблюдений обеспечивает более устойчивую оценку среднего содержания загрязняющего компонента.

При мозаичном распределении различия между схемами становятся существенно более выраженными. Традиционная схема пробоотбора систематически занижала оценку среднего содержания загрязняющего вещества вследствие высокой вероятности пропуска локальных зон с высокой концентрацией. Проявлялось это в увеличении относительной погрешности и RMSE определения концентраций. Контактное обследование, напротив, позволило корректнее определить среднее содержание загрязнителя и выявить особенности его пространственного распределения по поверхности.

Проведённый анализ статистических характеристик вариантов определения загрязнения показывает, что достоверность оценки состояния техногенно нарушенных территорий зависит от плотности точек наблюдений. В условиях мозаичного распределения загрязняющих веществ увеличение числа точек обследования позволяет пропорционально снизить вероятность систематических ошибок. Полученные результаты служат теоретическим обоснованием применения контактных спектральных обследований в условиях пространственно неоднородного загрязнения.

#### **4.2 Характеристика обследуемых биотопов**

В рамках настоящего исследования были рассмотрены два типа объектов. К первой группе отнесены территории, для которых выполнен анализ материалов инженерно-экологических изысканий с целью оценки возможностей и ограничений традиционных методов контроля. Ко второй группе относится объект, на котором проведена практическая апробация разработанной системы спектральной диагностики.

Такой подход позволил не только проанализировать применимость существующих схем обследования в условиях пространственной

неоднородности грунтов, но и оценить, в какой степени предложенный метод позволяет преодолеть выявленные ограничения.

К объектам первой группы относится территория бывшего ОАО «Средневолжский завод химикатов», расположенная в северо-западной части г. Чапаевска Самарской области. Площадь промышленной площадки составляет около 155 га. В пределах территории расположены разрушенные и частично сохранившиеся производственные здания, а также объекты накопления отходов - шламонакопители и шламоотстойники, сформированные в период функционирования предприятия в 1950-е годы [57].

Производственная деятельность была связана с выпуском химических удобрений и ядохимикатов, что привело к формированию значительных объёмов техногенных отложений и загрязнению грунтов. В настоящее время территория относится к объектам накопленного экологического вреда. Дополнительным фактором экологического риска является её расположение вблизи русла реки Чапаевки: значительная часть участка находится в пределах водоохранной зоны и прибрежной защитной полосы.

Сочетание длительного техногенного воздействия и отсутствия системной рекультивации обусловило формирование сложной пространственной структуры загрязнения. Данный объект использован для анализа применимости традиционных методов контроля на территориях накопленного экологического вреда.

Вторым объектом первой группы является территория в районе сельского поселения Рождествено Самарской области, нарушенная вследствие длительного несанкционированного размещения отходов спиртового производства. Основным источником загрязнения является спиртовая барда - жидкий органический отход, длительное накопление которого привело к формированию техногенной толщи, включающей переработанные грунты и продукты разложения органических веществ [79].

Такие образования характеризуются высокой неоднородностью состава и свойств, а также значительной вариабельностью показателей в пределах

относительно небольших расстояний. Это существенно осложняет интерпретацию результатов инженерно-экологических изысканий и снижает информативность традиционных методов пробоотбора. Материалы, полученные по данному объекту, использованы для оценки возможностей классических подходов в условиях сложной структуры грунтовой среды.

В качестве объекта практической апробации разработанной системы спектральной диагностики была выбрана территория мазутных озёр, расположенная на границе Кировского внутригородского района г. Самары и Волжского района Самарской области. Участок сформирован в пределах бывшего карьера, который с середины XX века использовался для размещения жидких промышленных отходов. Площадь обследуемой территории составляет около 19,38 га [77].

В результате длительной эксплуатации без проектной документации и природоохранных мероприятий на участке сформировалась мощная техногенная толща общей массой до 750 тыс. тонн, включающая содержимое мазутного озера, антропогенные грунты, золо-шлаковые компоненты и другие виды отходов [77].

Длительное накопление отходов без контролируемых условий размещения привело к формированию неоднородной по составу и степени загрязнения грунтовой толщи. В пределах участка наблюдаются чередования участков с различной степенью загрязнения, локальные зоны пропитки нефтепродуктами, а также включения строительных и органических материалов. Мозаичный характер распределения загрязнения делает данный объект показательным для апробации методов с высокой плотностью измерений. Именно на этом участке была проведена практическая проверка разработанной системы спектральной диагностики.

Выбор рассматриваемых объектов обусловлен не только их доступностью для исследования, но и сходством условий формирования и функционирования. Несмотря на различия в характере техногенного воздействия и типе загрязняющих веществ, все участки сформировались в

результате длительной промышленной или хозяйственной деятельности, сопровождающейся накоплением техногенных материалов и отсутствием контролируемых условий их размещения.

Указанные территории отличаются сложным строением грунтовой толщи, наличием потенциальных источников поступления загрязняющих веществ и выраженной пространственной неоднородностью их распределения. Дополнительным фактором является расположение части участков вблизи населённых пунктов и в пределах водоохранных зон, что повышает риск миграции загрязняющих веществ в сопредельные компоненты окружающей среды.

Таким образом, выбранные территории являются сопоставимыми по ключевым факторам, определяющим сложность диагностики, и могут рассматриваться как репрезентативные объекты для оценки применимости разрабатываемой системы методов контроля в условиях техногенно нарушенных биотопов.

### **4.3 Анализ практики инженерно-экологических обследований на техногенно нарушенных территориях**

#### **4.3.1 Особенности пространственно-временной структуры мониторинга на промышленной площадке**

Для сопоставления результатов теоретического моделирования с практикой производственного экологического контроля рассмотрена система мониторинга почвенного покрова на территории бывшего ОАО «Средневолжский завод химикатов» (г. Чапаевск Самарской области). Наличие на территории шламонакопителей и шламоотстойников, сформированных в период эксплуатации химического производства, предопределяет необходимость регулярного контроля состояния почв как потенциального источника вторичного загрязнения.

В 2022-2024 гг. в рамках реализации мероприятий по рекультивации территории осуществлялся производственный экологический мониторинг

почвенного покрова. Отбор проб проводился в двух стационарных точках (1-П и 2-П), расположенных в зоне въезда на территорию и вблизи шламоотстойника Ш-2. В 2022 г. отбор осуществлялся с выделением подточек, в последующие годы контроль выполнялся по двум основным пунктам наблюдения.

Следует отметить, что выбор стационарных точек наблюдения не является случайным и осуществляется на основе предварительного анализа условий площадки, включая расположение потенциальных источников загрязнения и особенностей техногенного рельефа. Таким образом, конфигурация сети мониторинга отражает экспертное представление о наиболее информативных зонах контроля. Однако даже при таком подходе число точек наблюдения остаётся ограниченным, что не гарантирует выявление локальных участков повышенного загрязнения.

За рассматриваемый период выполнено пять серий лабораторных исследований: август 2022 г., май и октябрь 2023 г., май и сентябрь 2024 г. (таблица 14). Общая продолжительность временного ряда составила около 25 месяцев, интервалы между отборами варьировали от 4 до 9 месяцев. Всего отобрано 12 проб почвы, каждая из которых анализировалась по 17 показателям. Суммарный объём выполненных лабораторных определений составил 204.

*Таблица 14*

**Периодичность и объём отбора проб почвы**

Дата отбора	Пункт	Число проб	Показателей на пробу	Число определений
Август 2022	1.1-П, 1.2-П, 2.1-П, 2.2-П	4	17	68
Май 2023	1-П, 2-П	2	17	34
Октябрь 2023	1-П, 2-П	2	17	34
Май 2024	1-П, 2-П	2	17	34
Сентябрь 2024	1-П, 2-П	2	17	34

Таким образом, мониторинг характеризуется высокой аналитической детализацией каждой пробы при ограниченном числе точек наблюдения и дискретном характере временного контроля.

В качестве индикаторного показателя изменчивости рассмотрено содержание нефтепродуктов, являющихся одним из основных загрязняющих компонентов на площадке (таблица 15).

Таблица 15

### Сравнительная характеристика ключевых загрязнителей по годам

Показатель	Пункт	Август 2022	Май 2023	Октябрь 2023	Май 2024	Сентябрь 2024
Нефтепродукты, мг/кг	1-П	2100	1200	1100	1400	1100
	2-П	745	9400	9500	850	900

Для наглядного сопоставления изменений содержания нефтепродуктов в контрольных точках результаты мониторинговых наблюдений были представлены графически. Динамика концентраций нефтепродуктов в точках 1-П и 2-П за различные периоды наблюдений приведена на рисунке 26.

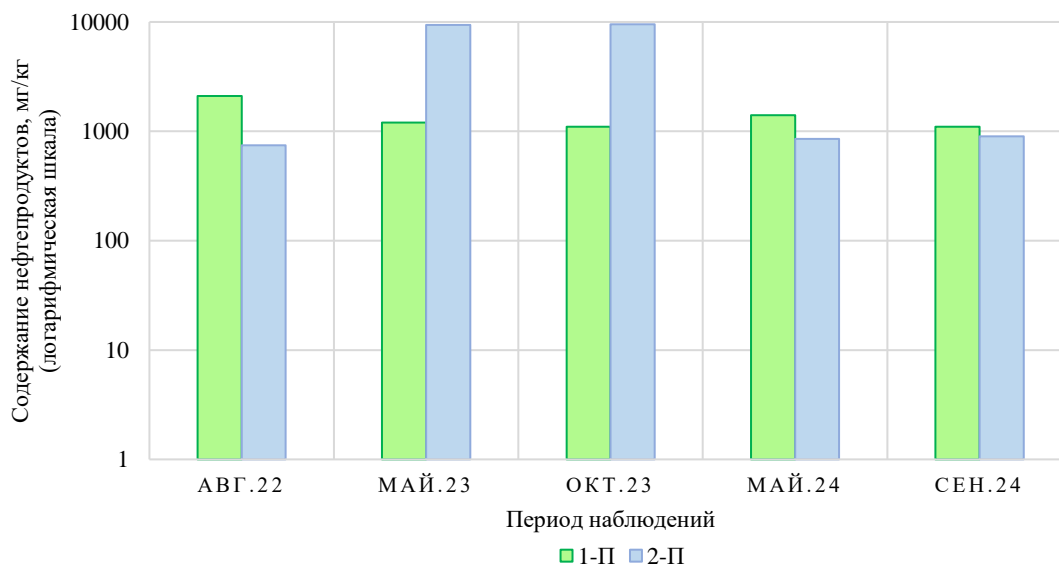


Рисунок 26. Динамика содержания нефтепродуктов в контрольных точках 1-П и 2-П

В точке 1-П в течение всего периода наблюдений концентрации нефтепродуктов находились в диапазоне 1100-2100 мг/кг. Максимальное

значение зафиксировано в августе 2022 г. (2100 мг/кг), минимальное - в октябре 2023 г. (1100 мг/кг). Размах вариации составил около 1000 мг/кг, что указывает на колебательный характер показателя при сохранении превышения нормативных уровней.

В точке 2-П динамика носила более выраженный характер. В августе 2022 г. концентрация составляла 745 мг/кг, в 2023 г. зарегистрировано увеличение до 9400-9500 мг/кг, после чего в 2024 г. значения снизились до 850-900 мг/кг. Максимальное значение превышало минимальное более чем в 12 раз, что свидетельствует о выраженной неоднородности распределения загрязнения в пределах локального участка.

При наличии пяти временных срезов за период более двух лет восстановление непрерывной динамики изменения концентраций между датами отбора невозможно. Отсутствует возможность определения скорости изменения показателей, продолжительности периодов повышенных значений и момента начала или окончания аномалий.

Выявленная амплитуда колебаний указывает на нестационарность распределения нефтепродуктов на территории объекта. Различия между пунктами наблюдения в отдельные периоды достигают 8,5 тыс. мг/кг, что подтверждает мозаичный характер техногенного воздействия, типичный для площадок с длительной промышленной эксплуатацией.

Сопоставление временных рядов по двум пунктам показывает отсутствие синхронности изменения концентраций. Максимальные значения в точке 2-П зафиксированы в 2023 г., тогда как в точке 1-П в тот же период отмечалось снижение показателя по сравнению с 2022 г. Это может свидетельствовать о перераспределении загрязняющих веществ в пределах площадки либо о влиянии локальных технологических факторов, связанных с проведением рекультивационных мероприятий.

При существующей конфигурации наблюдений количественная оценка пространственного распределения концентраций по всей территории невозможна. Между стационарными пунктами контроля остаётся

значительная площадь без прямых измерений, вследствие чего оценка состояния почвенного покрова вне точек отбора носит вероятностный характер.

Кроме того, интервал между отдельными сериями отбора (до 9 месяцев) превышает характерные сроки возможных изменений физико-химических параметров почв при проведении инженерных работ. В результате фиксируемые значения отражают интегральное состояние участка на дату отбора, без возможности проследить краткосрочные изменения, связанные с перемещением грунтов, изоляцией источников загрязнения или изменением гидрологических условий.

Таким образом, результаты анализа производственного экологического мониторинга свидетельствуют о наличии выраженной пространственно-временной изменчивости содержания нефтепродуктов на промышленной площадке.

При этом действующая схема наблюдений, несмотря на соответствие нормативным требованиям, не обеспечивает достаточной разрешающей способности ни по пространству, ни по времени. При существующей периодичности и конфигурации наблюдений результаты мониторинга отражают преимущественно дискретные состояния объекта в отдельные моменты времени, что затрудняет анализ динамики перераспределения загрязняющих веществ в пределах площадки.

Полученные результаты подтверждают, что при обследовании техногенно трансформированных территорий информативность контроля в значительной степени определяется плотностью наблюдений и возможностью пространственно детализированной оценки распределения загрязняющих веществ в грунтовой среде.

### **4.3.2 Особенности пространственной неоднородности загрязнения почв на территории размещения отходов спиртового производства**

Инженерно-экологические изыскания на территории размещения отходов спиртового производства в районе с. Рождествено Самарской области выполнялись в рамках проекта рекультивации техногенно нарушенных земель, реализуемого по государственному контракту, инициированному Министерством лесного хозяйства, охраны окружающей среды и природопользования Самарской области. Участок представляет собой территорию длительного накопления отходов спиртового производства (барды), что предопределило формирование специфических условий почвенного покрова и пространственного распределения загрязняющих веществ.

Выбор данного объекта для анализа не является случайным. В отличие от промышленных площадок с локализованными источниками воздействия, здесь загрязнение формировалось как результат длительного и, по существу, площадного поступления органосодержащих отходов. В таких условиях пространственная структура загрязнения приобретает сложный, мозаичный характер, а её описание средствами традиционного пробоотбора становится принципиально затруднённым. Именно поэтому данный участок представляет интерес с точки зрения оценки применимости классических методов инженерно-экологических изысканий.

Покров территории сформирован в условиях выраженного техногенного воздействия. Естественный почвенный профиль здесь в значительной степени нарушен или утрачен, а поверхностный слой представлен смесью перемещённых почвенных и техногенных материалов. В этих условиях анализ проводился как по почвенным пробам, характеризующим состояние верхнего слоя, так и по пробам грунтов, отобраным в пределах участков распространения переотложенных и насыпных образований, включая зоны дамб обвалования.

В ходе инженерно-экологических изысканий был выполнен лабораторный анализ по расширенному перечню показателей, включающему 29 параметров, характеризующих химический состав и свойства почв и грунтов. Такой объём данных отражает необходимость комплексной оценки состояния техногенно нарушенной территории, однако в рамках настоящего исследования внимание сосредоточено на группе показателей, наиболее информативных с точки зрения решаемых задач.

В качестве основных рассмотрены нефтепродукты, а также соединения фосфора и азота. Нефтепродукты позволяют оценить уровень техногенной нагрузки и степень ограничений для последующего освоения территории. Соединения фосфора и азота, в свою очередь, характеризуют агрохимическое состояние геосреды и потенциальные условия формирования растительного покрова. Рассмотрение указанных показателей в совокупности позволяет перейти от фиксации наличия загрязнения к оценке состояния почвенной среды в контексте её дальнейшего восстановления.

Результаты анализа данных инженерно-экологических изысканий показывают, что распределение всех рассматриваемых показателей носит выражено неоднородный характер. Диапазоны значений и характеристика пространственной изменчивости ключевых показателей представлены в таблице 16.

*Таблица 16*

**Диапазоны значений и характеристика пространственной изменчивости  
ключевых показателей**

Показатель	Минимальное значение, мг/кг	Максимальное значение, мг/кг	Фон, мг/кг
Нефтепродукты	<20,00	149,00	31,00
Фосфор	255,00	1421,00	705,00
Азот нитратный	4,00	64,00	14,00
Азот аммонийный	98,00	795,00	211,80
Азот нитритный	0,49	24,04	0,64

Представленные значения демонстрируют значительную амплитуду изменения показателей и подтверждают выраженную пространственную неоднородность исследуемой территории.

Содержание нефтепродуктов в исследованных пробах изменяется в широких пределах - от значений ниже предела обнаружения или близких к нему до 149,00 мг/кг. В контрольной пробе (50-П) содержание нефтепродуктов составляет 31,00 мг/кг. При этом даже в отсутствие формального превышения нормативных значений для большинства проб пространственная картина распределения нефтепродуктов остаётся резко неравномерной: участки с минимальными значениями чередуются с разрозненными очагами, где содержание нефтепродуктов возрастает в несколько раз. Это свидетельствует о том, что нефтяной компонент не формирует сплошного поля, а присутствует в виде дискретных локальных накоплений, обусловленных неоднородностью техногенного материала.

Не менее показательным является распределение фосфора. Его содержание изменяется в диапазоне от 255,00 до 1421,00 мг/кг, тогда как в контрольной пробе составляет 705,00 мг/кг. Амплитуда значений указывает на резкую неравномерность обеспеченности территории фосфорсодержащими соединениями. При этом участки с более высокими концентрациями не образуют протяжённых зон, а представлены изолированными участками. С учётом роли фосфора как одного из ключевых элементов питания растений это означает, что потенциал восстановления растительного покрова существенно различается в пределах даже небольших участков территории.

Наиболее сложная структура распределения характерна для соединений азота. Содержание нитритного азота изменяется от 0,49 до 24,04 мг/кг, а нитратного - от 4,00 до 64,00 мг/кг. В ряде точек для нитратного азота фиксируются превышения гигиенического норматива (29,40 мг/кг), достигающие примерно 2,18 ПДК. Аммонийный азот также характеризуется высокой вариабельностью: его содержание изменяется от 98,00 до 795,00 мг/кг. Такая структура распределения указывает на выраженную неоднородность

процессов трансформации органического вещества и минерального азота. Иными словами, территория неоднородна не только по уровню загрязнения, но и по интенсивности протекания биогеохимических процессов.

Сопоставление показателей показывает, что их распределение не совпадает. Участки с повышенным содержанием нефтепродуктов не соответствуют зонам максимальных концентраций фосфора или азота.

Результаты проведённого анализа результатов изысканий подтверждают формирование сложной пространственной структуры распределения компонентов и загрязнителей на территории размещения отходов спиртового производства. Такая неоднородность требует применения методов обследования, обеспечивающих высокое пространственное разрешение наблюдений.

#### **4.4 Апробация системы спектральной диагностики на техногенно трансформированных территориях**

##### **4.4.1 Организация полевых работ**

Апробация разработанной системы оперативной оценки биотопов на основе контактной ближней ИК-спектроскопии выполнена на территории мазутных озёр - объекте накопленного экологического ущерба, характеризующемся сложной пространственной структурой нефтяного загрязнения. Характеристика территории и особенности её техногенного строения приведены в разделе 4.2.

В рамках настоящего исследования грунтовая среда рассматривается как основной диагностируемый компонент техногенно трансформированного биотопа, наиболее полно отражающий процессы накопления и перераспределения загрязняющих веществ.

Целью полевых исследований являлась проверка работоспособности предложенного подхода в условиях реального техногенного объекта, а также оценка возможности получения пространственно детализированной

информации о распределении нефтепродуктов при увеличении плотности наблюдений.

Полевые исследования выполнялись в соответствии с разработанным алгоритмом оперативной оценки биотопов на основе контактной ближней ИК-спектроскопии (таблица 11). В ходе работ последовательно реализованы этапы контактной спектральной съёмки, выбора контрольных точек, лабораторной верификации и построения локальной калибровочной зависимости для условий исследуемой территории.

Работы проводились в составе инженерно-экологических изысканий, предшествующих рекультивации объекта. Это обеспечило возможность сопоставления результатов контактной БИК-спектроскопии с данными лабораторного анализа содержания нефтепродуктов, определённых гравиметрическим методом по ПНД Ф 16.1.2.2.2.3.3.64-10 и использованных в качестве эталонных значений [30].

На первом этапе исследований контактная БИК-спектроскопия применялась непосредственно на поверхности техногенного грунта. Каждая точка спектрального измерения совпадала с местом последующего отбора проб для лабораторного анализа, что обеспечивало сопоставимость результатов.

Перед регистрацией спектров поверхность очищалась от крупных включений и уплотнялась для уменьшения влияния посторонних отражающих элементов. В каждой точке последовательно регистрировалось не менее трёх спектров с последующим усреднением результатов.

Схема размещения точек контактной БИК - съёмки и контрольного отбора проб приведена на рисунке 27. Всего обследовано 54 поверхностные точки, использованных для оценки пространственного распределения нефтяного загрязнения в пределах исследуемой территории.

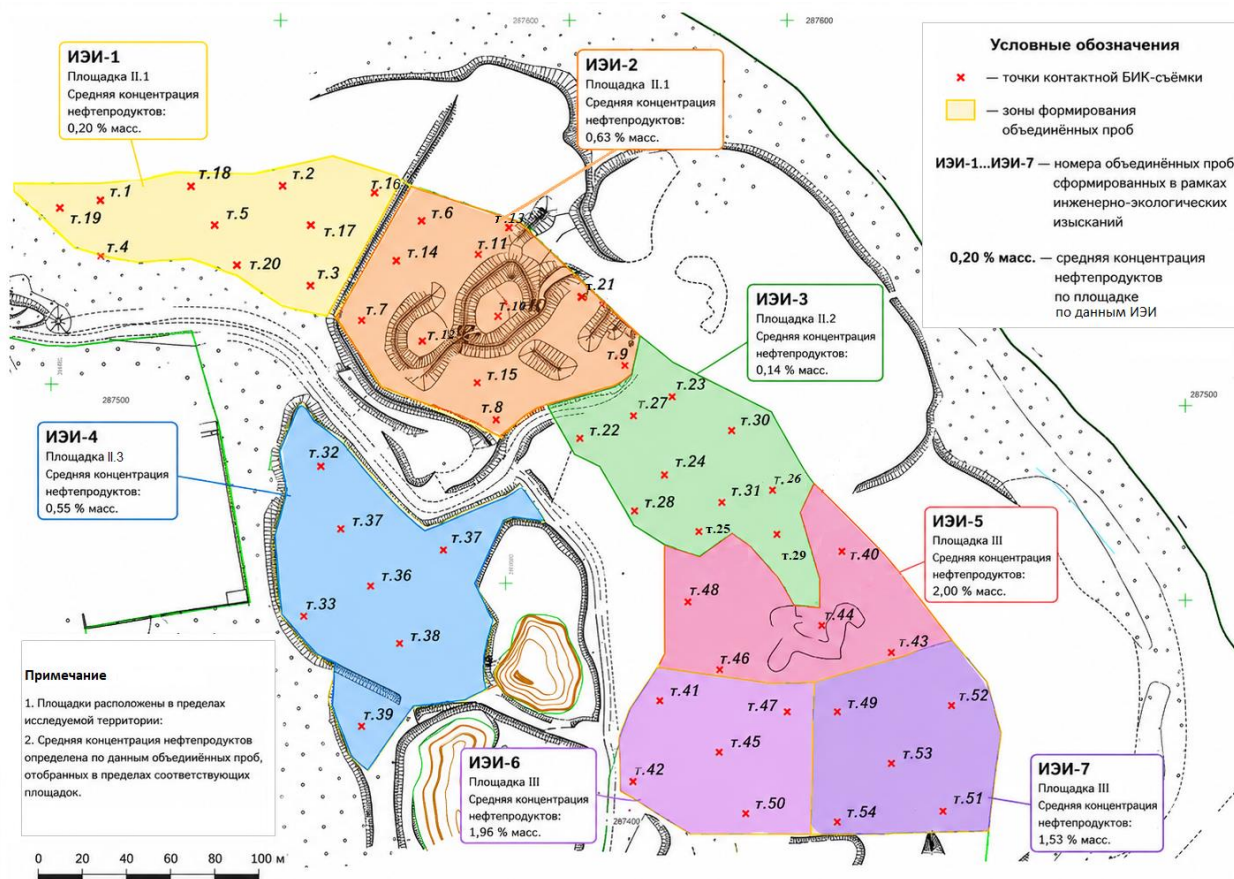


Рисунок 27. Схема размещения точек исследования

На втором этапе исследований в ходе буровых работ выполнена регистрация спектров на глубинных пробах грунта, извлекаемых из скважин с различных глубин. Измерения проводились непосредственно после подъёма грунта на поверхность без предварительной лабораторной подготовки.

Всего обследовано 166 глубинных проб, использованных для оценки изменения спектрального отклика III в пределах грунтового разреза и проверки применимости метода для оперативной диагностики загрязнения по глубине.

#### 4.4.2 Анализ результатов поверхностной контактной БИК - съёмки

Контактная ближняя инфракрасная спектроскопия применялась для оперативной оценки пространственного распределения нефтяного загрязнения в пределах исследуемой территории. Основной задачей данного этапа являлась оценка возможности количественного определения содержания нефтепродуктов непосредственно в полевых условиях, а также анализ

устойчивости спектрального отклика в условиях высокой пространственной неоднородности техногенных грунтов.

Анализ зарегистрированных спектров показал устойчивое изменение формы спектральной кривой в диапазоне 2100-2300 нм при увеличении содержания нефтепродуктов в грунтах. Наиболее выраженные изменения связаны с усилением полос поглощения, обусловленных комбинационными колебаниями С-Н-связей, характерных для углеводородных соединений. Одновременно наблюдалось снижение общей отражательной способности поверхности вследствие увеличения доли поглощающей углеводородной фазы в составе грунта. Полученные закономерности соответствуют результатам, ранее установленным при исследовании модельных образцов, рассмотренных в главе 3.

Для количественной интерпретации спектральных данных использован индекс  $ND'$ . Калибровочная зависимость между значением индекса и содержанием нефтепродуктов построена по двум реперным точкам, соответствующим минимальному и максимальному значениям лабораторно определённой концентрации в массиве поверхностных измерений. Полученная зависимость использовалась для расчёта содержания нефтепродуктов в остальных точках контактной БИК - съёмки (рисунок 28).

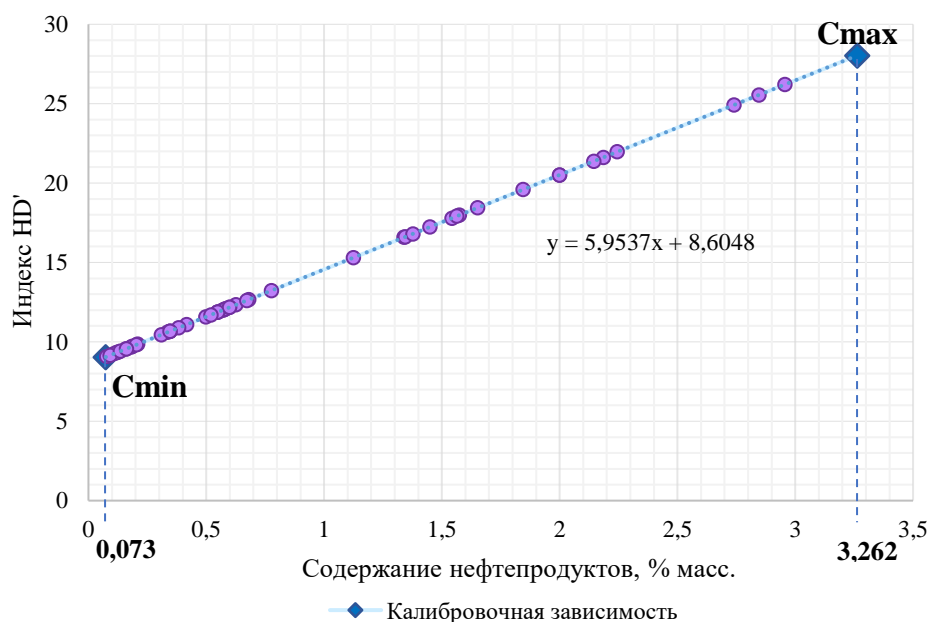


Рисунок 28. Калибровочная зависимость между значением индекса  $ND'$  и содержанием нефтепродуктов

Сопоставление результатов контактной БИК-спектроскопии с данными лабораторного анализа показало наличие устойчивой количественной связи между значениями индекса HD' и фактическим содержанием нефтепродуктов в грунтах.

Для оценки точности метода выполнен анализ распределения относительных погрешностей по различным диапазонам концентраций нефтепродуктов (таблица 17). Выделение диапазонов осуществлялось эмпирически на основании характера изменения индекса HD' и распределения ошибок расчётных значений. Границы интервалов соответствуют областям низкой, средней и высокой чувствительности спектрального отклика в исследуемом диапазоне.

Таблица 17

**Средние значения относительной погрешности по диапазонам концентраций**

Рабочий диапазон, % масс	Число измерений	Средняя относительная погрешность, %
От 0,073 до 0,3	13	24,25
От 0,3 до 1,0	22	15,59
От 1,0 до 3,26	19	9,30

Полученные результаты показали, что наибольшая согласованность спектральных и лабораторных определений достигается при средних и высоких концентрациях нефтепродуктов. В диапазоне концентраций свыше 1% масс. средняя относительная погрешность составила 9,3%. В данных условиях диагностическая полоса поглощения выражена наиболее отчётливо, что обеспечивает устойчивую регистрацию спектрального отклика и снижает влияние минеральной матрицы грунта.

При низких концентрациях нефтепродуктов наблюдалось увеличение относительных погрешностей. Для диапазона менее 0,3% масс. средняя относительная погрешность достигала 24,25%. Увеличение погрешности обусловлено снижением контрастности диагностической полосы поглощения, а также усилением влияния гранулометрического состава, влажности и

локальной неоднородности техногенных грунтов на параметры регистрируемого спектра отражения.

Для количественной оценки метрологической сопоставимости контактной БИК-спектроскопии и лабораторного анализа выполнен расчёт статистических характеристик расхождений между соответствующими парами значений концентраций нефтепродуктов по всему массиву поверхностных измерений (таблица 18). Подробные результаты сопоставления спектральных и лабораторных данных по поверхностным точкам приведены в приложении 3.

*Таблица 18*

**Статистические характеристики расхождений между результатами контактной БИК-спектроскопии и лабораторного анализа**

Показатель	Значение
Систематическое смещение, % масс.	0,033
Стандартное отклонение ошибок, % масс.	0,149
Дисперсия ошибок, % масс.	0,0222
Среднеквадратичная ошибка (RMSE), % масс.	0,151

Расчёт статистических характеристик показал отсутствие выраженного систематического смещения между результатами спектральных и лабораторных определений. Значение систематического смещения составило 0,033% масс., что свидетельствует об отсутствии устойчивого завышения или занижения расчётных концентраций относительно лабораторных данных. Полученное значение среднеквадратичной ошибки RMSE сопоставимо с величиной разброса значений в области низких концентраций нефтепродуктов, что может быть связано со случайным характером расхождений, обусловленных пространственной неоднородностью исследуемых грунтов.

Таким образом, результаты полевой поверхностной контактной БИК - съёмки подтвердили работоспособность разработанного подхода в условиях пространственно неоднородной техногенно нарушенной территории. Применение контактной ближней ИК-спектроскопии обеспечивает получение

количественно сопоставимых с лабораторным анализом результатов при многократно большей плотности точек наблюдений. Данный подход позволяет детализировать пространственную структуру загрязнения, локализовать участки максимального накопления нефтепродуктов и повысить оперативность инженерно-экологических обследований. Это обеспечит дифференцированный подход к рекультивации различных участков нарушенных биотопов.

#### **4.4.3 Анализ вертикального распределения нефтяного загрязнения по данным глубинной контактной БИК - съёмки**

Результаты глубинной контактной БИК - съёмки позволили оценить изменение нефтяного загрязнения в пределах грунтового разреза и выявить интервалы накопления нефтесодержащих компонентов. В отличие от поверхностной съёмки, где основное значение имело пространственное распределение загрязнения по площади, анализ глубинных проб был направлен на характеристику вертикальной неоднородности техногенной толщи.

Значения лабораторно определённого содержания нефтепродуктов в глубинных пробах изменялись от 0,107 до 5,518% масс. Соответствующие значения индекса HD' находились в диапазоне от 8,94 до 38,17. Расширение диапазона концентраций по сравнению с поверхностными пробами указывает на наличие в разрезе локальных интервалов с более интенсивным накоплением нефтесодержащих компонентов.

Наиболее высокие концентрации нефтепродуктов установлены в отдельных горизонтах скважин, где содержание загрязняющих компонентов превышало 5% масс. Данные зоны характеризовались резким увеличением значений индекса HD', соответствующим мазутонасыщенным грунтам. Формирование локальных максимумов содержания нефтепродуктов указывает на неравномерный характер миграции и накопления нефтесодержащих компонентов в пределах техногенного массива.

При этом значительная часть глубинных проб характеризовалась низкими и умеренными концентрациями нефтепродуктов. Чередование слабозагрязнённых и высокозагрязнённых горизонтов свидетельствует об отсутствии сплошного фронта загрязнения по разрезу. Загрязнение имеет дискретный характер и связано с отдельными прослоями, зонами техногенного перемещения и участками локальной аккумуляции нефтесодержащих компонентов.

Для оценки согласованности спектральных и лабораторных результатов выполнен расчёт статистических характеристик расхождений по массиву глубинных проб (таблица 19). Данные по глубинным пробам приведены в приложении 4.

Таблица 19

**Статистические характеристики расхождений между результатами глубинной контактной БИК-спектроскопии и лабораторного анализа**

Показатель	Значение
Систематическое смещение, % масс.	0,095
Стандартное отклонение ошибок, % масс.	0,082
Дисперсия ошибок, % масс.	0,0068
Среднеквадратичная ошибка (RMSE), % масс.	0,126

Полученные статистические характеристики указывают на отсутствие выраженного систематического расхождения между расчётными и лабораторными значениями. Систематическое смещение составило 0,095% масс., что значительно ниже диапазона изменения концентраций нефтепродуктов в глубинных пробах. Значение RMSE, равное 0,126% масс., характеризует величину среднеквадратичного расхождения между результатами спектрального и лабораторного определения и свидетельствует о воспроизводимости основных закономерностей изменения загрязнения по глубине.

Для оценки характера вертикального распределения загрязнения и сопоставления результатов контактной БИК-спектроскопии с данными лабораторного анализа на рисунке 29 представлены профили изменения

содержания нефтепродуктов по глубине для характерных скважин. В качестве характерных были выбраны скважины, демонстрирующие различные особенности вертикального распределения нефтяного загрязнения в пределах исследуемого техногенного массива.

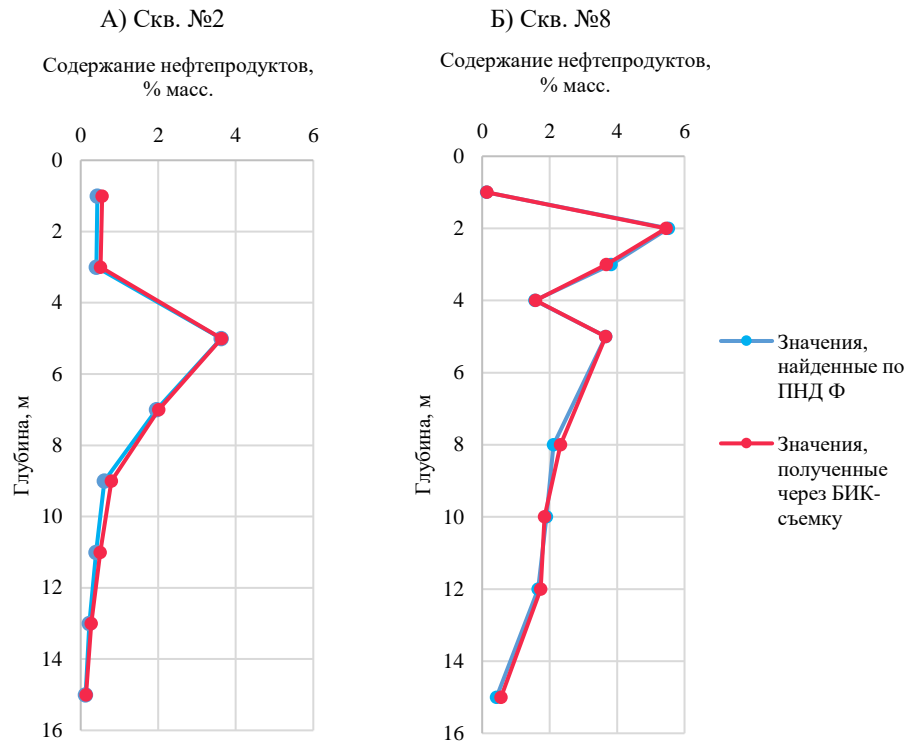


Рисунок 29. Вертикальные профили распределения нефтепродуктов по данным лабораторного анализа и контактной БИК-спектроскопии для характерных скважин

Представленные вертикальные профили позволяют оценить не только степень метрологической сопоставимости результатов контактной БИК-спектроскопии и лабораторного анализа, но и пространственные особенности распределения загрязнения по глубине. В скважине №2 наблюдается локальный максимум содержания нефтепродуктов в средней части разреза с последующим снижением концентраций на нижележащих уровнях. Скважина №8 характеризуется более контрастным распределением загрязнения с резкими изменениями концентраций между соседними горизонтами, что отражает выраженную вертикальную неоднородность техногенной толщи.

Расчётные значения, полученные по данным контактной БИК-спектроскопии, воспроизводят основные закономерности изменения

содержания нефтепродуктов по глубине и позволяют уверенно выделять наиболее загрязнённые горизонты. Наиболее высокая согласованность расчётных и лабораторных значений наблюдается в областях высоких концентраций нефтепродуктов, где диагностический спектральный отклик выражен наиболее отчётливо.

Таким образом, результаты глубинной контактной БИК - съёмки показали, что нефтяное загрязнение в пределах исследуемого техногенного массива распределено неравномерно и имеет выраженную вертикальную дискретность. Наиболее значимым результатом данного этапа является подтверждение возможности оперативного выявления локальных интервалов накопления нефтесодержащих компонентов по разрезу скважин. Это подтверждает применимость разработанного подхода для экспресс-диагностики глубинной структуры загрязнения при инженерно-экологических обследованиях.

#### **4.4.4 Сопоставление контактной БИК - съёмки с традиционным объединённым пробоотбором**

Для проверки выводов теоретического моделирования, представленного в разделе 4.1, выполнено сопоставление результатов традиционного объединённого пробоотбора и контактной БИК - съёмки, выполненной с высокой плотностью наблюдений.

Для сопоставления эффективности двух подходов выполнен анализ средних значений содержания нефтепродуктов, полученных по данным объединённого пробоотбора и по результатам контактной БИК - съёмки (таблица 20).

Сопоставление результатов показало, что наиболее существенные различия между традиционным объединённым пробоотбором и контактной БИК-съёмкой проявляются на участках с выраженной пространственной неоднородностью нефтяного загрязнения.

**Сравнение оценок среднего содержания нефтепродуктов при  
объединённом пробоотборе и контактной БИК-съёмке**

Площадка	Число объединённых проб для ИЭИ	Число точек контактной съёмки	Средняя фактическая концентрация по участку, % масс.	
			Традиционный отбор	Контактная съёмка
II.1	2	21	0,41	0,64
II.2	1	10	0,14	0,42
II.3	1	8	0,55	0,52
III	3	15	1,86	1,92

Выявленные различия обусловлены особенностями пространственной структуры загрязнения исследуемой территории. При ограниченном количестве точек наблюдений объединённые пробы преимущественно отражают интегральное, усреднённое состояние участка, вследствие чего локальные зоны с более высоким содержанием нефтепродуктов оказываются сглаженными или не фиксируются вовсе. В условиях мозаичного распределения загрязняющих веществ подобное усреднение приводит к снижению чувствительности обследования к локальным аномалиям и формированию неполного представления о реальной структуре загрязнения.

Для площадок II.3 и III расхождения между результатами двух подходов существенно менее выражены. Вероятно, данный факт связан с тем, что нефтепродукты распределены более равномерно в пределах данных участков. Также, результаты подтверждают, что влияние плотности сетки наблюдений на итоговую оценку содержания компонентов более четко проявляется именно в условиях высокой пространственной неоднородности геосреды.

Экспериментальные результаты полевых исследований подтверждают выводы теоретического моделирования, представленного в разделе 4.1.

Таким образом, контактная ближняя ИК-спектроскопия благодаря высокой оперативности измерений и возможности проведения массовой съёмки обеспечивает более полное воспроизведение пространственной

структуры нефтяного загрязнения по сравнению с традиционным объединённым пробоотбором.

#### 4.5 Выводы по главе 4

1. Выполненное теоретическое моделирование показало, что при обследовании техногенно трансформированных территорий достоверность оценки состояния геосреды в значительной степени определяется соответствием плотности наблюдений масштабу пространственной неоднородности загрязнения. В условиях мозаичного распределения загрязняющих веществ при ограниченной плотности наблюдений возрастает вероятность сглаживания локальных аномалий и недоучёта участков максимального загрязнения.

2. Анализ материалов инженерно-экологических обследований крупных техногенных объектов подтвердил наличие выраженной пространственной и временной неоднородности распределения загрязняющих веществ в грунтовой среде. Показано, что при дискретном характере наблюдений формируется фрагментарное представление о состоянии территории, затрудняющее локализацию зон загрязнения и интерпретацию процессов перераспределения загрязняющих компонентов.

3. Практическая апробация разработанной системы оперативной оценки на территории мазутных озёр показала возможность применения контактной ближней ИК-спектроскопии для экспресс-диагностики нефтяного загрязнения непосредственно в полевых условиях без предварительной пробоподготовки образцов. Установлено наличие устойчивой количественной связи между значениями спектрального индекса  $ND'$  и содержанием нефтепродуктов в техногенных грунтах.

4. Результаты поверхностной и глубинной контактной БИК - съёмки подтвердили возможность воспроизведения пространственных и вертикальных закономерностей распределения нефтепродуктов в пределах техногенного массива. Наиболее высокая согласованность спектральных и

лабораторных данных установлена в диапазонах повышенных концентраций нефтепродуктов, где диагностический спектральный отклик выражен наиболее отчётливо.

5. Сопоставление контактной БИК - съёмки с традиционным объединённым пробоотбором показало, что увеличение плотности наблюдений обеспечивает более полное выявление локальных зон накопления нефтесодержащих компонентов и позволяет детализировать пространственную структуру загрязнения. Выявление участков максимального накопления нефтепродуктов рассматривается как основа для последующей идентификации потенциальных источников эмиссии загрязняющих веществ и уточнения границ зон их влияния.

6. Полученные результаты подтверждают применимость разработанного метода контактной ближней ИК-спектроскопии для оперативной диагностики состояния техногенно трансформированных биотопов при инженерно-экологических обследованиях и рекультивации загрязнённых территорий.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Проведён анализ научных и нормативно-методических подходов к диагностике техногенно трансформированных территорий. Установлено, что традиционные инженерно-экологические обследования, основанные на дискретном пробоотборе и лабораторном анализе, ограничены при выявлении мозаичных зон загрязнения биотопов, поэтому для повышения пространственной детализированности обосновано применение контактной БИК-спектроскопии.

2. Сформирована репрезентативная экспериментальная база натуральных и модельных образцов почвогрунтов, различающихся по гранулометрическому составу, содержанию органического вещества, влажности и уровню нефтяного загрязнения. В рамках исследования были подготовлены 216 модельных образцов с различными сочетаниями типа почвы, вида нефтепродукта и уровня загрязнения, а также 3 фоновых контрольных образца. Дополнительно выполнен анализ 83 натуральных образцов почвенно-грунтовых матриц с определением агрохимических и физико-химических показателей.

3. В результате анализа спектральных данных и лабораторных определений показано, что оценка агрохимических характеристик методом БИК-спектроскопии является косвенной и значительно обусловлена влиянием органоминеральной матрицы грунтов на спектральный отклик. Для нефтезагрязнённых образцов подтверждена возможность определения диагностических областей, связанных с колебаниями С-Н-связей углеводородов, методом контактной БИК-спектроскопии.

4. Разработаны методические подходы к обработке спектральных данных, включающие предобработку спектров (SNV) и применение методов многомерного анализа PCA и PLS. Установлена корреляция между спектрами и физико-химическими показателями грунтов. Модели оценки содержания натрия, фосфора, калия, влажности и зольности показали высокую точность

( $R^2 \geq 0,75$ ,  $RPD \geq 1,83$ ), что подтверждает их эффективность для количественной оценки состояния геосреды биотопов.

5. Сформирована система спектральных индексов агрохимического состояния и нефтяного загрязнения почвогрунтов. Установлено, что индекс  $K_1$  (610 и 670 нм) коррелирует с содержанием фосфора ( $r = 0,94$ ), а индекс  $K_6$  (820 и 925 нм) - с содержанием натрия ( $r = 0,90$ ). Однофакторные модели на основе указанных индексов обеспечили количественную оценку содержания фосфора с  $R^2 = 0,88$  и  $RMSE = 153,66$  мг/кг, а содержания натрия - с  $R^2 = 0,78$  и  $RMSE = 609,36$  мг/кг. Для количественной оценки нефтяного загрязнения разработан модифицированный спектральный индекс  $HD'$ , обеспечивающий определение содержания нефтепродуктов в диапазоне 0-30% масс. с высокой точностью (диапазон 0-10 % масс.:  $R^2$  валидации  $\geq 0,982$ ,  $RMSE \leq 0,51$  % масс., диапазон 10-30 % масс.:  $R^2$  валидации  $\geq 0,917$ ,  $RMSE \leq 2,00$  % масс.) и устойчивостью к вариациям свойств почвенной матрицы.

6. Проведена экспериментальная апробация разработанного метода на реальных объектах Самарской области. Установлено, что данный подход обеспечивает возможность оперативной идентификации зон загрязнения непосредственно в процессе обследования территории. Систематическое смещение между результатами лабораторного анализа и контактной БИК-спектроскопии не превышало 0,095% масс., а среднеквадратичная ошибка – 0,151% масс. Полученные результаты подтверждают перспективность применения разработанного подхода при инженерно-экологических изысканиях, экологическом мониторинге и контроле рекультивационных мероприятий.

## СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

### Сокращения

- CI (Carbonate Index) - карбонатный индекс
- FAO (Food and Agriculture Organization) - Продовольственная и сельскохозяйственная организация ООН
- HD (Hydrocarbon Detection Index) - индекс обнаружения углеводородов
- HI (Hydrocarbon Index) - углеводородный индекс
- ISO (International Organization for Standardization) - Международная организация по стандартизации
- MIR (Mid Infrared) - средний инфракрасный диапазон
- MSC (Multiplicative Scatter Correction) - мультипликативная коррекция рассеяния
- MSI (Moisture Stress Index) - индекс влажностного состояния
- NDCI (Normalized Difference Clay Index) - индекс содержания глинистых минералов
- NDWI (Normalized Difference Water Index) - нормализованный индекс влажности
- NIR (Near Infrared) - ближний инфракрасный диапазон
- PCA (Principal Component Analysis) - метод главных компонент
- PLS (Partial Least Squares Regression) – метод регрессии на частичных наименьших квадратах
- Random Forest - метод случайного леса
- RMSE (Root Mean Square Error) - среднеквадратическая ошибка
- RPD (Residual Predictive Deviation) - показатель прогностической способности модели
- SNV (Standard Normal Variate) - стандартное нормальное преобразование
- SVM (Support Vector Machine) - метод опорных векторов
- SWIR (Short-Wave Infrared) - коротковолновый инфракрасный диапазон

vis-NIR (visible-near infrared) - видимый и ближний инфракрасный диапазоны

БИК - ближний инфракрасный диапазон

ГОСТ - государственный стандарт

ИК – инфракрасный диапазон

ИЭИ – инженерно-экологические изыскания

МУ - методические указания

ПДК - предельно допустимая концентрация

ПНД Ф - природоохранный нормативный документ

РД - руководящий документ

СанПиН - санитарные правила и нормы

СП - свод правил

#### **Условные обозначения**

A - коэффициент спектрального поглощения

C - содержание органического углерода

K - содержание калия

Na - содержание натрия

NO<sub>2</sub> - содержание нитритного азота

NO<sub>3</sub> - содержание нитратного азота

P - содержание фосфора

R - коэффициент спектрального отражения

R<sup>2</sup> - коэффициент детерминации

r - коэффициент корреляции Пирсона

S - содержание серы

A - зольность

W - влажность

$\lambda$  - длина волны, нм

Zc - суммарный показатель загрязнения

pH - показатель кислотности среды

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ЛИТЕРАТУРНЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. СанПиН 1.2.3685-21. Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания: офиц. текст: - М.: Роспотребнадзор, 2021. – 712 с.
2. СанПиН 2.1.3684-21. Санитарно-эпидемиологические требования к содержанию территорий городских и сельских поселений, к водным объектам, питьевой воде и питьевому водоснабжению населения, атмосферному воздуху, почвам, жилым помещениям, эксплуатации производственных, общественных помещений, организации и проведению санитарно-противоэпидемических (профилактических) мероприятий: офиц. текст: - М.: Роспотребнадзор, 2021. – 100 с.
3. СП 47.13330.2016. Инженерные изыскания для строительства. Основные положения. – М.: Минстрой России, 2016. - 90 с.
4. СП 502.1325800.2021. Инженерно-экологические изыскания для строительства. Общие правила производства работ. - М.: Минстрой России, 2021. – 147 с.
5. ГОСТ 9972-2020. Масла нефтяные турбинные с присадками. Технические условия. - М.: Стандартиформ, 2021. - 16 с.
6. ГОСТ 17.5.3.05-84. Охрана природы. Рекультивация земель. Общие требования к землеванию. - М: Изд-во стандартов, 1985. - 4 с.
7. ГОСТ 17.5.3.06-85. Охрана природы. Земли. Требования к определению норм снятия плодородного слоя почвы при производстве земляных работ. - М.: Изд-во стандартов, 1985. - 4 с.
8. ГОСТ Р 58596-2019. Почвы. Методы определения общего азота. – М.: Стандартиформ, 2019. - 12 с.
9. ГОСТ 26261-84. Почвы. Метод определения валового фосфора. - М.: Изд-во стандартов, 1985. - 13 с.
10. ГОСТ 26427-85. Почвы. Метод определения натрия и калия в водной вытяжке. - М.: Изд-во стандартов, 1985. - 4 с.

11. ГОСТ 27784-88. Почвы. Метод определения зольности. - М.: Изд-во стандартов, 1988. - 7 с.
12. ГОСТ 28268-89. Почвы. Методы определения влажности, максимальной гигроскопической влажности и влажности устойчивого завядания растений. - М.: Изд-во стандартов, 1989. - 8 с.
13. ГОСТ 26205-91. Почвы. Определение подвижных соединений фосфора и калия по методу Мачигина в модификации ЦИНАО. - М.: Изд-во стандартов, 1992. - 10 с.
14. ГОСТ Р 54650-2011. Почвы. Определение подвижных соединений фосфора и калия по методу Кирсанова в модификации ЦИНАО. - М.: Стандартиформ, 2013. - 12 с.
15. ГОСТ 26213-2021. Почвы. Методы определения органического вещества. - М.: Стандартиформ, 2021. - 13 с.
16. ГОСТ ISO 5725-1-2002. Точность (правильность и прецизионность) методов и результатов измерений. Часть 1. Основные положения и определения. - М.: Изд-во стандартов, 2002. - 32 с.
17. ГОСТ Р 54039-2010. Качество почв. Экспресс-метод спектроскопии в ближней инфракрасной области для определения содержания нефтепродуктов. - М.: Стандартиформ, 2011. - 8 с.
18. ГОСТ Р 8.736-2011. Государственная система обеспечения единства измерений. Измерения прямые многократные. Методы обработки результатов измерений. Основные положения. - М.: Стандартиформ, 2013. - 25 с.
19. ГОСТ Р 57447-2017. Наилучшие доступные технологии. Рекультивация нарушенных земель и земельных участков, загрязненных нефтью и нефтепродуктами. Основные положения. – М.: Стандартиформ, 2017. - 33 с.
20. ГОСТ 17.4.3.01-2017. Охрана природы. Почвы. Общие требования к отбору проб. - М.: Стандартиформ, 2018. - 12 с.

21. ГОСТ 17.4.4.02-2017. Охрана природы. Почвы. Методы отбора и подготовки проб для химического, бактериологического, гельминтологического анализа. - М.: Стандартинформ, 2018. - 16 с.
22. ГОСТ Р 58595-2019. Почвы. Отбор проб. - М.: Стандартинформ, 2019. - 9 с.
23. ГОСТ Р 59057-2020. Охрана окружающей среды. Земли. Общие требования по рекультивации нарушенных земель. - М.: Стандартинформ, 2020. - 24 с.
24. РД 52.18.575-2023. Массовая доля нефтепродуктов в пробах почв и грунтов. Методика измерений методом инфракрасной спектроскопии. – Обнинск: Министерством природных ресурсов и экологии Российской Федерации, 2023. - 32 с.
25. РД 52.18.718-2008. Организация и порядок проведения наблюдений за загрязнением почв токсикантами промышленного происхождения. – Обнинск: Росгидромет, 2008. - 77 с.
26. МУ 2.1.7.730-99. Гигиеническая оценка качества почвы населённых мест: методические указания. - М.: Минздрав России, 1999.
27. ПНД Ф 16.1:2:2.2:3.37-2002. Количественный химический анализ почв. Методика измерений валового содержания серы в почвах, грунтах, донных отложениях и отходах турбидиметрическим методом. - М.: ФБУ «ФЦАО», 2011. – 18 с.
28. ПНД Ф 16.1.40-03. Методика выполнения измерений содержания кадмия, свинца, меди и цинка в почве методом инверсионной вольтамперометрии». - Спб: НПП «Буревестник», 2004. - 41 с.
29. ПНД Ф 16.1:2:2.2:3.51-08. Количественный химический анализ почв. Методика выполнения измерений массовой доли нитритного азота в почвах, грунтах, донных отложениях, илах, отходах производства и потребления фотометрическим методом с реактивом Грисса. - М.: ФБУ «ФЦАО», 2008. – 22 с.

30. ПНД Ф 16.1:2:2.2:2.3.64-10. Количественный химический анализ почв. Методика измерений массовой доли нефтепродуктов в пробах почв, грунтов, донных отложений, илов, осадков сточных вод, отходов производства и потребления гравиметрическим методом. - М.: ФБУ «ФЦАО», 2010. – 18 с.

31. ПНД Ф 16.1:2:2.2:3.67-10. Количественный химический анализ почв. Методика измерений массовой доли азота нитратов в пробах почв, грунтов, донных отложений, илов, отходов производства и потребления фотометрическим методом с салициловой кислотой. - М.: ФБУ «ФЦАО», 2010. – 22 с.

32. Алексеенко В. А. Геохимия окружающей среды: учеб. пособие для вузов/ В. А. Алексеенко, С. А. Бузмаков, М. С. Панин. - Пермь: Пермский государственный национальный исследовательский университет, 2013. - 359 с. - ISBN 978-5-7944-2113-2.

33. Бердникова, Т. В. Разработка техники индексирования при прямом спектральном зондировании почв для целей мониторинга/ Т. В. Бердникова, А. А. Бран, В. В. Ермаков// Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе. - 2023. - № 5(314). - С. 10–18.

34. Бердникова, Т. В. Разработка методики дистанционного спектрального зондирования техногенно нагруженных территорий/ Т. В. Бердникова, В. В. Ермаков// Безопасность техногенных и природных систем. - 2021. - № 3. - С. 55–63.

35. Бигон, М. Экология: особи, популяции и сообщества: в 2 т. Т. 1. / М. Бигон, Дж. Харпер, К. Таунсенд, пер. с англ. В. Н. Михеева, М. А. Снеткова, под ред. А. М. Гилярова. - Москва: Мир, 1989. - 667 с. - ISBN 5-03-001433-3.

36. Бузмаков, С. А. Геоэкологические закономерности техногенной трансформации наземных экосистем под воздействием эксплуатации месторождений нефти: дис. ... д-ра геогр. наук: 25.00.36/ Бузмаков Сергей Алексеевич. - Пермь, 2005. - 405 с.

37. Бузмаков, С. А. Экспериментальное определение основных фаз техногенной трансформации экосистемы/ С. А. Бузмаков// Вестник Пермского университета. Серия: Биология. - 2004. - № 2. - С. 133–138.

38. Быкова М. В. Термодесорбционная очистка почв от углеводородов на предприятиях минерально-сырьевого комплекса: дис. ... канд. тех. наук: 25.00.36/ Быкова Марина Валерьевна. - Санкт-Петербург, 2022. - 179 с.

39. Гаврилов, В. Л. О необходимости комплексной геоэкологической оценки техногенно нарушенных горными работами земель/ В. Л. Гаврилов, Н. А. Немова, А. В. Резник, Н. С. Косарев, А. А. Колесников// Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. - 2023. - Т. 334, № 10. - С. 76–87. - DOI: 10.18799/24131830/2023/10/4212.

40. Галанина, Т. В. Экологические последствия при различных классах техногенных воздействий/ Т. В. Галанина// Горный информационно-аналитический бюллетень. - 2009. - № S7. - С. 174–177.

41. Геннадиев, А. Н. Углеводороды в почвах: происхождение, состав, поведение (обзор)/ А. Н. Геннадиев, Ю. И. Пиковский, А. С. Цибарт, М. А. Смирнова// Почвоведение. - 2015. - № 10. - С. 1195–1209. - DOI: 10.7868/S0032180X15100020.

42. Герасимова, М. И. Антропогенные почвы: генезис, география, рекультивация: учебное пособие/ М. И. Герасимова, М. Н. Строганова, Н. В. Можарова, Т. В. Прокофьева, под ред. Г. В. Добровольского. - Москва: Ойкумена, 2003. - 268 с. - ISBN 5-93520-011-7.

43. Глазовская, М. А. Геохимия природных и техногенных ландшафтов СССР: учебное пособие для университетов по специальности «География»/ М. А. Глазовская. - Москва: Высшая школа, 1988. - 327 с. - ISBN 5-06-001144-5.

44. Горбунова, Н. А. Экологическая оценка объектов окружающей среды при проведении инженерно-экологических изысканий/ Н. А. Горбунова, А. А. Федосенко, М. С. Абу-Хасан// Известия Петербургского университета

путей сообщения. - 2023. - Т. 20, № 2. - С. 441–447. - DOI: 10.20295/1815-588X-2023-2-441-447.

45. Гусев, А. П. Оценка состояния и динамики геологической среды техногенно нагруженных территорий (на примере Гомельской области)/ А. П. Гусев// Российский журнал прикладной экологии. - 2025. - № 3. - С. 4–10. - DOI: 10.24852/2411-7374.2025.3.04.10.

46. Добровольский, Г. В. Экология почв. Учение об экологических функциях почв: учебник/ Г. В. Добровольский, Е. Д. Никитин. - 2-е изд., уточн. и доп. - Москва: Издательство Московского университета, 2012. - 412 с. - ISBN 978-5-211-06211-5.

47. Ермаков, В. В. Оптические многоуровневые мультисенсорные системы экологического мониторинга нефтезагрязнённых участков/ В. В. Ермаков// Известия Самарского научного центра Российской академии наук. - 2023. - Т. 25, № 6(116). - С. 203–207.

48. Иванов, А. Л. Спектральные методы оценки свойств почв/ А. Л. Иванов, И. Ю. Савин// Агрехимия. - 2015. - № 8. - С. 83–96.

49. Иванченко Г. Н. Ранжирование равнинного ландшафта по степени техногенных изменений/ Г. Н. Иванченко, Э. М. Горбунова, С. М. Петухова// Геофизические процессы и биосфера. - 2025. - Т. 24, № 2. - С. 100-118. - DOI: 10.21455/GPB2025.2-7.

50. Израэль, Ю. А. Экология и контроль состояния природной среды/ Ю. А. Израэль. - 2-е изд., доп. - Ленинград: Гидрометеиздат, 1984. - 560 с.

51. Илгашева, Е. О. К методике изучения вещественного состава поверхностных отложений урбанизированных территорий с целью оценки их экологического состояния/ Е. О. Илгашева// Известия Уральского государственного горного университета. - 2025. - № 2(78). - С. 64–70. - DOI: 10.21440/2307-2091-2025-2-64-70.

52. Каманина, И. З. Анализ пространственно-временной картины полей химического загрязнения почв как базового компонента городских экосистем/ И. З. Каманина, С. П. Каплина, А. В. Любимова// Вестник

Российского университета дружбы народов. Серия: Экология и безопасность жизнедеятельности. - 2023. - Т. 31, № 3. - С. 359–367. - DOI: 10.22363/2313-2310-2023-31-3-359-367.

53. Канищев, С. Н. Ближняя инфракрасная спектроскопия в задачах почвенной диагностики/ С. Н. Канищев, И. Ю. Савин// Почвоведение. - 2012. - № 9. - С. 1093–1102.

54. Касимов, Н. С. Геохимия ландшафтов Восточной Москвы: монография/ Н. С. Касимов, В. В. Власов, Н. Е. Кошелева, Е. М. Никифорова. - Москва: АПР, 2016. - 276 с. - ISBN 978-5-904761-62-2.

55. Копылов, И. С. Геологические факторы формирования геоэкологических условий/ И. С. Копылов// Исследования в области естественных наук. - 2015. - № 6(42). - С. 35–43.

56. Королева, П. В. Мультивременные спектральные характеристики открытой поверхности почвы и картографирование содержания органического вещества пахотных горизонтов/ П. В. Королева, Д. И. Рухович, Д. Г. Борщев, А. Д. Рухович// Аридные экосистемы. - 2025. - Т. 31, № 2(103). - С. 20–32. - DOI: 10.24412/1993-3916-2025-2-20-32.

57. Корректировка проектно-сметной документации проекта «Рекультивация территории бывшего ОАО «Средневолжский завод химикатов» (г. о. Чапаевск) с вовлечением 1 этапа работ «Изоляция источника химической опасности - шламоотстойника Ш2»: технический отчет по результатам инженерно-экологических изысканий для подготовки проектной и рабочей документации. Т. 3. - Самара, 2021. - 69 с.

58. Лукашов, С. В. Анализ состояния почвогрунтов урбанизированной территории как элемент инженерно-экологических изысканий/ С. В. Лукашов, О. А. Иванченкова// Успехи современного естествознания. - 2020. - № 5. - С. 56–62. - DOI: 10.17513/use.37392.

59. Марцев, А. А. Загрязнение почв города с машиностроительным производством тяжёлыми металлами и мышьяком и эпидемиологический риск для здоровья населения/ А. А. Марцев, О. Г. Селиванов, Ю. Н. Курбатов, Т. А.

Трифонов// Гигиена и санитария. - 2024. - Т. 103, № 3. - С. 208–215. - DOI: 10.47470/0016-9900-2024-103-3-208-215.

60. Национальное объединение изыскателей и проектировщиков (НОПРИЗ). Анализ текущего состояния инженерных изысканий в Российской Федерации. Первая редакция проекта дорожной карты развития инженерных изысканий в Российской Федерации до 2030 года с прогнозом до 2035 года. - Москва, 2025. - 297 с.

61. Неведров, Н. П. Тяжёлые металлы в почвах города: загрязнение и ремедиация/ Н. П. Неведров, Е. П. Проценко, И. П. Балабина, М. Ю. Фомина, под ред. Б. И. Кочурова. - Москва: Русайнс, 2017. - 113 с. - ISBN 978-5-4365-2175-6.

62. Новикова, Ю. А. Химическое загрязнение почвы городов Российской Арктики/ Ю. А. Новикова, О. И. Копытенкова, О. С. Алентьева// Российская Арктика. - 2025. - Т. 7, № 3. - С. 35–44. - DOI: 10.24412/2658-4255-2025-3-35-44.

63. Новых, Е. А. Проблемы инженерно-экологических изысканий: почвенные аспекты/ Е. А. Новых, И. В. Волошенко, Л. Л. Новых// Региональные геосистемы. - 2021. - Т. 45, № 2. - С. 246–257. - DOI: 10.52575/2712-7443-2021-45-2-246-257.

64. Огородникова, Е. Н. Насыпные грунты Москвы/ Е. Н. Огородникова, С. К. Николаева, Н. В. Абакумова// Актуальные проблемы экологии и природопользования: сборник научных трудов. - Москва: Российский университет дружбы народов, 2019. - С. 310–314.

65. Одум, Ю. Экология: в 2 т. Т. 1/ Ю. Одум, пер. с англ. Ю. М. Фролова, под ред. В. Е. Соколова. - Москва: Мир, 1986. - 328 с.

66. Орлов, Д. С. Экология и охрана биосферы при химическом загрязнении: учебное пособие для химических, химико-технологических и биологических специальностей и направлений вузов/ Д. С. Орлов, Л. К. Садовникова, И. Н. Лозановская. - 2-е изд., перераб. и доп. - Москва: Высшая школа, 2002. - 333 с. - ISBN 5-06-004031-3.

67. Осипов, В. И. Техногенез и современные задачи наук о Земле/ В. И. Осипов// Экология и промышленность России. - 2016. - Т. 20, № 3. - С. 4–12. - DOI: 10.18412/1816-0395-2016-3-4-12.
68. Панин, М. С. Эколого-биогеохимическая оценка техногенных ландшафтов Восточного Казахстана/ М. С. Панин, отв. ред. Ж. У. Аханов. - Алматы: Эверо, 2000. - 338 с. - ISBN 9965-9074-5-5.
69. Пашкевич, М. А. Исследование возможности повышения точности измерений при установлении уровня загрязнения почв нефтепродуктами/ М. А. Пашкевич, М. В. Быкова// Горный информационно-аналитический бюллетень (научно-технический журнал). - 2022. - № 4. - С. 67–86. - DOI: 10.25018/0236\_1493\_2022\_4\_0\_67.
70. Пашкевич М. А. Оценка воздействия техногенных массивов на природную среду в горнопромышленных регионах: дис. ... д-ра техн. наук: 25.00.36/ Пашкевич Мария Анатольевна. - Санкт-Петербург, 2001. - 355 с.
71. Перельман, А. И. Геохимия: учебник для геологических специальностей вузов/ А. И. Перельман. - 2-е изд., перераб. и доп. - Москва: Высшая школа, 1989. - 528 с. - ISBN 5-06-000472-4.
72. Пиковский, Ю. И. Лабораторно-аналитические методы при определении углеводородного состояния почв (обзор)/ Ю. И. Пиковский, Л. А. Коротков, М. А. Смирнова, Р. Г. Ковач// Почвоведение. - 2017. - № 10. - С. 1165–1178.
73. Пономарев, Е. И. Изменение спектральных индексов в контексте природных и техногенных трансформаций ландшафтов/ Е. И. Пономарев, Н. Д. Якимов, Т. В. Пономарева// Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. - 2024. - Т. 21, № 4. - С. 131–140. - DOI: 10.21046/2070-7401-2024-21-4-131-140.
74. Прокофьева, Т. В. Систематика почв и почвообразующих пород Москвы и возможность их включения в общую классификацию/ Т. В. Прокофьева, И. А. Мартыненко, Ф. А. Иванников// Почвоведение. - 2011. - № 5. - С. 611–623.

75. Прудникова, Е. Ю. Особенности дистанционной диагностики агрохимических свойств пахотных почв/ Е. Ю. Прудникова, И. Ю. Савин, Г. В. Виндекер, Ю. И. Вернюк, Н. Я. Ребух, Н. В. Фомичев, Н. Д. Кавиза// Бюллетень Почвенного института им. В. В. Докучаева. - 2025. - № 126. - С. 68–89. - DOI: 10.19047/0136-1694-2025-126-68-89.

76. Прудникова, Е. Ю. Потенциальные возможности дистанционного детектирования параметров плодородия пахотных почв на основе спектральной отражательной способности их поверхности и данных о её температуре/ Е. Ю. Прудникова, И. Ю. Савин// Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. - 2024. - Т. 21, № 3. - С. 131–144. - DOI: 10.21046/2070-7401-2024-21-3-131-144.

77. Разработка проектно-сметной документации по мероприятию «Ликвидация жидких токсичных промышленных отходов «Мазутное озеро»: технический отчет по результатам инженерно-экологических изысканий. Т. 3. - Самара, 2025. - 500 с.

78. Реймерс, Н. Ф. Экология (теории, законы, правила, принципы и гипотезы)/ Н. Ф. Реймерс. - Москва: Россия молодая, 1994. - 367 с. - ISBN 5-86646-059-2.

79. Рекультивация территорий в районе сельского поселения Рождествено Самарской области, техногенно деградированных несанкционированным размещением спиртовой барды (в том числе проектирование): раздел 8 «Перечень мероприятий по охране окружающей среды». - Самара, 2020. - 777 с.

80. Родионов, С. С. Экологические проблемы при достижении сценариев устойчивого развития урбанизированных территорий малых городов/ С. С. Родионов, Н. Ю. Мичурина, А. А. Амосова, А. Н. Старожакинова, О. А. Самарина, В. М. Ляпин// Вестник Евразийской науки. - 2025. - Т. 17, № 1. - DOI: 10.15862/39ECVN125.

81. Рукавицын, В. В. Экоподоснова урбанизированных территорий как необходимый элемент территориального планирования городов/ В. В.

Рукавицын, В. Н. Экзарьян// Известия высших учебных заведений. Геология и разведка. - 2024. - Т. 66, № 4. - С. 55–65. - DOI: 10.32454/0016-7762-2024-66-4-55-65.

82. Рухович, Д. И. Анализ применения почвенных карт в системе ретроспективного мониторинга почвенного и земельного покрова/ Д. И. Рухович, М. С. Симакова, А. Л. Куляница, А. В. Брызжев, Н. В. Калинина, П. В. Королева, Е. В. Вильчевская, Е. А. Долинина, С. В. Рухович// Почвоведение. - 2015. - № 5. - С. 605–625. - DOI: 10.7868/S0032180X15050081.

83. Савин, И. Ю. Карта антропогенной нарушенности почв России/ И. Ю. Савин, К. С. Орлова, С. А. Автян// Доклады Российской академии наук. Науки о Земле. - 2024. - Т. 517, № 1. - С. 95–101. - DOI: 10.31857/S2686739724600565.

84. Савин, И. Ю. Стратегия спутникового мониторинга содержания органического углерода в пахотных горизонтах почв России/ И. Ю. Савин, Е. Ю. Прудникова, Г. В. Виндекер, Н. С. Соболев// Бюллетень Почвенного института им. В. В. Докучаева. - 2025. - № 123. - С. 65–99. - DOI: 10.19047/0136-1694-2025-123-65-99.

85. Савин, И. Ю. Спектральная отражательная способность почв и её применение в почвоведении/ И. Ю. Савин, А. В. Хабаров// Почвоведение. - 2007. - № 6. - С. 707–716.

86. Симонова, Ю. В. Фоновое содержание тяжёлых металлов и металлоидов для оценки загрязнения почв при проведении инженерно-экологических изысканий и мониторинга (на примере альфегумусовых почв Лужского района Ленинградской области)/ Ю. В. Симонова, Д. П. Кивович, А. В. Русаков, Е. В. Гостиницева// Вестник Санкт-Петербургского университета. Науки о Земле. - 2025. - Т. 70, № 3. - С. 493–520. - DOI: 10.21638/spbu07.2025.303.

87. Ступакова, Г. А. Анализ методов определения нефтепродуктов в почве при разных уровнях её загрязнения/ Г. А. Ступакова, Е. Э. Игнатьева, А. А. Лапушкина, Т. И. Щиплецова, Д. К. Митрофанов, Е. Ю. Ветрова//

Плодородие. - 2024. - № 5(140). - С. 86–89. - DOI: 10.25680/S19948603.2024.140.18.

88. Суворова, О. К. Особенности загрязнения почвы на территории аэропорта, выявленные по результатам инженерно-экологических изысканий/ О. К. Суворова, В. Я. Соловьёва, М. С. Абу-Хасан, А. В. Харламова// Известия Петербургского университета путей сообщения. - 2023. - Т. 20, № 3. - С. 715–720. - DOI: 10.20295/1815-588X-2023-3-715-720.

89. Трофимов, В. Т. Инженерная геология: учебник для студентов, обучающихся по направлению «Геология»/ В. Т. Трофимов. - Москва: Издательство Московского университета, 2023. - 572 с. - ISBN 978-5-19-011771-4.

90. Хантимирова, С. Б. Инженерно-экологический мониторинг объектов размещения отходов на территории города Волгограда/ С. Б. Хантимирова, О. А. Мишустин// XXVI Региональная конференция молодых учёных и исследователей Волгоградской области: сборник материалов. - Волгоград: Волгоградский государственный технический университет, 2022. - С. 250–252.

91. Харьковина, М. А. Экологические последствия трансформации геологических процессов на территории России под влиянием антропогенных воздействий/ М. А. Харьковина// ГеоРиск. - 2011. - № 4. - С. 49–55.

92. Чертес, К. Л. Геоэкологическая оценка нарушенных территорий и их восстановление материалами на основе крупнотоннажных шламовых отходов/ К. Л. Чертес, О. В. Тупицына, Е. Г. Мартыненко, Д. В. Смородин, Д. Е. Быков, М. Ю. Слесарев// Экология и промышленность России. - 2017. - Т. 21, № 10. - С. 38–43. - DOI: 10.18412/1816-0395-2017-10-38-43.

93. Шаяхметов, М. Р. Применение цифровых технологий при агроэкологической оценке почвенного покрова Таврического района Омской области/ М. Р. Шаяхметов, А. В. Губарь// Каталог выпускных квалификационных работ ФГБОУ ВО Омский ГАУ: серия «Агрохимия и агропочвоведение»: сборник материалов по итогам научно-исследовательской

деятельности. - Омск: Омский государственный аграрный университет имени П. А. Столыпина, 2022. - С. 57–60.

94. Шаяхметов, М. Р. Мониторинг и картографирование почвенного покрова на основе пространственно-временного анализа/ М. Р. Шаяхметов, А. М. Гиндмит, С. К. Макенова, М. С. Балухов, И. В. Безукладов, Р. Р. Сулейманов// Вестник Омского государственного аграрного университета. - 2021. - № 1(41). - С. 68–75. - DOI: 10.48136/2222-0364\_2021\_1\_68.

95. Шаяхметов, М. Р. Применение геоинформационных технологий при агрохимическом обследовании земель сельскохозяйственного назначения/ М. Р. Шаяхметов, Р. Р. Сулейманов, А. А. Боровков// Экобюллетень. - 2021. - № 4. - С. 263–268.

96. Шаяхметов, М. Р. Применение материалов дистанционного зондирования Земли при оценке состояния почв и растений/ М. Р. Шаяхметов, Н. М. Невешкина, В. Н. Куран// Вестник Курской ГСХА. - 2023. - № 9. - С. 68–75.

97. Шилов, В. А. Геоэкологическая устойчивость прибрежных экосистем в условиях трансформации малых городов/ В. А. Шилов, О. В. Ладыгина// Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Экология и безопасность жизнедеятельности. - 2025. - Т. 33, № 3. - С. 352–365. - DOI: 10.22363/2313-2310-2025-33-3-352-365.

98. Экологический бюллетень. Самарская область. 2025 год. – Самара: ФГБУ «Приволжское управление по гидрометеорологии и мониторингу окружающей среды, 2026. - 60 с.

99. Achard, V. Hydrocarbon Pollution Detection and Mapping Based on the Combination of Various Hyperspectral Imaging Processing Tools/ V. Achard, P.-Y. Foucher, D. Dubucq// Remote Sensing. - 2021. - Vol. 13, № 5. - Art. 1020. - DOI: 10.3390/rs13051020.

100. Andreoli, G. Hyperspectral Analysis of Oil and Oil-Impacted Soils for Remote Sensing Purposes/ G. Andreoli, B. Bulgarelli, B. Hosgood, D. Tarchi. -

Luxembourg: Office for Official Publications of the European Communities, 2007.  
- 36 p.

101. Barnes, R. J. Standard Normal Variate Transformation and De-trending of Near-Infrared Diffuse Reflectance Spectra/ R. J. Barnes, M. S. Dhanoa, S. J. Lister// *Applied Spectroscopy*. - 1989. - Vol. 43, № 5. - P. 772–777. - DOI: 10.1366/0003702894202201.

102. Ben-Dor, E. Soil Reflectance/ E. Ben-Dor, J. R. Irons, G. F. Epema// *Remote Sensing for the Earth Sciences*/ ed. by A. N. Rencz. - New York: Wiley, 1999. - P. 111–188. - ISBN 0-471-97083-3.

103. Ben-Dor, E. Imaging Spectrometry for Soil Applications/ E. Ben-Dor, R. G. Taylor, J. A. M. Demattê, M. L. Whiting, S. Chabrillat, S. Sommer// *Advances in Agronomy*. - 2008. - Vol. 97. - P. 321–392. - DOI: 10.1016/S0065-2113(07)00008-9.

104. Benedetti, F. Global Soil Spectroscopy Assessment. Spectral Soil Data: Needs and Capacities/ F. Benedetti, F. van Egmond. - Rome: FAO, 2021. - 42 p. - DOI: 10.4060/cb6265en.

105. Bogomolov, A. New Approaches to Data Processing and Analysis in Optical Sensing/ A. Bogomolov, A. Evseeva, E. Ignatiev, V. Korneev// *Trends in Analytical Chemistry*. - 2023. - Vol. 167. - Article 117295. - DOI: 10.1016/j.trac.2023.117295.

106. Breiman, L. Random Forests/ L. Breiman// *Machine Learning*. - 2001. - Vol. 45, № 1. - P. 5–32. - DOI: 10.1023/A:1010933404324.

107. Brown, D. J. Global Soil Characterization with VNIR Diffuse Reflectance Spectroscopy/ D. J. Brown, K. D. Shepherd, M. G. Walsh, M. D. Mays, T. G. Reinsch// *Geoderma*. - 2006. - Vol. 132, № 3–4. - P. 273–290. - DOI: 10.1016/j.geoderma.2005.04.025.

108. Byun, Y. Prediction of Na- and Ca-montmorillonite Contents and Swelling Properties of Clay Mixtures Using Vis-NIR Spectroscopy/ Y. Byun, C. Seo, T. Yun, Y. Joo, H. Y. Jo// *Geoderma*. - 2023. - Vol. 430. - Article 116294. - DOI: 10.1016/j.geoderma.2022.116294.

109. Chakraborty, S. Rapid Identification of Oil-Contaminated Soils Using Visible Near-Infrared Diffuse Reflectance Spectroscopy/ S. Chakraborty, D. C. Weindorf, C. L. S. Morgan, Y. Ge, J. Galbraith, B. Li, C. S. Kahlon// *Journal of Environmental Quality*. - 2010. - Vol. 39, № 4. - P. 1133–1142. - DOI: 10.2134/jeq2010.0183.
110. Chang, C. W. Near-Infrared Reflectance Spectroscopic Analysis of Soil C and N/ C. W. Chang, D. A. Laird// *Soil Science*. - 2002. - Vol. 167, № 2. - P. 110–116. - DOI: 10.1097/00010694-200202000-00003.
111. Chen, K. Spatial Heterogeneity of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons Pollution in Surface Soil of China and Its Response to Regional Energy Consumption/ K. Chen, H. Shen, S. Zang, L. Sun// *Frontiers in Environmental Science*. - 2024. - Vol. 12. - Article 1496826. - DOI: 10.3389/fenvs.2024.1496826.
112. Clark, R. N. Spectroscopy of Rocks and Minerals and Principles of Spectroscopy/ R. N. Clark// *Manual of Remote Sensing*. - New York: John Wiley & Sons, 1999. - Vol. 3. - P. 3–58. - ISBN 0-471-32948-8.
113. Dangal, S. R. S. Accurate and Precise Prediction of Soil Properties from a Large Mid-Infrared Spectral Library/ S. R. S. Dangal, J. Sanderman, S. Wills, L. Ramirez-Lopez// *Soil Systems*. - 2019. - Vol. 3, № 1. - Art. 11. - DOI: 10.3390/soilsystems3010011.
114. Dinakaran, J. Near-Infrared-Spectroscopy for Determination of Carbon and Nitrogen in Indian Soils/ J. Dinakaran, A. Bidalia, A. Kumar, M. Hanief, A. Meena, K. S. Rao// *Communications in Soil Science and Plant Analysis*. - 2016. - Vol. 47, № 12. - P. 1503–1516. - DOI: 10.1080/00103624.2016.1194990.
115. Gao, B.-C. NDWI - A Normalized Difference Water Index for Remote Sensing of Vegetation Liquid Water from Space/ B.-C. Gao// *Remote Sensing of Environment*. - 1996. - Vol. 58, № 3. - P. 257–266. - DOI: 10.1016/S0034-4257(96)00067-3.
116. Golia, E. E. Potentially Toxic Elements in Urban and Peri-Urban Soils: A Critical Meta-Analysis of Their Sources, Availability, Interactions, and Spatial Distribution/ E. E. Golia, J. Bethanis, C. Xagoraris, P. Tziourrou// *Journal of*

Ecological Engineering. - 2024. - Vol. 25, № 5. - P. 335–350. - DOI: 10.12911/22998993/186804.

117. Hunt, E. R. Detection of Changes in Leaf Water Content Using Near- and Middle-Infrared Reflectances/ E. R. Hunt, B. N. Rock// Remote Sensing of Environment. - 1989. - Vol. 30. - P. 43–54. - DOI: 10.1016/0034-4257(89)90046-1.

118. Kosheleva, N. E. Contamination of Urban Soils with Heavy Metals in Moscow Affected by Building Development/ N. E. Kosheleva, D. V. Vlasov, I. D. Korlyakov, N. S. Kasimov// Science of the Total Environment. - 2018. - Vol. 636. - P. 854–863. - DOI: 10.1016/j.scitotenv.2018.04.308.

119. Kuang, B. Calibration of a Visible and Near Infrared Spectroscopy for Soil Analysis at Field Scales across Three European Farms/ B. Kuang, A. M. Mouazen// European Journal of Soil Science. - 2011. - Vol. 62, № 4. - P. 629–636. - DOI: 10.1111/j.1365-2389.2011.01358.x.

120. Kühn, F. Hydrocarbon Index - An Algorithm for Hyperspectral Detection of Hydrocarbons/ F. Kühn, K. Oppermann, B. Hörig// International Journal of Remote Sensing. - 2004. - Vol. 25, № 12. - P. 2467–2473. - DOI: 10.1080/01431160310001642287.

121. Lenz, A. Evaluation and Performance Analysis of Hydrocarbon Detection Methods Using Hyperspectral Data/ A. Lenz, H. Schilling, W. Gross, W. Middelman// IGARSS 2015 - 2015 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium. - 2015. - P. 3867–3870. - DOI: 10.1109/IGARSS.2015.7326365.

122. Misbah, K. Ensemble Band Selection for Quantification of Soil Total Nitrogen Levels from Hyperspectral Imagery/ K. Misbah, A. Laamrani, P. Voroney, K. Khechba, R. Casa, A. Chehbouni// Remote Sensing. - 2024. - Vol. 16, № 14. - Article 2549. - DOI: 10.3390/rs16142549.

123. Murad, M. O. F. Assessing a VisNIR Penetrometer System for In-Situ Estimation of Soil Organic Carbon under Variable Soil Moisture Conditions/ M. O. F. Murad, E. J. Jones, B. Minasny, A. B. McBratney, N. Wijewardane, Y. Ge//

Biosystems Engineering. - 2022. - Vol. 224. - P. 197–212. - DOI: 10.1016/j.biosystemseng.2022.10.011.

124. Naibo, G. Near-Infrared Spectroscopy to Estimate the Chemical Element Concentration in Soils and Sediments in a Rural Catchment/ G. Naibo, X. Yang, Y. Li, G. Pesini, J. M. Moura-Bueno, C. A. P. Barros, L. Caner, Y. J. A. B. Silva, J. P. G. Minella, D. R. dos Santos, T. Tiecher// Catena. - 2022. - Vol. 213. - Article 106145. - DOI: 10.1016/j.catena.2022.106145.

125. Ng, W. Rapid Assessment of Petroleum-Contaminated Soils with Infrared Spectroscopy/ W. Ng, B. Minasny, B. P. Malone// Geoderma. - 2017. - Vol. 289. - P. 150–160. - DOI: 10.1016/j.geoderma.2016.11.030.

126. Nocita, M. Soil Spectroscopy: An Alternative to Wet Chemistry for Soil Monitoring/ M. Nocita, A. Stevens, B. van Wesemael, M. Aitkenhead, M. Bachmann, B. Barthès, D. Dorigo, B. Dardenne, E. Ben-Dor, O. Brown, M. Clairotte, M. Csorba, F. D. W. de Baets, J. Guerrero, K. Knadel, M. Montanarella, C. Noon, R. Ramirez-Lopez, B. van de Vijver// Advances in Agronomy. - 2015. - Vol. 132. - P. 139–159. - DOI: 10.1016/bs.agron.2015.02.002.

127. Nyarko, F. Potential of Visible and Near Infrared Spectroscopy Coupled with Machine Learning for Predicting Soil Metal Concentrations at the Regional Scale/ F. Nyarko, F. M. G. Tack, A. M. Mouazen// Science of the Total Environment. - 2022. - Vol. 841. - Article 156582. - DOI: 10.1016/j.scitotenv.2022.156582.

128. Ocean Optics. STS-NIR Spectrometer [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.oceanoptics.com/spectrometer/st-nir/> (дата обращения: 17.10.2022 г.)

129. Reeves, J. B. Near- versus Mid-Infrared Diffuse Reflectance Spectroscopy for Soil Analysis Emphasizing Carbon and Laboratory versus On-Site Analysis: Where Are We and What Needs to Be Done?/ J. B. Reeves// Geoderma. - 2010. - Vol. 158. - P. 3–14. - DOI: 10.1016/j.geoderma.2009.04.005.

130. Sacko, B. D. Capability of Visible-Near Infrared Spectroscopy in Estimating Soils Carbon, Potassium and Phosphorus/ B. D. Sacko, S. Sanogo, H.

Konare, B. Abdramane, T. Diakite// *Optics and Photonics Journal*. - 2018. - Vol. 8, № 5. - P. 123–134. - DOI: 10.4236/opj.2018.85012.

131. Safaie, M. Using Deep Neural Networks for Evaluation of Soil Quality Based on VIS-NIR Spectroscopy/ M. Safaie, M. Hosseinpour-Zarnaq, M. Omid, F. Sarmadian, H. Ghasemi-Mobtaker// *Earth Science Informatics*. - 2024. - Vol. 17. - P. 271–281. - DOI: 10.1007/s12145-023-01168-4.

132. Saidi, S. Use of Vis-NIR Reflectance Spectroscopy for Estimating Soil Phosphorus Sorption Parameters at the Watershed Scale/ S. Saidi, S. Ayoubi, M. Shirvani, S. A. Mireei, Y. Ge, K. Zhao, A. Cerdà// *Soil and Tillage Research*. - 2025. - Vol. 248. - Article 106460. - DOI: 10.1016/j.still.2025.106460.

133. Savitzky, A. Smoothing and Differentiation of Data by Simplified Least Squares Procedures/ A. Savitzky, M. J. E. Golay// *Analytical Chemistry*. - 1964. - Vol. 36, № 8. - P. 1627–1639. - DOI: 10.1021/ac60214a047.

134. Shepherd, K. D. Development of Reflectance Spectral Libraries for Characterization of Soil Properties/ K. D. Shepherd, M. G. Walsh// *Soil Science Society of America Journal*. - 2002. - Vol. 66, № 3. - P. 988–998. - DOI: 10.2136/sssaj2002.0988.

135. Soriano-Disla, J. M. The Performance of Visible, Near-, and Mid-Infrared Reflectance Spectroscopy for Prediction of Soil Physical, Chemical, and Biological Properties/ J. M. Soriano-Disla, L. J. Janik, R. A. Viscarra Rossel, L. M. Macdonald, M. J. McLaughlin// *Applied Spectroscopy Reviews*. - 2014. - Vol. 49, № 2. - P. 139–186. - DOI: 10.1080/05704928.2013.811081.

136. Stenberg, B. Visible and Near Infrared Spectroscopy in Soil Science/ B. Stenberg, R. A. Viscarra Rossel, A. M. Mouazen, J. Wetterlind// *Advances in Agronomy*. - 2010. - Vol. 107. - P. 163–215. - DOI: 10.1016/S0065-2113(10)07005-7.

137. Thermo Scientific. microPHAZIR RX. Product Specifications. - Wilmington: Thermo Fisher Scientific Inc., 2010. - 2 p.

138. Thomas, C. L. A Comparison of Soil Texture Measurements Using Mid-Infrared Spectroscopy (MIRS) and Laser Diffraction Analysis (LDA) in Diverse

Soils/ C. L. Thomas, J. Hernandez-Allica, S. J. Dunham, S. P. McGrath, S. M. Haefele// Scientific Reports. - 2021. - Vol. 11. - Art. 16. - DOI: 10.1038/s41598-020-79618-y.

139. USEPA Method 6200. Field Portable X-Ray Fluorescence Spectrometry for the Determination of Elemental Concentrations in Soil and Sediment. - Washington: United States Environmental Protection Agency, 2007. - 54 p.

140. Vapnik, V. N. Statistical Learning Theory/ V. N. Vapnik. - New York: Wiley, 1998. - 768 p. - ISBN 978-0-471-03003-4.

141. Viscarra Rossel, R. A. Diffuse Reflectance Spectroscopy as a Tool for Digital Soil Mapping/ R. A. Viscarra Rossel, A. B. McBratney// Digital Soil Mapping with Limited Data/ ed. by A. E. Hartemink, A. McBratney, M. de Lourdes Mendonça-Santos. - Dordrecht: Springer, 2008. - P. 165–172. - DOI: 10.1007/978-1-4020-8592-5\_13.

142. Whiting, M. L. Predicting Water Content Using Gaussian Model on Soil Spectra/ M. L. Whiting, L. Li, S. L. Ustin// Remote Sensing of Environment. - 2004. - Vol. 89, № 4. - P. 535–552. - DOI: 10.1016/j.rse.2003.11.009.

143. Wold, S. PLS-Regression: A Basic Tool of Chemometrics/ S. Wold, M. Sjöström, L. Eriksson// Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems. - 2001. - Vol. 58, № 2. - P. 109–130. - DOI: 10.1016/S0169-7439(01)00155-1.

144. Xu, J. Semi-empirical model of soil organic matter and soil moisture content with Bayesian joint inversion / J. Xu, Y. Liu, C. Yan, J. Yuan // Journal of Soils and Sediments. – 2026. – Vol. 26. – Article 108. – DOI: 10.1007/s11368-026-04084-2.

145. Xu, J. Estimation of Soil Organic Matter Based on Spectral Indices Combined with Water Removal Algorithm/ J. Xu, Y. Wang, Z. Li, C. Yan, J. Yuan// Remote Sensing. - 2024. - Vol. 16, № 12. - Article 2065. - DOI: 10.3390/rs16122065.

146. Zhang, Y. Soil Nitrogen Content Forecasting Based on Real-Time NIR Spectroscopy/ Y. Zhang, M. Li, L. Zheng, Y. Zhao, X. Pei// Computers and

Electronics in Agriculture. - 2016. - Vol. 124. - P. 29–36. - DOI:  
10.1016/j.compag.2016.03.016.

**ПРИЛОЖЕНИЕ 1. РАСШИРЕННЫЕ ДАННЫЕ АГРОХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ОБРАЗЦОВ ГРУНТОВ**

№ образца	Площадка	Фосфор, мг/кг	Азот нитратный, мг/кг	Сера, мг/кг	Натрий, мг/кг	Калий, мг/кг	Азот нитритный, мг/кг	Органический углерод, %	Влажность, %	Зольность, %
В 1	№1	1458,50	10,01	356,51	28,00	10,90	1,24	3,39	2,05	94,60
В 2		1317,00	6,76	428,94	33,00	10,90	1,86	3,88	2,07	94,04
В 3		1272,00	26,54	319,77	22,00	7,30	1,48	6,13	2,28	91,57
В 4		1245,25	10,42	501,84	33,00	8,20	1,23	6,17	2,16	91,66
В 5		1199,00	2,20	527,26	22,00	17,20	1,49	6,02	2,44	91,53
В 6		1209,75	12,62	691,50	612,00	5,10	0,95	3,03	2,25	94,71
В 7		1232,00	16,12	514,80	580,00	11,70	1,06	1,43	1,10	96,57
В 8		1097,25	4,40	573,60	932,00	14,10	1,00	3,82	1,78	94,4
В 9		1600,00	15,79	722,68	466,00	3,90	0,99	0,96	2,33	96,71
В 10		1339,50	15,47	653,50	913,00	7,40	1,10	1,67	2,77	95,57
В 11		1099,25	9,69	611,72	644,00	6,30	1,38	0,83	2,51	96,66
К 1	№2	1364,75	7,57	1219,41	154,00	13800,00	0,25	5,59	2,99	91,42
К 2		1171,50	16,12	1184,76	17,00	9,70	0,69	5,94	4,17	89,88
К 3		1182,50	14,41	1172,96	50,00	6,30	0,69	5,05	3,91	91,03
К 4		1233,25	1,38	233,24	66,00	3,90	1,20	1,90	12,10	86,00
К 5		1222,25	2,28	428,18	42,00	2,30	0,68	0,15	3,57	96,28
К 6		1199,50	0,81	397,51	36,00	3,90	1,08	2,41	4,24	93,35
К 7		1229,75	0,41	501,51	30,00	3,90	0,89	0,25	4,10	95,65
К 8		1141,75	3,09	450,38	36,00	2,30	0,51	3,64	3,86	92,49
Р 1	№3	1224,25	9,44	538,30	90,00	30,00	7,65	0,35	8,10	91,55
Р 2		1321,50	3,75	1004,30	<10,00	<1,00	1,37	0,25	7,10	92,65
Р 3		1321,50	2,04	1040,80	<10,00	<1,00	1,25	0,61	5,89	93,49
Р 4		1088,75	1,66	604,70	170,00	10,00	1,65	0,53	1,70	97,77
Р 5		1116,25	3,49	715,50	200,00	10,00	4,52	0,85	4,80	94,35
Р 6		1088,75	2,64	4450,90	290,00	170,00	19,5	6,52	11,7	81,78

№ образца	Площадь, ка	Фосфор, мг/кг	Азот нитратный, мг/кг	Сера, мг/кг	Натрий, мг/кг	Калий, мг/кг	Азот нитритный, мг/кг	Органический углерод, %	Влажность, %	Зольность, %
P 7		1187,075	1,29	3192,90	320,00	150,00	6,43	5,25	3,30	91,45
P 8		1282,25	0,74	1587,90	270,00	150,00	0,40	4,09	7,10	88,81
P 9		1197,25	1,79	1071,10	290,00	90,00	1,89	1,69	2,70	95,61
P 10		1180,50	2,62	1974,70	650,00	10,00	6,33	2,03	7,90	90,07
P 11		1216,68	1,12	608,70	360,00	10,00	1,30	1,08	1,80	97,12
P 12		1177,00	6,81	369,50	60,00	60,00	4,83	1,98	4,60	93,42
P 13		1246,50	1,98	263,00	140,00	10,00	1,41	0,66	3,30	96,04
C 1	№4	1150,25	11,97	1448,00	16,00	2,60	1,49	6,02	2,44	91,53
C 2		1200,50	5,86	1105,00	11,00	3,90	0,95	3,03	2,25	94,71
C 3		1177,75	10,67	1217,00	17,00	13,30	1,06	1,43	1,10	96,57
C 4		1200,50	12,38	340,90	17,00	8,20	1,00	3,82	1,78	94,4
C 5		949,00	5,94	651,25	17,00	8,20	0,99	0,96	2,33	96,71
C 6		800,00	3,91	954,68	<10,00	18,40	1,10	1,67	2,77	95,57
C 7		997,25	9,39	1342,12	11,00	27,20	1,38	0,83	2,51	96,66
C 8		1182,50	2,85	3064,00	27,00	5,20	0,25	5,59	2,99	91,42
C 9		1233,25	0,08	2167,00	27,00	9,10	0,69	5,94	4,17	89,88
C 10		1222,25	0,16	2062,00	27,00	10,50	0,69	5,05	3,91	91,03
C 11		1199,50	0,73	1924,00	22,00	11,80	1,20	1,90	12,10	86,00
C 12		1229,75	1,79	230,00	16,00	5,20	0,68	0,15	3,57	96,28
C 13		1102,25	1,06	536,00	11,00	10,50	1,49	6,02	2,44	91,53
C 14		1086,75	0,24	686,00	<10,00	5,20	0,95	3,03	2,25	94,71
C 15		1250,00	0,90	5703,00	22,00	6,50	1,06	1,43	1,10	96,57
C 16		1150,00	0,24	1345,00	22,00	7,80	1,00	3,82	1,78	94,40
C 17		1202,45	0,90	3663,00	11,00	10,50	0,99	0,96	2,33	96,71
C 18		1075,73	6,76	230,00	188,00	5,10	1,10	1,67	2,77	95,57
C 19		1137,48	8,63	369,00	232,00	9,00	1,38	0,83	2,51	96,66

№ образца	Площадь, ка	Фосфор, мг/кг	Азот нитратный, мг/кг	Сера, мг/кг	Натрий, мг/кг	Калий, мг/кг	Азот нитритный, мг/кг	Органический углерод, %	Влажность, %	Зольность, %
C 20		1231,60	12,46	972,00	251,00	12,90	0,25	5,59	2,99	91,42
C 21		1150,00	3,09	2383,00	69,00	5,10	0,69	5,94	4,17	89,88
C 22		1256,18	6,11	701,00	290,00	6,40	0,69	5,05	3,91	91,03
C 23		1225,70	2,36	2367,00	98,00	2,30	1,20	1,90	12,10	86,00
C 24		1239,18	10,42	588,00	251,00	7,70	0,68	0,15	3,57	96,28
C 25		1177,00	4,88	1297,00	238,00	<1,00	1,08	2,41	4,24	93,35
F 1	№5	1310,75	4,88	1297,00	238,00	12,90	0,49	0,59	4,41	95,00
F 2		1044,00	4,88	1400,00	1600,00	11000,00	0,50	11,28	8,42	80,3
F 3		1279,75	4,88	800,00	3300,00	9500,00	0,56	7,64	7,97	84,39
F 4		1320,25	4,88	1310,00	5000,00	7500,00	0,54	5,58	14,64	79,78
F 5		1399,00	4,88	241,00	<10,00	10000,00	0,52	13,19	28,39	58,42
F 6		1389,75	5,02	2100,00	7600,00	5400,00	0,25	8,59	7,49	83,92
F 7		1297,50	5,01	444,00	2500,00	9800,00	0,56	11,12	2,44	86,44
F 8		1275,00	5,03	365,00	6000,00	13600,00	0,56	6,70	13,30	80,00
X 1	№6	1275,00	1,47	394,5,00	17,00	7,70	0,67	0,29	0,95	98,76
X 2		926,50	13,92	358,20	35,00	9,00	0,41	12,10	27,85	60,05
X 3		1428,00	5,21	741,40	789,00	1,20	0,51	2,84	11,95	85,21
X 4		1119,00	16,45	463,10	315,00	24,60	0,55	0,91	6,64	92,45
X 5		1233,25	4,48	416,80	197,00	23,50	0,18	3,04	1,11	95,82
X 6		1013,50	3,75	210,90	152,00	13,30	0,38	2,96	1,12	95,82
X 7		1225,00	0,73	259,10	84,00	8,20	1,01	1,15	0,74	98,11
X 8		1004,75	1,79	452,30	24,00	6,30	0,29	24,40	0,21	75,38
X 9		1225,00	1,38	218,20	24,00	14,10	0,91	0,84	0,40	98,76
X 10		1249,25	1,14	1498,90	12,00	6,30	0,29	3,30	1,57	95,13
X 11		1252,25	1,55	1763,70	36,00	9,00	0,39	1,55	1,78	96,66
X 12		1250,00	7,08	1266,60	4290,00	11,70	0,38	4,04	1,81	94,15

№ образца	Площадь	Фосфор, мг/кг	Азот нитратный, мг/кг	Сера, мг/кг	Натрий, мг/кг	Калий, мг/кг	Азот нитритный, мг/кг	Органический углерод, %	Влажность, %	Зольность, %
X 13		1294,25	3,01	1285,80	54,00	9,00	0,35	2,06	1,52	96,41
X 14		1225,00	3,01	24510	90,00	7,40	0,32	0,24	10,85	88,91
X 15		1176,50	0,49	1689,40	36,00	9,00	0,43	1,19	1,00	97,81
X 16		1232,25	1,63	1348,30	30,00	7,40	0,38	2,23	0,98	96,79
X 17		1177,00	2,52	2887,00	330,00	15,20	1,02	4,99	1,51	93,50
X 18		1254,75	2,12	1749,50	178,00	36,40	0,26	2,51	1,46	96,02

## ПРИЛОЖЕНИЕ 2. СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАТУРНЫХ ОБРАЗЦОВ ГРУНТОВ

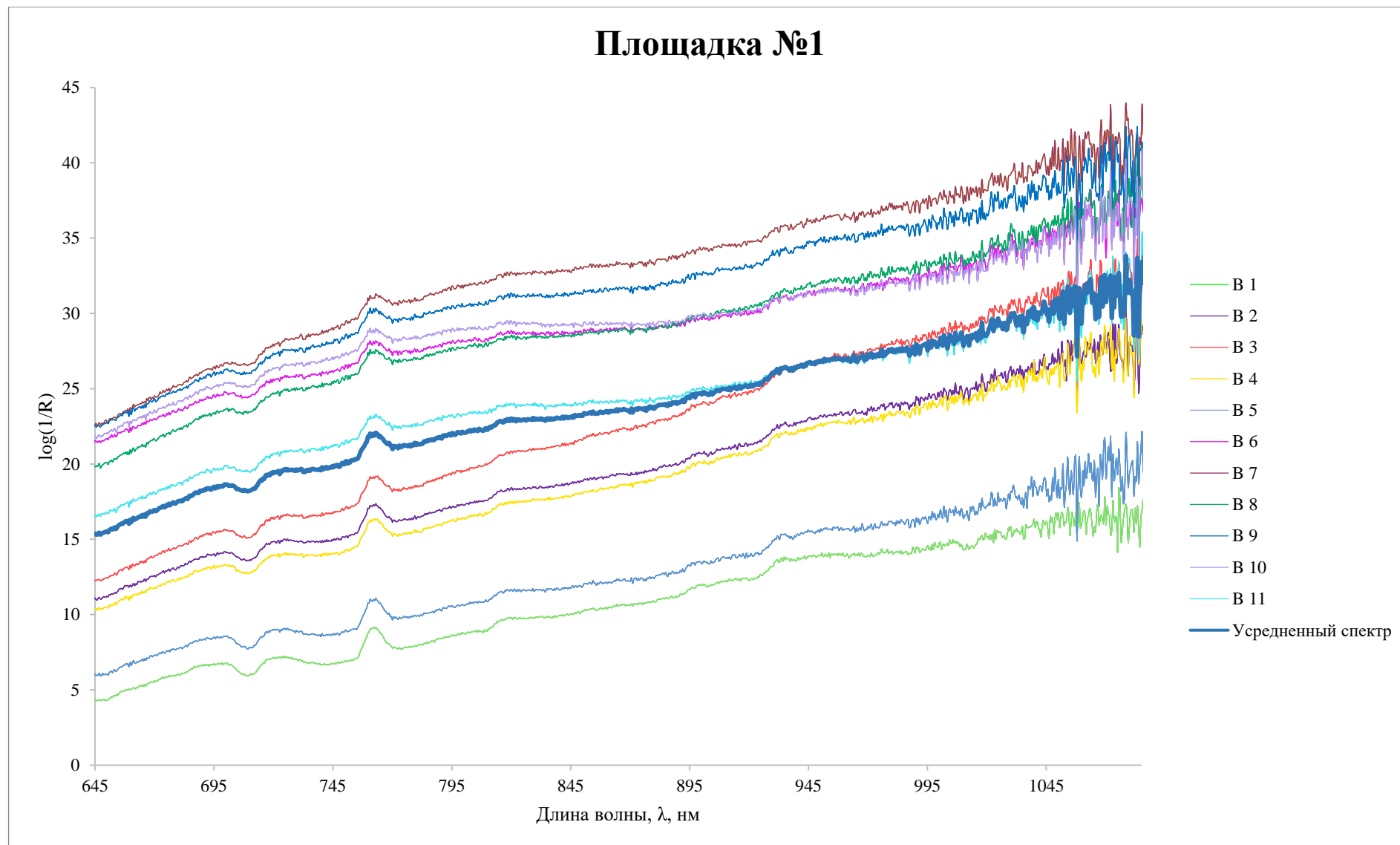


Рисунок 2.1. Спектральные характеристики образцов грунта площадки №1

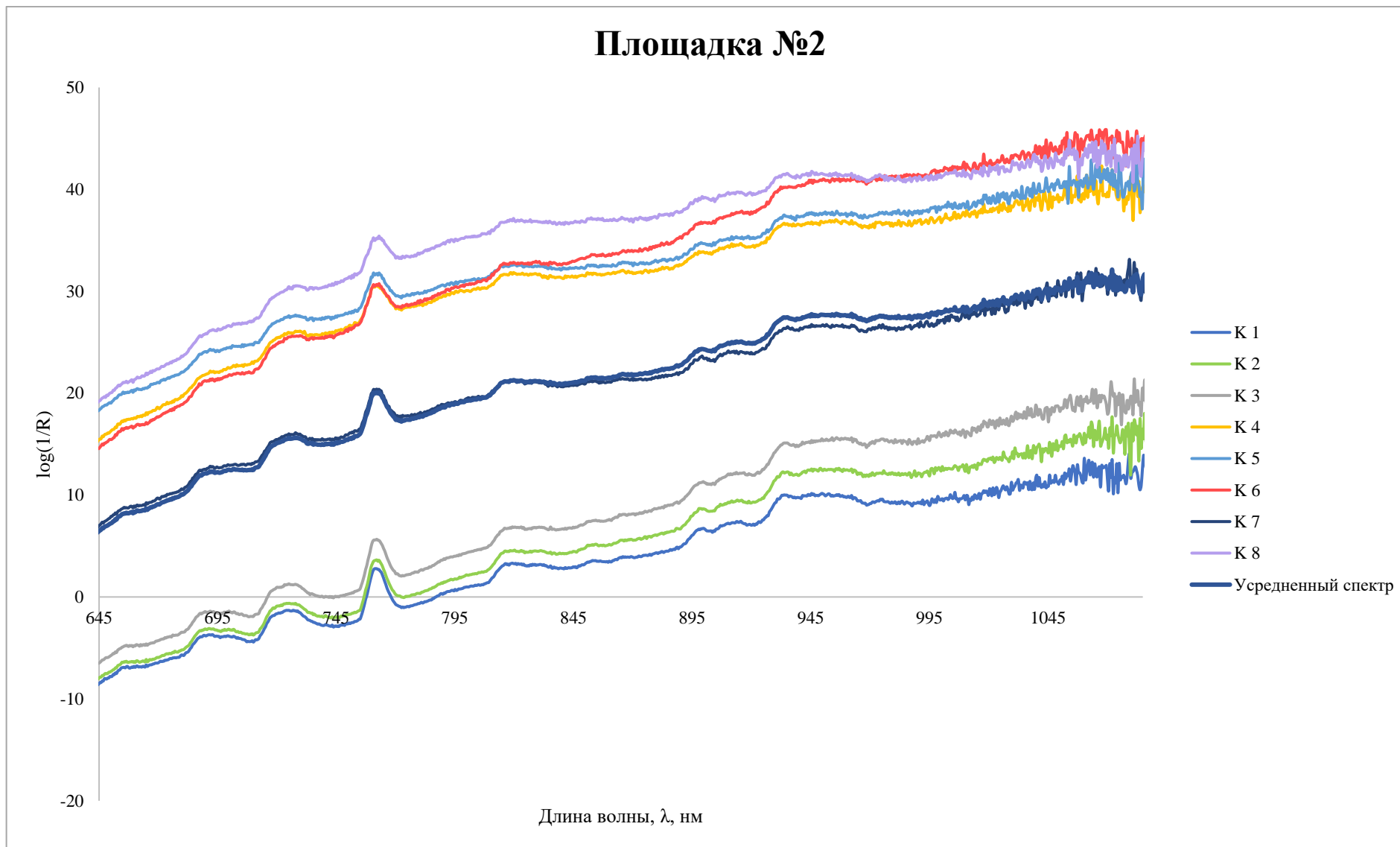


Рисунок 2.2. Спектральные характеристики образцов грунта площадки №2

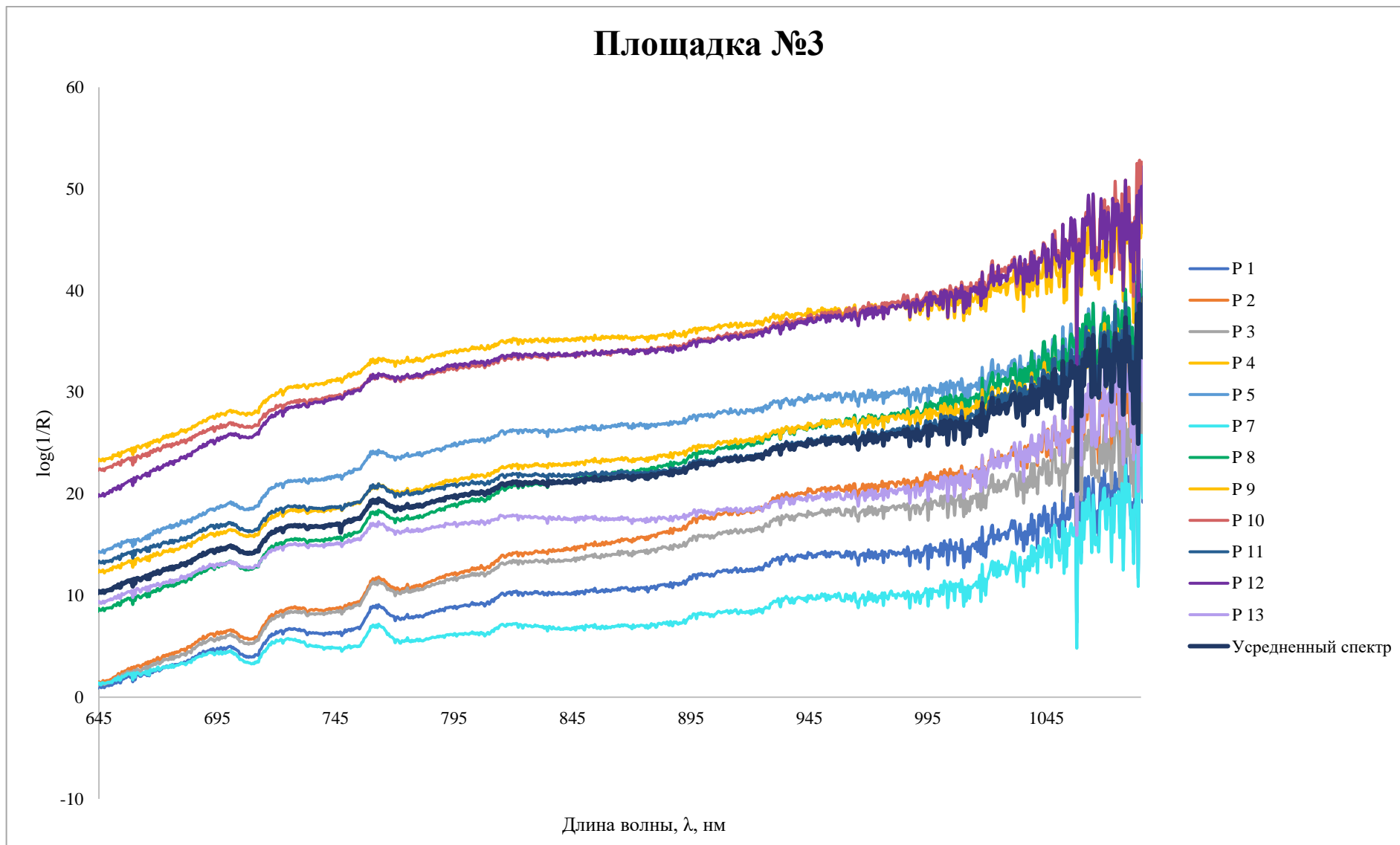


Рисунок 2.3. Спектральные характеристики образцов грунта площадки №3

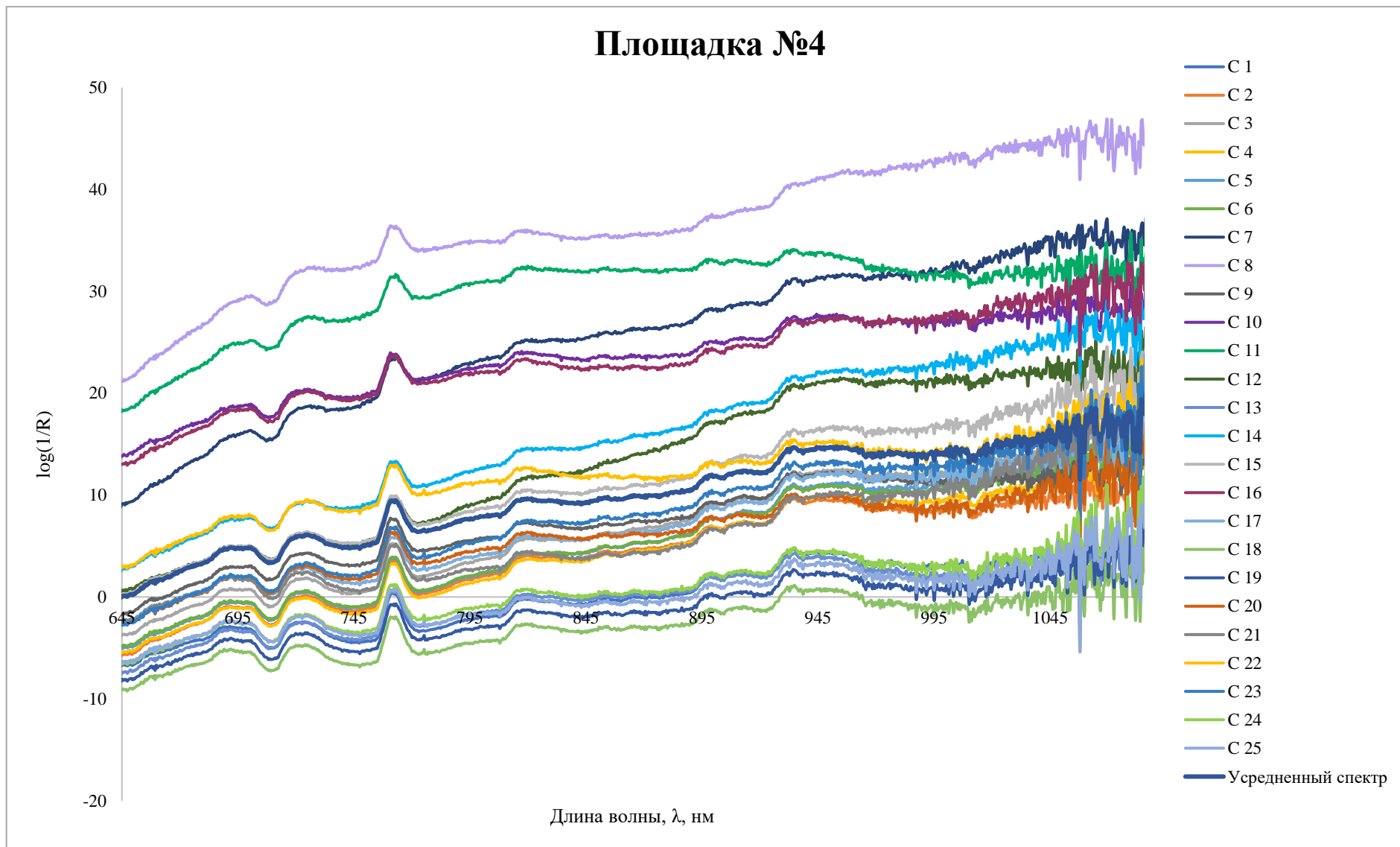


Рисунок 2.4. Спектральные характеристики образцов грунта площадки №4

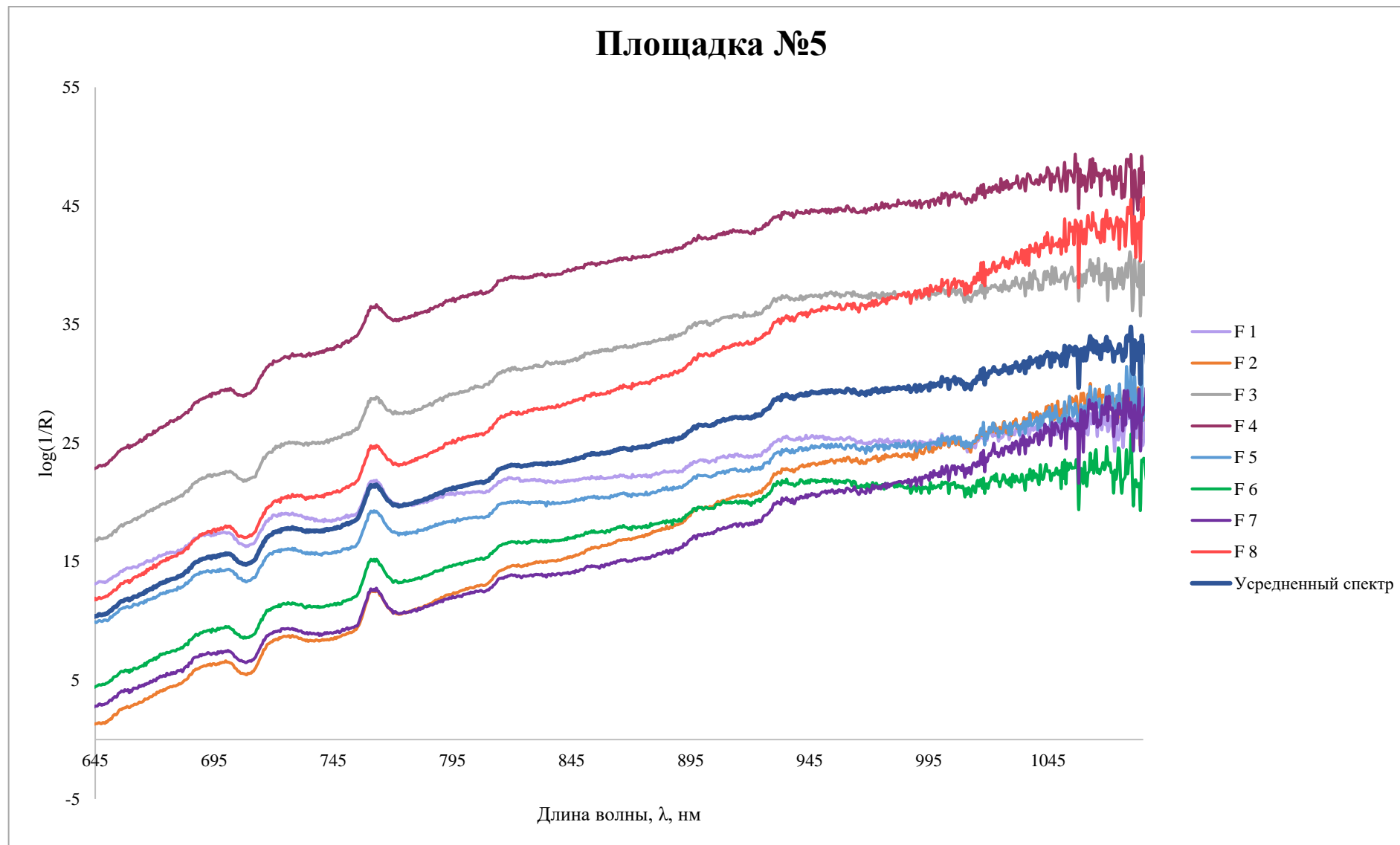


Рисунок 2.5. Спектральные характеристики образцов грунта площадки №5

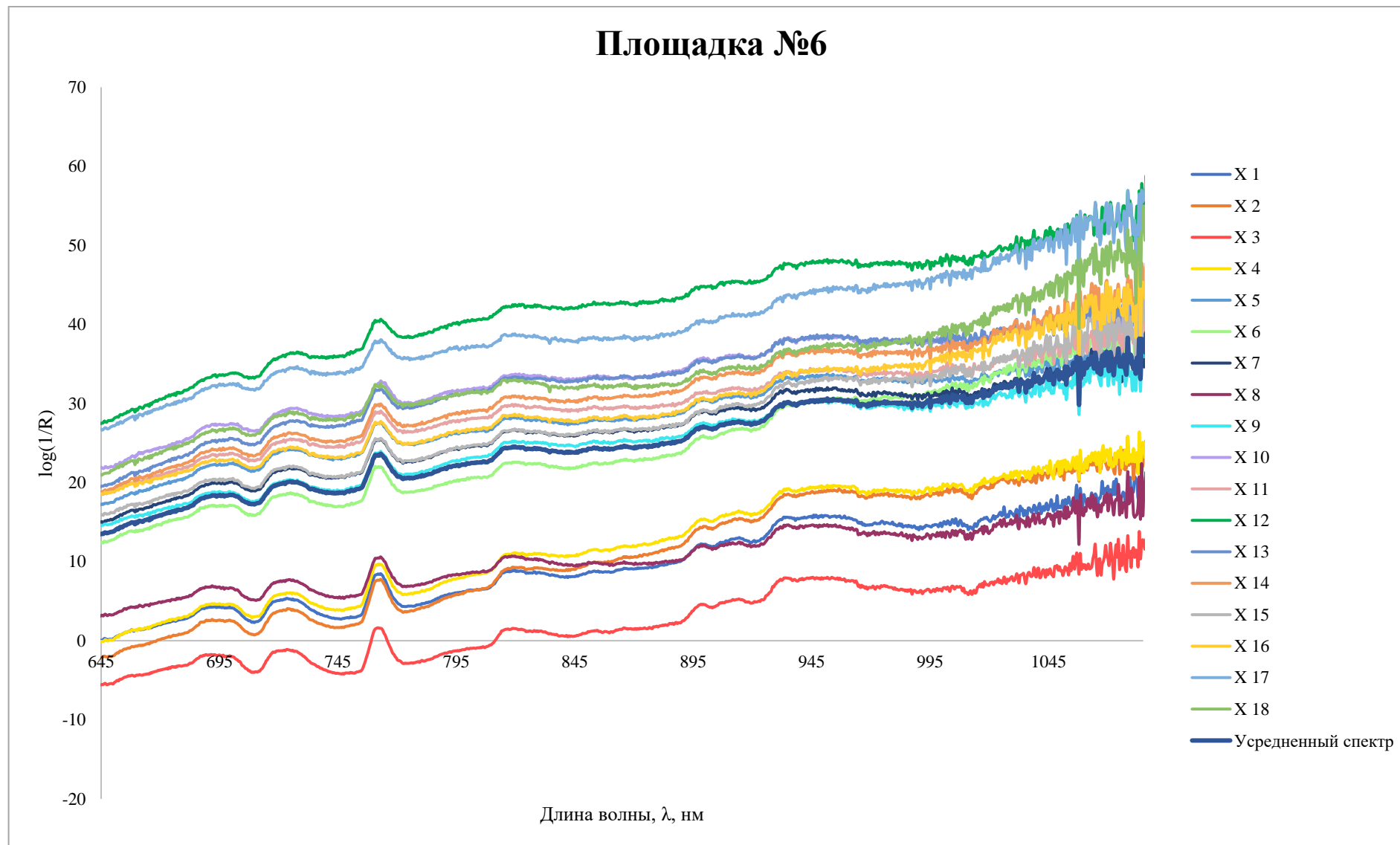


Рисунок 2.6. Спектральные характеристики образцов грунта площадки №6

**ПРИЛОЖЕНИЕ 3. СПЕКТРАЛЬНЫЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ДАННЫЕ ПО  
ПОВЕРХНОСТНЫМ ТОЧКАМ**

№ точки съемки	Концентрация нефтепродуктов, определенная по ПНД Ф 16.1:2.2.2.3.64-10, % масс.	Значение индекса НД'	Рассчитанная по индексу НД' концентрация нефтепродуктов, % масс.	Относительная погрешность, %
1	0,428	10,67	0,347	19,01
2	0,256	9,68	0,181	29,26
3	0,095	9,33	0,121	27,16
4	1,019	15,31	1,125	10,43
5	0,585	11,08	0,416	28,80
6	0,103	9,06	0,077	24,82
7	0,100	9,36	0,126	25,82
8	0,256	9,71	0,186	27,53
9	0,485	10,88	0,382	21,21
10	0,347	10,60	0,336	3,21
11	0,614	12,65	0,680	10,75
12	0,554	12,34	0,627	13,20
13	3,263	28,03	3,262	0,01
14	1,853	20,51	2,000	7,91
15	0,394	11,57	0,498	26,41
16	0,458	11,87	0,548	19,57
17	0,441	10,67	0,347	21,36
18	0,491	12,02	0,574	16,96
19	0,461	11,88	0,550	19,31
20	0,485	12,00	0,570	17,37
21	0,500	12,07	0,582	16,33
22	0,090	9,27	0,112	24,54
23	0,076	9,15	0,092	21,96
24	0,128	9,55	0,159	24,89
25	0,605	12,61	0,672	11,05
26	0,552	12,07	0,582	5,33
27	0,459	11,87	0,548	19,49
28	0,521	12,17	0,599	14,99
29	1,853	20,51	2,000	7,91
30	0,716	13,23	0,777	8,47
31	0,313	10,45	0,309	1,10
32	0,073	9,04	0,072	1,15
33	0,109	9,41	0,136	24,44
34	0,298	9,85	0,209	29,62
35	0,288	9,82	0,204	29,15
36	0,215	9,56	0,161	24,91
37	0,522	12,17	0,599	14,94
38	0,423	11,70	0,520	22,96
39	0,390	10,67	0,347	11,15
40	1,570	19,59	1,845	17,52
41	1,613	17,98	1,574	2,39
42	2,152	21,97	2,245	4,32
43	2,245	25,55	2,846	26,75
44	2,659	21,62	2,186	17,80
45	1,246	16,58	1,340	7,59
46	2,587	26,20	2,956	14,25
47	2,555	24,92	2,740	7,24
48	1,356	16,61	1,345	0,81
49	1,521	17,79	1,543	1,42
50	2,214	21,38	2,145	3,12
51	1,745	17,92	1,564	10,37
52	1,256	16,80	1,377	9,61
53	1,456	18,44	1,652	13,46
54	1,682	17,24	1,450	13,79

**ПРИЛОЖЕНИЕ 4. СПЕКТРАЛЬНЫЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ДАННЫЕ ПО  
ГЛУБИНЫМ ПРОБАМ**

№ скважины	Глубина, м	Концентрация нефтепродуктов, определенная по ПНД Ф 16.1:2.2.2:2.3.64-10, % масс.	Значение индекса HD'	Рассчитанная по индексу HD' концентрация нефтепродуктов, % масс.	Относительная погрешность, %
2	1	0,428	11,37	0,557	30,15
2	3	0,401	11,14	0,516	28,62
2	5	3,625	27,97	3,632	0,21
2	7	1,954	19,25	2,016	3,15
2	9	0,614	12,64	0,793	29,10
2	11	0,393	11,08	0,504	28,06
2	13	0,227	9,85	0,275	21,42
2	15	0,127	9,10	0,137	7,92
3	1	0,287	10,25	0,351	21,99
3	2	0,299	10,33	0,364	21,84
3	3	0,188	9,57	0,223	19,05
3	4	0,266	10,11	0,324	22,08
3	5	0,268	10,13	0,327	22,08
3	6	0,267	10,12	0,326	22,08
3	7	0,169	9,42	0,197	16,87
3	8	0,130	9,12	0,141	8,70
3	9	0,247	9,99	0,302	21,93
3	10	0,229	9,86	0,278	21,50
8	1	0,129	9,12	0,140	8,40
8	2	5,518	38,17	5,519	0,02
8	3	3,826	29,04	3,830	0,11
8	4	1,566	17,25	1,646	5,14
8	5	3,659	28,16	3,666	0,19
8	8	2,113	20,07	2,168	2,58
8	10	1,908	19,01	1,972	3,34
8	12	1,661	17,74	1,736	4,55
8	15	0,427	11,36	0,555	30,08
9	1	1,019	14,46	1,130	10,87
9	2	0,934	14,13	1,069	14,38
9	3	0,928	14,11	1,064	14,69
9	5	1,008	14,39	1,117	10,83
9	7	0,891	13,97	1,038	16,53
9	10	0,681	13,02	0,862	26,48
10	1	1,563	17,24	1,644	5,15
10	3	1,000	14,37	1,112	11,19
10	5	2,110	20,05	2,165	2,59
10	7	1,726	18,07	1,798	4,20
10	9	0,335	10,55	0,405	21,07
10	11	0,227	9,85	0,275	21,42
11	1	0,127	9,10	0,137	7,92
11	2	0,585	12,47	0,761	30,03
11	3	0,527	12,10	0,692	31,26
11	5	0,421	11,31	0,546	29,81
11	7	0,371	10,89	0,468	26,04
11	10	0,522	12,06	0,686	31,32
12	1	0,377	10,94	0,478	26,65
12	2	0,289	10,09	0,321	24,13
12	3	0,298	10,32	0,363	21,86
12	5	0,199	9,65	0,239	19,98
12	7	0,107	8,94	0,107	0,23
12	11	0,120	9,04	0,126	5,34
12	13	0,138	9,19	0,153	10,98
12	15	0,256	10,05	0,313	22,03
15	3	0,156	9,33	0,179	24,21
15	4	0,132	9,14	0,145	9,45

№ скважины	Глубина, м	Концентрация нефтепродуктов, определенная по ПНД Ф 16.1:2.2.2:2.3.64-10, % масс.	Значение индекса HD'	Рассчитанная по индексу HD' концентрация нефтепродуктов, % масс.	Относительная погрешность, %
15	5	0,208	9,71	0,250	20,54
15	6	0,349	10,54	0,403	15,29
15	7	0,543	12,21	0,712	31,01
15	8	3,788	28,84	3,792	0,13
15	9	1,566	17,25	1,646	5,14
15	10	3,136	25,40	3,155	0,60
16	1	1,893	18,93	1,957	3,40
16	2	0,924	14,09	1,061	14,89
16	3	0,136	9,17	0,150	10,35
16	4	0,119	9,03	0,124	4,81
16	5	0,285	10,24	0,348	22,01
16	8	0,325	10,46	0,388	19,29
16	10	0,421	11,31	0,547	29,83
16	12	1,010	14,40	1,118	10,74
16	15	1,302	15,90	1,397	7,26
18	1	0,201	9,66	0,241	20,12
18	2	0,245	9,97	0,298	21,88
18	3	0,227	10,09	0,321	41,51
18	4	0,223	9,82	0,271	21,30
18	5	0,214	9,76	0,259	20,90
18	8	0,190	9,59	0,227	19,29
18	10	0,222	9,81	0,269	21,25
18	12	0,290	10,27	0,353	21,96
18	15	0,231	9,88	0,281	21,57
19	1	0,246	9,98	0,299	21,90
19	2	0,305	10,26	0,351	14,96
19	3	0,368	10,86	0,462	25,68
19	4	0,439	11,45	0,573	30,55
19	5	0,487	11,82	0,640	31,44
19	8	0,563	11,08	0,504	10,40
19	10	0,348	10,68	0,429	23,19
19	12	0,485	11,81	0,638	31,44
19	15	0,246	9,61	0,231	6,15
21	1	0,456	11,59	0,598	31,05
21	2	0,606	12,59	0,784	29,38
21	3	0,767	13,44	0,940	22,56
21	5	1,247	14,57	1,149	7,82
21	7	1,252	14,41	1,121	10,43
21	10	0,840	13,76	1,000	19,02
22	1	1,000	14,37	1,112	11,19
22	3	1,054	14,64	1,162	10,32
22	5	0,440	11,46	0,575	30,60
22	7	0,281	10,22	0,343	22,04
22	9	0,162	9,38	0,188	15,95
22	11	0,347	10,66	0,426	22,97
24	1	0,356	10,75	0,442	24,24
24	2	0,431	11,39	0,561	30,26
24	3	0,493	11,86	0,648	31,46
24	4	0,549	12,24	0,718	30,91
24	5	0,583	12,46	0,758	30,08
24	8	0,608	12,60	0,786	29,32
24	10	0,564	12,34	0,736	30,58
24	12	0,552	12,26	0,722	30,85
24	15	0,529	12,11	0,694	31,24
25	1	0,511	11,99	0,671	31,42
25	3	0,524	12,08	0,688	31,30
25	5	0,500	11,91	0,657	31,46
25	7	0,125	9,09	0,134	7,20

№ скважины	Глубина, м	Концентрация нефтепродуктов, определенная по ПНД Ф 16.1:2.2.2:2.3.64-10, % масс.	Значение индекса HD'	Рассчитанная по индексу HD' концентрация нефтепродуктов, % масс.	Относительная погрешность, %
25	9	0,614	12,64	0,793	29,10
25	11	0,551	12,25	0,720	30,87
28	1	0,531	12,12	0,696	31,22
28	2	0,500	11,91	0,657	31,46
28	3	0,485	11,81	0,638	31,44
28	4	0,472	11,71	0,619	31,32
28	5	0,454	11,57	0,595	31,00
28	8	0,526	12,09	0,690	31,28
28	10	0,448	11,52	0,586	30,84
28	12	0,537	12,16	0,704	31,12
28	15	0,556	12,29	0,727	30,75
31	1	1,013	14,43	1,124	10,97
31	3	0,884	13,94	1,033	16,85
31	5	0,956	14,21	1,084	13,30
31	7	0,271	10,15	0,331	22,08
31	9	0,554	12,27	0,724	30,81
31	11	4,990	35,29	4,987	0,06
35	1	0,833	13,73	0,995	19,34
35	3	1,060	14,67	1,168	10,23
35	5	0,608	12,60	0,786	29,32
35	7	0,551	12,25	0,720	30,87
35	9	0,530	12,12	0,696	31,22
35	11	0,526	12,09	0,690	31,28
38	1	0,448	11,52	0,586	30,84
38	2	0,537	12,16	0,704	31,12
38	3	0,556	12,29	0,727	30,75
38	4	0,508	11,96	0,667	31,44
38	5	0,563	12,33	0,736	30,59
38	8	0,356	10,75	0,442	24,20
38	10	3,263	26,06	3,278	0,48
38	12	1,734	18,11	1,806	4,15
38	15	2,423	21,67	2,465	1,73
39	1	2,320	21,14	2,366	1,98
39	2	3,056	27,39	3,523	15,29
39	3	2,859	27,39	3,523	23,24
39	4	4,053	30,25	4,054	0,02
39	5	2,000	19,48	2,060	2,98
39	8	1,072	14,73	1,180	10,04
39	10	1,309	15,94	1,403	7,20
39	12	1,445	16,63	1,531	6,01
39	15	1,673	17,80	1,748	4,49
40	1	1,924	19,09	1,987	3,27
40	2	2,163	20,32	2,215	2,43
40	3	1,022	14,48	1,133	10,82
40	4	4,758	34,04	4,755	0,07
40	5	0,492	11,85	0,647	31,46
40	8	0,564	12,34	0,736	30,58
40	10	0,941	14,16	1,073	14,04
40	12	3,569	27,68	3,578	0,24
40	15	4,245	31,28	4,244	0,02
46	1	5,518	38,17	5,519	0,02
46	3	5,406	37,55	5,405	0,00
46	5	1,129	15,02	1,233	9,25
46	7	1,250	15,64	1,347	7,80
46	9	1,380	16,30	1,470	6,54

## ПРИЛОЖЕНИЕ 5. ПАТЕНТ РФ

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА  
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ

(19) **RU** (11) **2 827 683**<sup>(13)</sup> **C1**  
(51) МПК  
*G01V 8/00* (2006.01)

## (12) ОПИСАНИЕ ИЗОБРЕТЕНИЯ К ПАТЕНТУ

(52) СПК  
*G01V 8/00* (2024.08)

(21)(22) Заявка: 2023132097, 06.12.2023  
(24) Дата начала отсчета срока действия патента:  
06.12.2023  
Дата регистрации:  
01.10.2024  
Приоритет(ы):  
(22) Дата подачи заявки: 06.12.2023  
(45) Опубликовано: 01.10.2024 Бюл. № 28  
Адрес для переписки:  
443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244,  
СамГТУ, гл. корпус, УНИ сектор ПИИЛР

(72) Автор(ы):  
Бердникова Татьяна Владимировна (RU),  
Ермаков Василий Васильевич (RU)  
(73) Патентообладатель(и):  
Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего  
образования "Самарский государственный  
технический университет" (RU)  
(56) Список документов, цитированных в отчете  
о поиске: Т.В. Бердникова, В.В. Ермаков.  
Применение прямого спектрального  
зондирования при мониторинге почв  
техногенно-нагруженных территорий / Мат-  
лы XLVIII Самарской областной студенческой  
научной конференции. Том 1, СПб: ООО "Эко-  
Вектор", 2022, стр.322, 323. Т.В. Бердникова,  
В.В. Ермаков. Разработка методики прямого  
спектрального зондирования почв (см.  
прод.)

(54) Способ определения содержания фосфора в почве

(57) Реферат:

Изобретение относится к способам определения содержания фосфора в почве и может быть использовано, например, в сельском хозяйстве. Сущность: регистрируют данные спектрального зондирования в ближнем инфракрасном диапазоне в нескольких точках. Для каждой точки рассчитывают индекс, характеризующий содержание фосфора в почвенном покрове, по формуле  $K = \frac{I_{760} - I_{710}}{I_{760}}$ ,

где  $I_{760}$  - интенсивность отражения на спектральной полосе в районе длины волны 760

нм, Вт/кв.м,  $I_{710}$  - интенсивность отражения на спектральной полосе в районе длины волны 710 нм, Вт/кв.м. После этого из двух точек с минимальным и максимальным значениями рассчитанного индекса отбирают пробы почвы и определяют в них концентрации фосфора лабораторными методами. Строят калибровочный график "почвенный индекс - концентрация фосфора" и определяют уравнение калибровочной прямой, по которому рассчитывают содержание фосфора в почве. Технический результат: определение содержания фосфора в почве. 1 ил., 4 табл.

(56) (продолжение):

техногенно-нагруженных территорий / Безопасность техногенных и природных систем, 2021, N3, стр.55-63. Ф.Т. Казымова. Новый метод определения количества фосфора в увлажненной почве / Вестник Башкирского государственного аграрного университета, 2020, N2(54), стр.27-32.

## ПРИЛОЖЕНИЕ 6. АКТЫ И СПРАВКИ О ВНЕДРЕНИИ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

«Утверждаю»  
 ПРК, руководитель ИЛ ООО «УкуЛаб»,  
 к.х.н. доцент  
 Р.Н. Исмаилова/  
 «20» апреля 2026 г.

### АКТ

внедрения результатов научно-исследовательских разработок

г. Казань

«20» апреля 2026 г.

Настоящим актом подтверждаем, что сотрудниками Научно-аналитического центра промышленной экологии ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет» в лице: заведующего лабораторией, д.т.н. Ермакова Василия Васильевича, инженера Быковой Татьяны Владимировны, внедрены и используются в практической деятельности ООО «УкуЛаб» систематизированные массивы спектральных характеристик грунтов, полученные по результатам комплексных исследований образцов различного генезиса и степени антропогенного воздействия.

Массивы спектральных данных содержат репрезентативную информацию о спектральных характеристиках грунтов, включая образцы с различным уровнем содержания нефтепродуктов, а также грунты с выраженными изменениями агрохимических показателей, обусловленными техногенным и хозяйственным воздействием.

Сформированные массивы данных используются ООО «УкуЛаб» в качестве информационной базы при обработке и интерпретации результатов спектроскопических измерений, сопоставлении спектральных признаков с физико-химическими и агрохимическими характеристиками анализируемых образцов, а также при построении и верификации количественных моделей оценки загрязнения грунтов на основе спектральной информации. Разработанные однофакторные модели на основе спектральных индексов обеспечивают количественную оценку содержания фосфора с  $R^2 = 0,88$  и  $RMSE = 153,66$  мг/кг, содержания натрия - с  $R^2 = 0,78$  и  $RMSE = 609,36$  мг/кг. Для количественной оценки нефтяного загрязнения применяется модифицированный спектральный индекс  $ND^*$ , обеспечивающий определение содержания нефтепродуктов в диапазоне 0-30% масс. с высокой точностью (для диапазона 0-10 % масс. -  $R^2$  валидации  $\geq 0,982$ ,  $RMSE \leq 0,51\%$  масс.; для диапазона 10-30% масс. -  $R^2$  валидации  $\geq 0,917$ ,  $RMSE \leq 2,00\%$  масс.) и устойчивостью к вариациям свойств почвенно-грунтовой матрицы.

Внедрение полученных результатов обеспечило повышение объективности и достоверности количественной оценки уровня загрязнения грунтов, а также расширение методических возможностей организации при выполнении экологического мониторинга и лабораторных исследований.

От НЦПЭ ФГБОУ ВО «СамГТУ»:

Зав. лабораторией, д.т.н.  
Ермаков В.В.

Инженер  
Быкова Т.В.

От ООО «УкуЛаб»:

ПРК, руководитель ИЛ,  
 к.х.н. доцент Р.Н. Исмаилова



МИНОБРАЗОВАНИЯ РОССИИ  
 федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
 высшего образования  
 «Самарский государственный технический университет»  
 (ФГБОУ ВО «СамГТУ»)

ул. Молодогвардейская, 244, гл. корпус, г. Самара, 443100  
 Тел.: (846) 278-43-11, факс: (846) 278-44-00, e-mail: rector@samgtu.ru  
 ОКПО 02068396, ОГРН 1026301167683, ИНН 6315800040, КПП 631601001

## АКТ ВНЕДРЕНИЯ

результатов научно-исследовательских разработок

Материалы диссертационной работы Быковой Т.В. по теме «Система методов оперативной оценки биотопов для ликвидации последствий их загрязнения поллютантами» используются:

- в учебном процессе при проведении лекционных и практических занятий по курсу «Основы планирования и математической обработки результатов эксперимента», «Методы исследования и оценки экологической опасности объектов техносферы» и «Методы и приборы контроля окружающей среды»;

- в курсовом и дипломном проектировании при подготовке студентов по направлению 18.03.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии», 18.04.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии», 20.04.01 «Техносферная безопасность».

Заведующий кафедрой ХТПЭ,  
 д.т.н., профессор

О.В. Тупицына

Первый проректор - проректор по учебной  
 работе,  
 д.э.н., доцент



Д.Е. Овчинников