

Zatížení půd rizikovými prvky, včetně arsenu, bylo Výzkumným ústavem meliorací a ochrany půd v Praze V okolí Kaňku u Kutné Hory obsahují orniční horizonty zemědělských půd nadlimitní obsahy arsenu. V tabulce jsou uvedené stanovené obsahy As v půdě v okolí Kaňku (mg/kg). Utvoř histogram pro tato data. Při tvorbě histogramu užíjte funkci histogram v Analýze dat a nemusíte zadávat vlastní hranice.

nelze použít
šel by Kolr
 analýza dat/histogram
 histogram obsahu As v

lokality	As v půdě	ln(As)
1	246	
2	63.8	
3	56.2	
4	147	
5	35.8	
6	18.9	
7	25.4	
8	12	
9	31.3	
10	29.6	
11	34.6	
12	36.8	
13	98	
14	55.8	
15	51.6	
16	48.3	
17	38.6	
18	41.2	
19	34.8	
20	120	
21	39.2	
22	42.3	
23	34.3	
24	489	
25	12.4	
26	5.3	
27	18.9	
28	26.8	
29	29.7	
30	39.4	
31	138	
32	11.3	
33	18.4	
34	16.9	
35	28.3	
36	9.8	
37	13.6	

aritm průměr

střední hodnota

pomocí ln(As)
 geomean

vhodná
 vhodná

z tvaru 1. histogramu je
 tvar 1. histogramu odp
 tvar 2. histogramu pro

st dev. P (zákl.soubor)

⇒ sledováno v roce 1999.

a a posuď charakter rozdělení (otestuj, $\alpha = 5\%$).

ít Chi-kvdrát test

mogorov Smirnov test pro 1 výběr, ale není nejvhodnější

v půdě

7 int

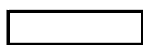
pro logaritmovaná data

analýza dat/histogram

histogram pro logaritmovaná data

hranice HH a první DH

Četnost HH slouč int



Ho přijmu, soubor $\ln(x)$ se chová po
a tedy soubor x se chová podle logn

⇒ patrné, že soubor dat nemá normální rozdělení pravděpodobností, nemůžu tedy jako střední hodnotu po
ovídá lognormálnímu rozdělení pravděpodobností - stanovím tedy střední hodnotu jako geometrický prům
logaritmovaná data odpovídá přibližně normálnímu rozdělení

lze použít Chi-kvadrát test (vhodnější tento přístup pro soubor dat s lognormálním rozdělením)

ln(As)	Chi-kvadrát test			
	Fo	fo	no	$(fo-no)^2/no$
ne (slouč int)				

dle normálního rozdělení
ormálního rozdělení

test krit
krit hodnota (k=5, s=2; 1- α ; 2)

užít aritmetický průměr
ěr





V tabulce máte mikrosondové analýzy granátu a jejich přepočtení na strukturní vzorec. Vyřešte substituční mechanismy v granátu. Nejprve spočítejte matici korelačních koeficientů, otestujte jejich významnost.

		TiO2	Cr2O3	CaO	FeO	MnO	Na2O	SiO2	Al2O3	MgO	K2O	P2O5	Y2O3
anal1	grt 2 profil1	0	0	0.19	34.9	7.7	0.03	36.1	20.5	0.09	0	0	0.53
anal2	grt 2 profil1	0	0	0.19	35.2	7.77	0.03	36.2	20.6	0.09	0	0.02	0.72
anal3	grt 2 profil1	0	0	0.22	35	7.95	0	36.4	20.6	0.09	0	0	0.8
anal4	grt 2 profil1	0	0	0.17	33.9	8.26	0.03	35.9	20.5	0.09	0	0	1.12
anal5	grt 2 profil1	0	0	0.2	33.3	9.08	0.05	36	20.6	0.08	0	0	0.89
anal6	grt 2 profil1	0	0	0.19	32.9	9.23	0.03	35.6	20.9	0.07	0	0	1.02
anal7	grt 2 profil1	0	0	0.16	32.2	9.99	0.03	35.4	20.8	0.06	0	0	1.12
anal8	grt 2 profil1	0	0	0.16	31.5	10.3	0.06	35	20.9	0.08	0	0	1.15
anal9	grt 2 profil1	0	0	0.17	31.6	9.72	0	35.1	20.9	0.06	0	0	1.36
anal10	grt 2 profil1	0	0	0.18	32.3	9.86	0.04	35.3	20.8	0.07	0	0	1.06
anal11	grt 2 profil1	0	0	0.2	32.3	9.56	0.03	35.4	20.8	0.09	0	0	1.12
anal12	grt 2 profil1	0	0	0.15	32.4	9.53	0.05	35.4	20.7	0.06	0	0	1.29
anal13	grt 2 profil1	0	0	0.19	33	9.26	0	35.7	20.7	0.08	0	0.02	0.93
anal14	grt 2 profil1	0	0	0.2	33.4	8.9	0.04	36.1	20.8	0.1	0	0.02	1.06
anal15	grt 2 profil1	0	0	0.18	33.8	8.38	0.04	36	20.8	0.1	0	0	0.98
anal16	grt 2 profil1	0	0	0.21	34.8	7.86	0.04	35.7	20.7	0.08	0	0	0.83
anal17	grt 2 profil1	0	0	0.2	35	7.73	0	35.9	20.6	0.08	0	0	0.61
anal18	grt 2 profil1	0	0	0.18	35.1	7.85	0	36.3	20.8	0.09	0	0	0.39

vytvořím matici korelačních koeficientů
Analýza dat/korelace (zadávej s popiskami)

Otestuji, které korelační koeficienty jsou statisticky významné: $H_0: r=0$
spočtu pro každý korelační koeficient velikost testovacího kritéria
utvořím matici testovacích kritérií

$$t = \frac{r}{\sqrt{1-r^2}} \sqrt{n-2}$$

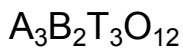
kritická hodnota stanovím kritickou hodnotu

pomocí funkce když rozhodnu, které koeficienty korelace jsou statisticky významné

korelací obsahu Mg s Mn a Si se nezabývám, protože obsahy i variabilita Mg jsou ve

Y, Mn, Al	-	Fe, Si
Fe ³⁺	-	Al

amnosti (hladina významnosti 1%) a poté navrhní vhodné substituční mechanismy.



	A-pozice						B-pozice		T-pozice	
	Na+	Ca+	Mg2+	Mn2+	Fe2+	Y3+	Al3+	Fe3+	P5+	Si4+
100	0.005	0.017	0.011	0.54	2.395	0.023	1.998	0.02	0	2.991
101	0.005	0.017	0.011	0.541	2.388	0.032	2	0.028	0.001	2.977
101	0	0.019	0.011	0.553	2.36	0.035	1.993	0.041	0	2.987
100	0.005	0.015	0.011	0.58	2.316	0.049	2.007	0.037	0	2.978
100	0.008	0.018	0.01	0.636	2.276	0.039	2.006	0.025	0	2.981
99.9	0.005	0.017	0.009	0.649	2.276	0.045	2.034	0.006	0	2.949
99.6	0.005	0.014	0.007	0.704	2.219	0.05	2.025	0.02	0	2.945
99	0.01	0.014	0.01	0.728	2.187	0.051	2.027	0.015	0	2.926
98.9	0	0.015	0.008	0.69	2.218	0.061	2.069	0	0	2.94
99.5	0.006	0.016	0.009	0.696	2.226	0.047	2.017	0.024	0	2.938
99.5	0.005	0.018	0.011	0.675	2.242	0.05	2.039	0.005	0	2.951
99.6	0.008	0.013	0.007	0.673	2.241	0.057	2.032	0.017	0	2.947
99.9	0	0.017	0.01	0.651	2.273	0.041	2.022	0.021	0.001	2.964
101	0.006	0.018	0.012	0.621	2.279	0.046	2.018	0.024	0.001	2.974
100	0.006	0.016	0.012	0.587	2.325	0.043	2.022	0.014	0	2.973
100	0.006	0.019	0.01	0.55	2.378	0.037	2	0.03	0	2.952
100	0	0.018	0.01	0.542	2.404	0.027	2.005	0.022	0	2.969
101	0	0.016	0.011	0.547	2.409	0.017	2.015	0.002	0	2.98

průměr
 Na+ Ca+ Mg2+ Mn2+ Fe2+ Y3+ Al3+ Fe3+ P5+ Si4+
 max
 min
 variačn
 prvky, které vykazují minimální variabilitu - u nich žádné substituce neřeším

x y $r=-0.98$ hlavní substituce - jednoduchá, homovalentní - substituční v
 0.983 směrnice substitučního vektoru = 1; 1 atom Mn nahradí 1 at

$$t = \frac{r}{\sqrt{1-r^2}} \sqrt{n-2}$$

$r=-0.78$ minoritní substituce - jednoduchá homovalentní $Fe^{III}Al^{III}_{-1}$ - n
 malá část Fe při přepočtu vychází jako trojmocné, a toto vst
 nemusíte znázorňovat do grafu substituční vektor

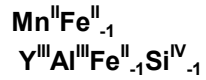
(větší než kritická hodnota) $r=0.983$ další důležitá substituce, řešící vstup Y do struktury granátu
 x y

elmi nízké

možné grafické vyjádření vstupu Y do granátu (ve vztahu k Si a Al);

lze vyjádřit substitučním vektorem: $Y^{III}Al^{III}Fe^{II}_{-1}Si^{IV}_{-1}$ (heterovalentní Y^{3+} vstupuje do pozice A za Fe^{2+} (musím zajistit elektroneutralitu) a (z grafů je patrné, že vstoupí atomů Y je ekvivalentní deficitu atomů Si

oba hlavní substituční mechanismy probíhají současně (proto je i korelace mezi obsahem Mn a ostatními prvky v YAGové s



tedy Y vstupuje více do granátu s vyšším obsahem spessartinové k

B pozice (suma kat) T-pozice suma kat A-pozice suma kat
Al³⁺+Fe³⁺ P+Si

nově tedy přebytek Al z
tyto skutečnosti dobře o
přebytek Al v pozici B

přebytek deficit vpořádku

í rozpětí (pro prvky, které vykazují variabilitu v koncentraci, se snažím najít vhodné substituční m

ektor Mn^{II}Fe^{II}₁₋₁ (vstup spessartinové komponenty do almandinového granátu)
om Fe

ezávislá a ostatních substitučních mechanisech
upuje do pozice B místo Al (silná negativní korelace mezi Fe³⁺ a Al)

x

y

AG-substituce) (Y pozitivně koreluje s obsahem Al a negativně s obsahem Fe a Si)
a společně s ním vstupuje část Al^{3+} do pozice T místo Si^{4+}
ši (T pozice), a současně nárůstu počtu atomů Al - směrnice jsou blízké 1)

substituci), i když každá funguje v jiné míře

komponenty (Mn)

pozice B (nad 2 atomy) přidám do pozice T
dpovídají YAGové substituci
T-pozice suma kat

vpořádku

echanismy)