Науки о Земле

МНОГОМЕРНАЯ ОЦЕНКА КАЧЕСТВА ВОДЫ С ПРИМЕНЕНИЕМ ЯМР-СПЕКТРОСКОПИИ В ПРИРОДНО-ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

Сарапульцев Б.И., Гаврилов С.В., Бочарников В.А.
Южно-Уральский государственный университет, Челябинск

Проблема оценки качества воды при нормировании и геоэкологическом мониторинге природно-технических систем (прежде всего озер и водохранилищ) в условиях их интенсивного техногенного загрязнения в настоящее время приобретает особую остроту и практическую значимость. Антропогенный фактор в формировании химического состава и биологического разнообразия водных экосистем становится по значимости в один ряд с природными геохимическими и биологическими процессами. Адекватное решение подобной задачи возможно на основе анализа массива геоэкологических данных по максимально доступному количеству унифицированных параметров тестируемых водных природно-технических систем с применением методов многомерной статистики и ЯМР–релаксации воды (Гаврилов, Сарапульцев, 2003; 2004; 2005).

В настоящей работе проведено исследование глубоководного озеро Тургояк с исключительно чистой водой, оз. Увильды (природный памятник России) и оз. Большое Миассово, расположенного на территории Ильменского Государственного заповедника, а так же находящихся в черте крупного промышленного центра оз. Смолино и оз. Первое, окруженных сетью крупных промышленных предприятий и являющихся фактически «очистными» сооружениями г. Челябинска. Третьим типом природно-технических систем явилось вдх. Шершни как основной источник питьевой воды для миллионного города.

При многомерном кластерном, факторном и дискриминантном анализе использовали следующие гидрологические, гидрохимические и гидробиологические параметры: прозрачность, pH, O_2, минерализация, концентрации ионов Cl, SO_4, CO_3, NH_4, NO_3, NO_2, $P_{мин}$, $P_{общ}$, Fe, Cu, Zn, Si, Cr, а так же СПАВ, нефтепродукты, $БПК_5$, фитомасса планктона. При экспресс-анализе содержания биоорганических соединений в образцах воды нами впервые в геоэкологических исследованиях была использована редко применяемая в ЯМР-спектроскопии методика ЯМР-релаксации, позволяющая избежать концентрирования образцов, повысить точность и воспроизводимость измерений.

Экспериментально определенное время релаксации (T_1) проб воды оз. Смолино равно 1,950 с; оз. Первое - 1,872 с.; вдх. Шершни -1,828 с; оз. Б. Миассово – 1,691 с; оз. Тургояк – 1,695 с; оз. Увильды – 1,690 с. Таким образом, сигнал ЯМР-релаксации достоверно ниже ($P < 0,001$) у озер с высоким геоэкологическим статусом (оз. Увильды, оз. Тургояк, оз. Б Миассово) по сравнению с объектами, загрязненными в результате интенсивного техногенного использования, (оз. Смолино и оз. Первое), а также вдх. Шершни.

Корреляционный анализ между параметрами ЯМР-релаксации и унифицированными данными Госкомгидромета по Челябинской области показал следующие коэффициенты: прозрачность (-0,59), pH (0,52), O_2 (– 0,70), минерализация (0,76), Cl (0,68), SO_4 (0,71), CO_3 (- 0,74), NH_4 (0,38), NO_3 (0,49), NO_2 (-0,10), $P_{мин}$ (0,24), $P_{общ.}$ (0,32), СПАВ (-0,43), $P_{мин}$;(-0,03), $БПК_5$ (0,56), фитомасса планктона (0,76), Fe (-0,02), Cu (0,18), Zn (-0,43), Si (- 0,68), Cr (-0,48). При этом четко выделяется отрицательная корреляционная зависимость с концентрацией O_2, а так же положительные корреляционные связи с минерализацией, концентрацией сульфат-ионов, бикарбонатов, $БПК_5$ и фитомассой планктона. Подобные корреляционные связи однозначно свидетельствуют о высокой информативности метода ЯМР-релаксации для оценки геоэкологического статуса и, особенно, биоорганических компонентов природно-технических систем. Однако метод ЯМР имеет существенный недостаток, поскольку нуждается в наличии дорогостоящего оборудования и предъявляет исключительно высокие требования к уровню профессиональной подготовленности персонала.

Многомерный кластерный анализ по 21–му унифицированному показателю качества воды четко выделяет две контрастные группы природно - технических систем: оз. Смолино и оз. Первое – с низким геоэкологическим статусом, и оз. Б Миассово, оз. Тургояк и оз. Увильды с высоким геоэкологическим статусом. Дистанция между контрастными водоемами равна 480 единиц. Результаты факторного анализа были принципиально схожими, выделяя по изменению объяснимой дисперсии три группы водоемов: фактор 1 (оз. Смолино, оз. Первое), фактор 2 (вдх. Шершни), фактор 3 (оз. Увильды, оз. Тургояк, оз. Б.Миассово).

С помощью многомерного дискриминантного анализа рассчитаны весовые коэффициенты для каждого тестируемого параметра, позволяющие оптимальным образом разделить контрастные группы водоемов и количественно оценить дискриминантную функцию в виде: $DF(x_i) = k_1x_1 + k_2x_2 + ... k_{14}x_{14}$, где $k_1 ..... k_{14}$ - коэффициенты дискриминантной функции, а $x_1 ..... x_{14}$ - экспериментальные значения параметров. В случае исследованных нами природно-технических систем Южного Урала получены следующие значения дискриминантной функции:

оз. Первое - (умеренно загрязненное – III класс качества воды) - $DF(x_i) = 1,15$;

оз. Смолино - (умеренно загрязненное – III класс качества воды) - $DF(x_i) = 1,79$;

оз. Тургояк - (чистое – II класс качества воды) - $DF(x_i) = 11,62$;

оз. Б. Миассово - (чистое – II класс качества воды) - $DF(x_i) = 12,30$;

оз. Увильды (чистое – II класс качества воды) - $DF(x_i) = 12,81$.

При анализе значений дискриминантной функции видно, что различие между контрастными по геоэкологическому статусу озерами достигают 10-тикратных величин. Значение дискриминантной функции для вдх. Шершни (водоема с «неопределен-

ным» геоэкологическим статусом) равно 5,27, т.е. находится примерно в промежуточном положении. Использованный нами метод многомерного дискриминантного анализа позволяет потенциально оценить экологический статус практически любого водоема при наличии информации о 14-ти указанных выше параметрах. При снижении точности оценки дискриминантной функции примерно на 10% можно исключить из анализа такие трудоемкие для определения показатели, как NO_3, NO_2, $P_{общий}$ и Cr, что упростит процедуру тестирования водоемов и, как минимум, окажется приемлемым в качестве экспресс-оценки мало исследованных природных водоемов.

Полученные в настоящей работе результаты многомерного анализа озерных экосистем открывают принципиально новые возможности для качественной и количественной оценки природных водоемов с использованием кластерного, факторного и дискриминантного анализа, ЯМР-спектроскопии биоорганических соединений. Нам представляется, что в настоящей работе реализован принципиально новый подход к решению одной из актуальных проблем в области геоэкологического нормирования и мониторинга сложных природно-технических систем.