

УДК 556.531

ФАКТОРНЫЙ АНАЛИЗ ДИНАМИКИ ГИДРОХИМИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ

Евдокимова О.Ю.

ФГБОУ ВПО «Поволжский государственный технологический университет»,
Йошкар-Ола, e-mail: engineer_87_87@mail.ru

Для снижения количества показателей и упрощения контроля предложена методика выбора приоритетных параметров качества речной воды. Приведены полная и частные корреляционные матрицы гидрохимических и микробиологических показателей проб речной воды из водозабора города Йошкар-Олы. Данные лабораторного анализа были получены из Аналитического центра контроля качества вод МУП «Водоканал». Показаны краткие методики факторного анализа и оценки адекватности выявленных закономерностей. Методика факторного анализа позволяет получить модели взаимного влияния факторов в виде показателей загрязнения речной воды. Оценка достоверности моделей проводится по критерию Фишера. Математическим моделированием выявлена общая биотехническая закономерность бинарных отношений между показателями загрязнения. По рейтингу определены сильные и слабые факторные связи и найдены шесть сильнейших связей, которые возникают при взаимодействии гидрохимических показателей.

Ключевые слова: проба воды, гидрохимический анализ, корреляционная матрица, модели

FACTOR ANALYSIS OF THE HYDROCHEMICAL INDICES DYNAMICS

Evdokimova O.Y.

Volga State Technological University, Yoshcar-Ola, e-mail: engineer_87_87@mail.ru

The paper under discussion covers the area of chemical engineering and deals with a problem of river water contaminating. Selection methods for quantity reduction of indicators and control simplification which are based on the factor analysis method of priority parameters of river water quality are recommended. Its key idea is to introduce methods of the cross-impact analysis of pollution indices as individual factors. Complete and partial correlation matrices of hydrochemical and microbiological indices of river water samples from water abstraction of Yoshcar-Ola are presented. Laboratory analysis data are obtained from the Analytical Center of Water Quality Control of MUP «Water canal». Factor analysis methods and adequacy estimation revealed patterns are shown in brief. General biotechnical pattern of binary relation between pollution index are revealed by mathematical modeling. Strong and weak factor connecting links by ranking and six strongest bonds arising from the interaction between hydrochemical indicators are determined.

Keywords: water sample, hydrochemical analysis, correlation matrix, models

Известно, что источником загрязнения водных объектов является сброс сточных вод с территории промышленных предприятий с химическими производствами. Поэтому проводится контроль ее качества, прежде всего, в системах хозяйственно-питьевого водоснабжения. Методы определения показателей гидрохимического анализа, с помощью которых можно оценить качество воды, подробно рассматриваются в работе [8].

Гидрохимический анализ устанавливает состав загрязнения [1] и позволяет принять меры по снижению загрязненности. Для определения соотношений между показателями загрязнения речной воды применяется факторный анализ [3, 7].

Цель статьи – показать методику факторного анализа для изучения взаимосвязей между гидрохимическими показателями на примере результатов испытаний речной воды на загрязнение в месте водозабора реки Малая Кокшага города Йошкар-Олы.

Материалы и методы исследования

В табл. 1 приведен фрагмент данных гидрохимического и микробиологического анализа, полученных из Аналитического центра контроля качества

вод МУП «Водоканал» г. Йошкар-Олы на загрязнение реки Малая Кокшага за 15 месяцев.

За период с июня 2009 по август 2010 года нами проведен поисковый анализ для выявления взаимного влияния факторов в виде показателей загрязнения речной воды. В дальнейшем с увеличением количества наблюдений можно выявить сезонные изменения параметров речной воды.

Программой наблюдений за качеством поверхностного водисточника реки Малая Кокшага предусмотрено определение 46 параметров по физическим, бактериологическим и химическим показателям. Для факторного анализа нами отобрано 28 из-за неопределенности числовых значений показателей (напр., значения для ртути составляют < 0,00004 мг/л за весь период наблюдений).

Периодичность проведения лабораторного анализа – ежемесячно, поэтому каждая строка соответствует одной дате измерений.

Из известных методов факторного анализа (метод главных компонент, корреляционный анализ и метод максимального правдоподобия) нами применяется корреляционный анализ. При этом мы переходим на методологию эвристической, структурной и параметрической идентификации устойчивых законов [5].

Расчет описательной статистики [4] позволил установить, что по гидрохимическим показателям речной воды придется отказаться от вычисления средних арифметических значений и выявлять биотехнические закономерности [2, 3, 6, 7] по динамике загрязнения. Например, нельзя разрешать замену

15 членов ряда цветности речной воды средним арифметическим значением $\bar{x} = 23,27$ градуса, так как не

соблюдается условие допустимости коэффициента вариации $V_{\sigma} = 355,80 \gg [V_{\sigma}] = 30\%$.

Таблица 1
Результаты гидрохимического анализа (фрагмент) проб речной воды

Дата отбора проб речной воды	Органолептические показатели:		Обобщенные показатели:									
	Цветность, градус	Мутность, мг/л	pH	Сухой остаток, мг/л	Жесткость общ, градус	Щелочность, мг/л	Окисляемость, мгО/л	БПК-полное, мгО/л	Взвешенные вещества, мг/л	АПАВ, мг/л	Нефтепродукты, мг/л	Фенольный индекс, мг/л
24.06.09	26	3,5	8,1	221	4,0	115,9	7,3	4,1	3,2	0,067	0,015	0,0006
08.07.09	17	2,4	8,2	214	3,6	109,8	5,5	2,6	2,1	0,060	0,015	0,0016
04.08.09	19	2,2	7,9	215	3,7	106,8	6,1	2,3	2,1	0,054	0,019	0,0020
02.09.09	18	1,2	8,0	229	4,2	103,7	6,4	1,3	1,0	0,052	0,007	0,0005
05.10.09	19	0,76	8,1	207	3,9	112,9	6,6	1,0	0,7	0,052	0,009	0,0005
11.11.09	15	2,2	7,9	220	4,0	106,8	5,1	2,3	2,5	0,015	0,010	0,0013
02.12.09	11	1,2	8,0	252	4,5	115,9	4,0	1,1	1,0	0,030	0,009	0,0005
20.01.10	10	2,0	7,6	280	4,9	137,3	4,0	2,1	3,0	0,024	0,019	0,0016
03.02.10	10	3,5	7,3	286	4,9	137,3	3,3	3,3	3,4	0,016	0,017	0,0007
29.03.10	8	2,2	7,6	259	4,6	131,2	2,9	2,2	3,0	0,031	0,017	0,0010
05.04.10	100	19,5	7,7	138	2,1	54,9	13,6	18,0	19,3	0,071	0,025	0,0011
05.05.10	27	5,9	8,3	192	3,5	94,6	5,7	5,9	5,8	0,060	0,021	0,0013
02.06.10	18	3,9	7,9	215	3,9	112,9	6,1	4,0	3,7	0,039	0,018	0,0008
14.07.10	25	1,2	7,9	226	3,7	112,9	5,6	1,2	1,2	0,041	0,013	0,0021
10.08.10	26	1,3	7,9	217	4,0	119,0	6,5	1,2	1,1	0,041	0,023	0,0015

Результаты исследования и их обсуждение

Из 28 факторов (цветности, мутности, рН, концентрации железа, меди) составлена

полная корреляционная матрица монарных (ранговых) и бинарных связей и получено $28^2 = 784$ биотехнических закономерностей, адекватность которых показана значениями коэффициента корреляции (табл. 2).

Таблица 2
Корреляционная матрица полного факторного анализа (фрагмент)

Влияющие факторы x	Зависимые факторы									
	Цветность, градус	Мутность, мг/л	pH	Сухой остаток, мг/л	Жесткость общ, градус	Щелочность, мг/л	Окисляемость, мгО/л	БПК-полное, мгО/л	Взвешенные вещ-ва, мг/л	АПАВ, мг/л
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Цветность, градус	0,9564	0,9593	0,7414	0,9120	0,9282	0,8923	0,9645	0,9506	0,9556	0,7680
Мутность, мг/л	0,9629	0,9428	0,2009	0,6712	0,7766	0,8133	0,8571	0,9988	0,9964	0,4572
pH	0,0246	0,1600	0,9977	0,5054	0,3706	0,3524	0,1685	0,1410	0,2063	0,5890
Сухой остаток, мг/л	0,9810	0,9574	0,8604	0,9482	0,9660	0,9299	0,9411	0,9500	0,9464	0,7205
Жесткость общ, град	0,9827	0,9572	0,6824	0,9766	0,9807	0,9416	0,9257	0,9491	0,9479	0,7618
Щелочность, мг/л	0,9702	0,9605	0,3349	0,9441	0,9414	0,9788	0,9107	0,9519	0,9526	0,7618
Окисляемость, мгО/л	0,9868	0,9560	0,7597	0,9005	0,8937	0,8810	0,8641	0,9467	0,9335	0,7883
БПК-полное, мгО/л	0,9641	0,9993	0,1382	0,6799	0,7819	0,8169	0,8592	0,9147	0,9953	0,4803
Взв-ые вещ-ва, мг/л	0,9608	0,9966	0,2690	0,6780	0,7666	0,8047	0,8563	0,9942	0,9155	0,4314
АПАВ, мг/л	0,7558	0,8430	0,6219	0,7743	0,7737	0,6523	0,7592	0,8295	0,8260	0,9922
Нефтепродукты, мг/л	0,7740	0,8268	0,2778	0,5395	0,6851	0,6178	0,4441	0,7948	0,9113	0,4017
Фенол. индекс, мг/л	0,0461	0,0243	0,0420	0,1310	0,2503	0,0392	0,0124	0,0309	0,0088	0,0141
Аммоний сол., мг/л	0,9541	0,9588	0,5834	0,0092	0,1266	0,0973	0,3467	0,9477	0,9568	0,0377

Окончание табл. 2

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Нитрит-ион, мг/л	0,9593	0,9565	0,2074	0,6941	0,8097	0,8068	0,8576	0,9461	0,9549	0,5741
Нитрат-ион, мг/л	0,0334	0,2168	0,5611	0,2251	0,0871	0,1020	0,1195	0,2047	0,2547	0,2461
Сульфат-ион, мг/л	0,2648	0,4582	0,5398	0,2536	0,1371	0,0792	0,0788	0,4043	0,4401	0,3239
Фосфат-ион, мг/л	0,4924	0,3039	0,2920	0,4421	0,4617	0,3356	0,4725	0,2923	0,2830	0,4949
Хлорид-ион, мг/л	0,8304	0,8586	0,1095	0,6671	0,6559	0,6653	0,6272	0,8507	0,8531	0,2448
Железо, мг/л	0,9596	0,9770	0,2370	0,6682	0,7594	0,7960	0,8563	0,9679	0,9747	0,4245
Калий+Натрий, мг/л	0,6962	0,9762	0,0381	0,1565	0,0381	0,1555	0,2577	0,9715	0,9730	0,0172
Кальций, моль/л	0,9899	0,9306	0,8545	0,9416	0,9342	0,8978	0,9662	0,9186	0,9193	0,7939
Магний, мг/л	0,8341	0,9532	0,1997	0,8134	0,8857	0,8793	0,6806	0,9275	0,9279	0,4839
Марганец, мг/л	0,0978	0,2673	0,8916	0,6073	0,4927	0,4705	0,3563	0,2525	0,3132	0,5362
Медь, мг/л	0,0334	0,0874	0,4789	0,2757	0,2621	0,2200	0,2158	0,0147	0,1168	0,6113
Цинк, мг/л	0,2466	0,2099	0,2206	0,1937	0,1866	0,1646	0,3738	0,2435	0,1966	0,4826
ОМЧ в 1 мл	0,6622	0,4963	0,5116	0,6095	0,6550	0,5138	0,6784	0,4778	0,4480	0,7199
ОКБ в 100 мл	0,7928	0,8101	0,3212	0,3641	0,7502	0,7013	0,5920	0,0000	0,7990	0,2223
ТКБ в 100 мл	0,8505	0,8987	0,4094	0,6429	0,6921	0,7197	0,6475	0,8754	0,9008	0,1380
Сумма	19,0629	19,9427	12,3821	16,2248	17,049	16,3249	16,6898	18,7474	19,9075	13,5176
Рейтинговое место	4	1	18	11	7	9	8	5	2	14

Все эколого-химические реакции, происходящие с различными видами загрязнения в речной воде, дают по показателю концентрации одну и ту же общую математическую закономерность

$$y = a_1 x^{a_2} \exp(-a_3 x^{a_4}), \quad (1)$$

где y – зависимый фактор; x – влияющий фактор; a_1, \dots, a_4 – параметры биотехнической закономерности (1).

Например, на мутность речной воды цветность оказывает влияние по закону экспоненциального роста (рис. 1)

$$\text{Мутность} = 1,73351 \exp(0,0099632 \text{Цветность})^{1,19276} \quad (2)$$

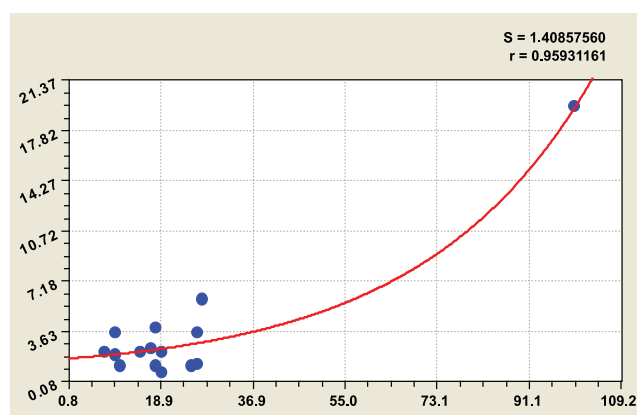


Рис. 1. Влияние цветности (абсцисса) на мутность (ордината) в речной воде

По формуле (2) минимальное содержание мутности в речной воде составляет 1,73 мг/л.

Анализ адекватности моделей выполняется сравнением фактического $F_{\text{ф}}$ и табличного (критического) $F_{\text{крит}}$ значений критерия

$$\text{Сухой остаток} = 232,90014 \cdot \exp(-0,00086352 \cdot \text{взв. вещества}). \quad (3)$$

Табличное критическое значение критерия Фишера равно 4,67 для полученной однофакторной модели при степенях свободы для расчета фактического критерия Фишера $k_1 = n - m - 1 = 15 - 1 - 1 = 13$ и $k_2 = m = 1$.

Фишера [4]. Чем больше фактическое значение F -критерия, тем выше адекватность и достоверность модели.

Так, концентрация взвешенных веществ влияет на концентрацию сухого остатка в речной воде по модели (3)

Фактическое значение критерия Фишера равно 11,12 по формулам [4]. Так как $F_{\text{ф}} = 11,12 > F_{\text{крит}} = 4,67$, то готовая модель (3) считается статистически достоверной.

Для определения наиболее сильных факторных связей, которые возникают при взаимодействии гидрохимических показателей, по связности показателей получили рейтинговые места (табл. 2).

Среди влияющих факторов по рейтингу первое место занимает кальций. На втором

месте находится окисляемость и на третьем – жесткость воды. Фенольный индекс получил последнее 28-е место.

Уравнение рейтинга влияющих параметров (рис. 2) следующее:

$$\Sigma R_x = 17,64006 \exp(-0,00015014 I_x^{2,66827}). \quad (4)$$

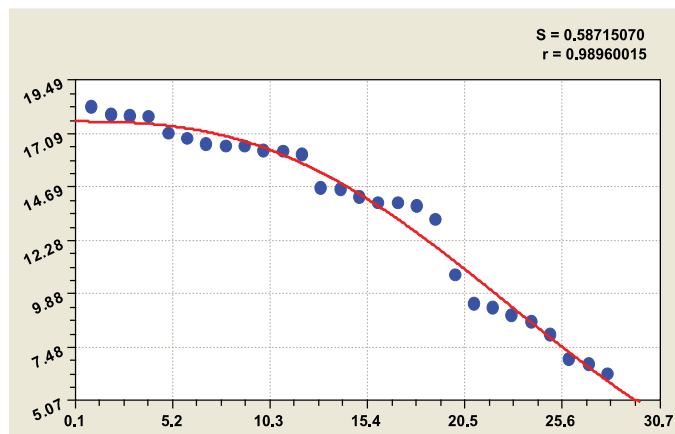


Рис. 2. Влияющие факторы по сумме коэффициентов корреляции из табл. 2

Среди зависимых показателей сильные факторные связи дают мутность, взвешенные вещества и железо. Фенольный индекс также получил 28-е место.

Для оценки параметрической связности получено три критерия: количество формул, строк и столбцов, так как

закономерности динамики требований к адекватности 756 формул дают снижение числа закономерностей, а также строк и столбцов корреляционной матрицы (см. табл. 2).

Влияние принимаемого уровня адекватности на количество формул:

$$N_f = 775,58242 \exp(-1,46362 [R]) - 8,55266 \exp(3,02963 [R]). \quad (5)$$

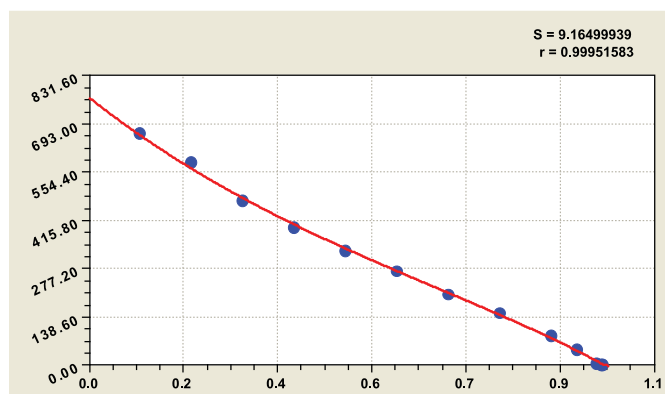


Рис. 3. Влияние принимаемого уровня адекватности на количество уравнений

С повышением требований к адекватности по росту значений допустимого уровня коэффициента корреляции $[R]$ число оставшихся уравнений сокращается (рис. 3). При этом количество слабых факторных связей при коэффициентах $[R] = 0,1 \dots 0,3$ равно 284 шт.

Влияние уровня адекватности на количество строк корреляционной матрицы следующее (рис. 4):

$$N_{\leftrightarrow} = 27,43459 \exp(-2,43801 [R]^{17,10667}). \quad (6)$$

Влияние уровня адекватности на количество столбцов такое (рис. 5):

$$N_{\downarrow} = 28,00812 \exp(-2,39309 [R]^{7,75985}). \quad (7)$$

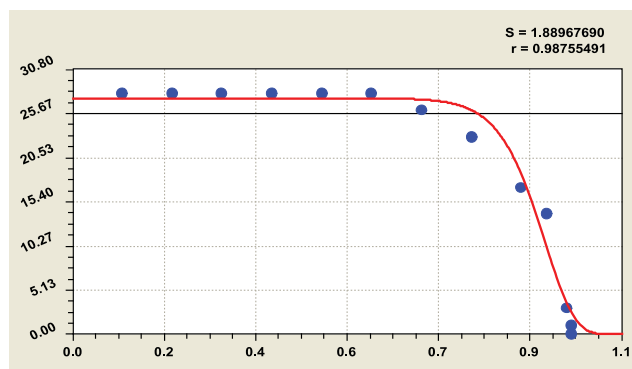


Рис. 4. Влияние уровня адекватности [R] на количество строк $N \leftrightarrow$

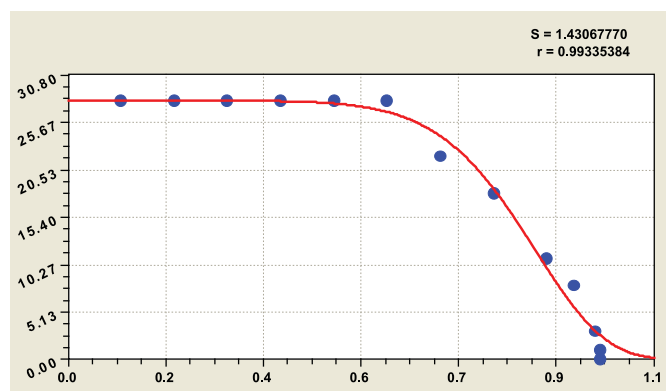


Рис. 5. Влияние уровня адекватности [R] на количество столбцов $N \downarrow$

Для анализа бинарных закономерностей убрали монарные отношения между учетными факторами по ранговым распределениям. На иерархии ранговых распределений выполняется оценка добротности исходных данных. На первом месте по добротности измерений находятся водородный показа-

тель и магний, а на последнем – окисляемость и хлорид-ион.

Последовательно исключив клетки с малыми коэффициентами корреляции, получили бинарные закономерности, которые в наибольшей степени удовлетворяют точности гидрохимического анализа речной воды (табл. 3).

Таблица 3

Матрица параметров биотехнической закономерности (1) по сильнейшим бинарным факторным отношениям при $R \geq 0,00$

Структура влияния	Модель				Коэффициент корреляции R
	составляющая модели				
	a_1	a_2	a_3	a_4	
1. БПКл → мутность	7,42235e-7	0	14,10434	0,066314	0,9993
2. Мутность → БПКл	1,15036e-8	0	18,43843	0,046555	0,9988
3. Взв. вещ-ва → мутность	8,59608e-5	0	9,45363	0,089816	0,9966
4. Мутность → взв. вещ-ва	2,7928044e-5	0	10,61310	0,079639	0,9964
5. БПКл → взв. вещ-ва	0,0005549	0	7,56858	0,11182	0,9953
6. Взв. вещ-ва → БПКл	1,0092391e-5	0	11,66172	0,071147	0,9942

Для компактной записи выявленных биотехнических закономерностей применяется матричная форма представления (см. табл. 3). Значения расположены по убыванию коэффициента корреляции.

Приведенных шести закономерностей достаточно, чтобы составить математиче-

скую модель для расчетного обоснования. Для расширения математической модели к табл. 3 добавляются другие из моделей при $R \geq 0,95$, а при необходимости – с уровня $R \geq 0,9$ (сильные факторные связи).

Слабейшие факторные связи (интервал коэффициента корреляции 0,000...0,100)

в частности возникают при взаимодействии с фенольным индексом, концентрациями меди, фосфат-иона, калия и натрия.

Заключение

Предложенная методика факторного анализа позволяет получить модели взаимного влияния факторов в виде показателей загрязнения речной воды. Оценка достоверности моделей проводится по критерию Фишера.

В дальнейшем при увеличении количества наблюдений факторный анализ позволит определить не только наиболее значимые факторные связи в виде биотехнических закономерностей, но и проводить мониторинг качества воды с учетом сезонной динамики гидрохимических показателей.

Список литературы

1. Гидрохимические показатели состояния окружающей среды: справочные материалы [Электронный ресурс] / Т.В. Гусева, Я.П. Молчанова, Е.А. Заика и др. // Эколайн. – 2000. – URL: <http://www.ecoline.ru/mc/refbooks/hydrochem/index.html> (дата обращения 09.11.2011).
2. Евдокимова О.Ю. Способ испытания загрязнения речной воды по показателю времени роста корней растения // Успехи современного естествознания. – 2011. – № 1. – С. 27–35. – URL: www.rae.ru/use/?section=content&op=show_article&article_id=7785737 (дата обращения: 09.11.2011).
3. Лебедева М.И. Факторный анализ загрязняющих веществ пруда-накопителя ОАО «ТГК-5» // Охр. и защита, обустр., индикация и тестир. природной среды: сб. статей. – М.: Академия Естествознания, 2010. – С. 327–332.
4. Мазуркин П.М. Биотехнический закон и адекватность готовой модели // Успехи современного естествознания. – 2009. – № 9. – С. 130–137. – URL: www.rae.ru/use/?section=content&op=show_article&article_id=7784076 (дата обращения 29.11.2011).
5. Мазуркин П.М. Биотехнический принцип и устойчивые законы распределения // Успехи современного естествознания. – 2009. – № 9. – С. 93–97. – URL: www.rae.ru/use/?section=content&op=show_article&article_id=7784060 (дата обращения 29.11.2011).
6. Мазуркин П.М., Евдокимова О.Ю. Способ испытания загрязнения воды по времени роста корней растения: патент России №2402765. 2010. Бюл. №30.
7. Мазуркин П.М., Тойшева Н.П. Факторный анализ химических веществ почвы // Охр. и защита, обустр., индикация и тестир. природной среды: сб. статей. – М.: Академия Естествознания, 2010. – С. 153–157.

8. Фомин Г.С. Вода. Контроль химической, бактериальной и радиационной безопасности по международным стандартам: энциклопедический справочник. – 3-е изд., перераб. и доп. – М.: Изд-во «Протектор», 2000. – 848 с.

References

1. Guseva T.V., Molchanova Ja.P., Zaika E.A., Vinichenko V.N., Averochkin E.M., Ecoline, 2000, available at: www.ecoline.ru/mc/refbooks/hydrochem/index.html (accessed 9 November 2011)
2. Evdokimova O.Ju., Advances in current natural sciences, 2011, no. 1, pp. 27–35, available at: www.rae.ru/use/?section=content&op=show_article&article_id=7785737 (accessed 09 November 2011)
3. Lebedeva M.I. Faktornyj analiz zagrjaznjajushhikh veshhestv pruda-nakopitelja ОАО «ТГК- 5» // Okhr. i zashhita, obustr., indikacija i testir. prirodnoj sredy. Sb. statejj. – М.: Akademiya Estestvoznaniya, 2010. pp. 327–332.
4. Mazurkin P.M., Advances in current natural sciences, 2009, no. 9, pp. 130–137, available at: www.rae.ru/use/?section=content&op=show_article&article_id=7784076 (accessed 29 November 2011)
5. Mazurkin P.M., Advances in current natural sciences, 2009, no. 9, pp. 93–97, available at: www.rae.ru/use/?section=content&op=show_article&article_id=7784060 (accessed 29 November 2011)
6. Ohrana i zavita, obustrojstvo, indikacija i testi-rovanie prirodnoj sredy. Sbornik statej studentov, aspirantov i prepodavatelej [Environment conservation and protection, construction, indication and testing]. Moscow, Academy of Natural History, 2010, 357 p.
7. Mazurkin P.M., Tojjsheva N.P. Faktornyj analiz khimicheskikh veshhestv pochvy // Okhr. i zashhita, obustr., indikacija i testir. prirodnoj sredy. Sb. statejj. М.: Akademiya Estestvoznaniya, 2010. pp. 153–157.
8. Fomin G.S. Voda. Kontrol' himicheskoy, bakterial'noj i radiacionnoj bezopasnosti po mezhdunarodnym standartam. Jenciklopedicheskij spravochnik [Water. Chemical, bacterial and radiation safety control on the international standards]. Moscow, Protector, 2000, 848 p.

Рецензенты:

Воскресенская О.Л., д.б.н., профессор, зав. кафедрой экологии ФГБОУ ВПО «Марийский государственный университет», г. Йошкар-Ола;

Ившин В.П., д.х.н., профессор, зав. кафедрой органической химии ФГБОУ ВПО «Марийский государственный университет», г. Йошкар-Ола.

Работа поступила в редакцию 21.09.2012.