

На правах рукописи

**Гаврилов Сергей Вадимович**

**ОЦЕНКА КАЧЕСТВА ВОДЫ С ПРИМЕНЕНИЕМ  
ЯМР - СПЕКТРОСКОПИИ ПРИ ГЕОЭКОЛОГИЧЕСКОМ  
МОНИТОРИНГЕ ПРИРОДНО-ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

Специальность 25.00.36 – Геоэкология

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата технических наук

Санкт-Петербург – 2006

Работа выполнена на кафедре «Безопасность жизнедеятельности»  
Механико-технологического факультета  
Южно-Уральского государственного университета

Научный руководитель:

доктор биологических наук, профессор Сарапульцев Борис Игоревич

Официальные оппоненты:

доктор географических наук, профессор Осипов Георгий Константинович.

кандидат технических наук, доцент Кriuлин Константин Николаевич.....

Ведущая организация:

Федеральное Государственное унитарное предприятие - Уральский комплексный научно-исследовательский и конструкторско-технологический институт водоснабжения, канализации, гидротехнических сооружений и инженерной гидрологии (ДП ФГУП «УралНИИ ВОДГЕО»)

Защита состоится « 13 » февраля 2007 года  
в ... часов на заседании диссертационного совета Д. 212.229.17 при ГОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет» по адресу: 195251, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая 29, гидрокорпус II, аудитория 411.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке ГОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

Автореферат разослан « 12 » января 2007 года.

Ученый секретарь  
диссертационного совета

Орлов В.Т.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность диссертации.** Проблема качественной и количественной оценки геоэкологического состояния водоемов 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. Техногенное преобразование водосборов, трансграничные потоки, индустриальные и хозяйственно-бытовые прямые сбросы существенно и, в ряде случаев, необратимо трансформируют экологический портрет природных и искусственных водоемов, нарушают сложившееся химико-биологическое равновесие, снижают буферные свойства и стабильность водных экосистем. В силу этого, в настоящее время теряет смысл рассмотрение природных водоемов в качестве естественных и реально существующих природных гидроэкосистем, и, в практической деятельности, следует, за крайне редким исключением, вести речь о динамично изменяющихся природно-технических системах (ПТС).

Токсичные выбросы техногенной природы приводят к изменению геохимических циклов в системе водосбор-водоем, появлению широкого спектра поллютантов и их модифицированных производных в водной среде, что необратимо ухудшает экологическое состояние природных экосистем (Моисеенко, 2005).

Рациональное использование водных ресурсов, сохранение естественного качества водных объектов – сложная и трудоемкая задача, особенно при современном уровне развития промышленности и сельского хозяйства. Поэтому вопросы комплексного использования и охраны водных ресурсов имеют огромное научное и практическое значение, являясь одной из острейших проблем современной инженерной геоэкологии.

В этой связи особую актуальность приобретает задача объективной оценки геоэкологического состояния водных экосистем, существенный вклад в решение которой принадлежит Санкт-Петербургской научной школе экологического нормирования и исследования устойчивости ПТС (Осипов, Хрисанов, 1993; Фролов, 1995; Федоров, 1999; Арефьев, 2000; Дмитриев, Фруммин, 2004). При решении задач геоэкологического мониторинга ПТС приоритетным направлением является экспресс-анализ массива рандомизированных и репрезентативных экспериментальных данных по максимально доступному количеству унифицированных параметров тестируемых водных экосистем с применением методов многомерной статистики и, в первую очередь, предлагаемой в настоящей работе ЯМР-спектроскопии (ЯМР-релаксации) образцов воды ПТС (Гаврилов, Сарапульцев, 2003; 2004; 2005).

**Цель** настоящего исследования заключалась в разработке экспресс-метода оценки качества воды в составе геоэкологического мониторинга ПТС с применением ЯМР-спектроскопии.

Для достижения указанной цели были поставлены следующие конкретные **задачи**:

1. Провести рандомизированный и репрезентативный анализ унифицированных гидрологических, гидробиологических и гидрохимических данных Росгидромета о ПТС.
2. Разработать методику ЯМР-спектроскопии для количественной оценки биоорганических соединений в естественных водоемах (ПТС).
3. Провести многомерную кластерную и дискриминантную оценку контрастных по геоэкологическому статусу озер.
4. Провести ретроспективный анализ динамики качества воды для оценки состояния ПТС (на примере оз. Тургояк) по гидробиологическим и гидрохимическим данным с 1979 по 2006 гг.

**Объектами исследования** являются природно-технические системы, сформированные на основе искусственных и естественных водоемов используемых для питьевого и промышленного водоснабжения (на примере Южного Урала).

#### **Научная новизна исследований.**

Разработан экспресс-анализ на основе высокочувствительного метода ЯМР-спектроскопии (ЯМР-релаксации), позволяющий оперативно оценивать биоорганические соединения в ПТС при геоэкологическом мониторинге водных систем.

Предложены и проведены многомерные кластерный и дискриминантный анализы унифицированных (в соответствии с Рабочими документами Росгидромета) гидрохимических и гидробиологических данных природных и искусственных водоемов (на примере Южного Урала), установлены наиболее информативные параметры, позволяющие оперативно оценить качество воды.

Определены весовые коэффициенты дискриминантной функции для каждого унифицированного параметра, позволяющие оперативно провести количественную оценку состояния практически любого природного водоема (ПТС) при наличии достаточного массива экспериментальных данных.

#### **Практическая значимость выполненных исследований.**

Разработанная методика позволяет проводить экспресс анализ качества воды ПТС для оперативного принятия мер контролирующими органами. Практическое

применение метода ЯМР-релаксации может стать одним из основных при экспресс-анализе биоорганических и органических соединений в водных ПТС.

Рассчитанные коэффициенты дискриминантного анализа позволяют оперативно оценить качества воды при геоэкологическом мониторинге.

**Достоверность полученных результатов** подтверждена проведением оценки погрешности результатов исследований апробированными методами математической статистики, а также сопоставлением полученных данных с унифицированными и рандомизированными данными Росгидромета.

#### **Реализация результатов решения поставленных задач.**

Метод определения качества воды ПТС с использованием многомерной дискриминантной функции и ЯМР-спектроскопии используется в Отделе водных ресурсов Нижне-Обского БВУ по Челябинской области (Акт о внедрении от 29.09.2006), а также при чтении курса лекций по специальности ДПП.Ф.09. «Федеральное и региональное обеспечение безопасности жизнедеятельности» на Механико-технологическом факультете ЮУрГУ.

#### **Положения, выносимые на защиту:**

1. Оценка возможностей и методика применения для геоэкологического мониторинга природно-технических водных систем высокочувствительного экспресс-метода ЯМР-спектроскопии, позволяющего количественно оценивать биоорганические соединения в образцах воды естественного происхождения.
2. Методика оценки состояния природно-технических водных систем с помощью многомерных методов кластерного и дискриминантного анализа.
3. Методика проведения и результаты натурных исследований на объектах природно-технических систем сформированных на основе искусственных и естественных водоемов, используемых для питьевого и промышленного водоснабжения.

**Структура диссертации.** Диссертационная работа изложена на 108 страницах, состоит из введения, обзора литературы, результатов исследования и их обсуждения, заключения, выводов и списка литературы, содержит 7 рисунков, 15 таблиц. Список литературы содержит 175 наименований.

**Апробация работы.** Основные положения диссертации изложены в 11 научных публикациях, доложены на трех заседаниях кафедры «Безопасность жизнедеятельности» ЮУрГУ, совместных семинарах кафедр ВиЛС и ГСиПЭ СПб ГПУ, а также представлены на следующих научных конференциях:

1. Безопасность жизнедеятельности в третьем тысячелетии: Вт. Всеросс. научн.-практич. конф. (Челябинск, 2003 г.).

2. Экологические проблемы Челябинской области. Обл. научн.-практич. конф. (Челябинск, 2004 г.).
4. Безопасность жизнедеятельности. Регион. конф., посвящ., 45-лет. каф. БЖД ЮУрГУ.
5. Экология и образование в Челябинской области. Обл. научн.-практ. конференция. Челябинск. 2005 г.
6. Науки о Земле. VII Международ. конф. Турин. Италия. 6-7 сентября. 2006.
7. Безопасность жизнедеятельности в третьем тысячелетии: III Всеросс. научно-практич. конф. (Челябинск, 2006 г.).

## **ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

**Во введении** обоснована актуальность темы, определены цели и задачи исследования, отмечена научная новизна и практическая значимость результатов, приведена информация о структуре диссертации и апробации основных полученных результатов.

**В первой главе** проведен обзор основных публикаций по проблеме. На основе выполненного обзора определена цель исследования настоящей работы. Системный поиск методов определения биоорганических соединений в водных растворах показал, что наиболее информативным и высокочувствительным является ЯМР-спектроскопия (ЯМР-релаксация), который может быть реализован в экспресс-диагностике ПТС.

Метод ЯМР-спектроскопии успешно применялся при анализе структурной организации биоорганических соединений (Aursand, Mabon, Martin 1997; Калабин, Калницкая, Кушнарев, 2000; Ropp, Lawtence 2001; Chen, Gro 2001; Pionnier, Zhang 2002; Brenna, Fronza, Fuganti, 2003; Annellin, Brenna, Fronza 2004), и также в некоторых специфических отраслях промышленности, например в оценке качества и ингредиентов винной продукции (Ogrinc, Kosir, Spagenberg, 2003; Калабин, Кулагина, Рыков и др. 2003). При системном анализе литературы сделан вывод о том, что метод ЯМР-спектроскопии ранее не применялся при исследовании биоорганических соединений в экологических работах с природными гидроэкосистемами и, тем более, с ПТС.

**Во второй главе** произведен анализ качества воды ПТС Южного Урала с использованием методов многомерной компьютерной классификации (кластерный и дискриминантный анализы) и ЯМР-спектроскопии образцов воды.

**В третьей главе** приведены результаты экспериментальных исследований и расчетов качества воды природных и искусственных водоемов Южного Урала с использованием методов многомерной статистики и ЯМР-спектроскопии.

К водоемам с заведомо высоким уровнем качества воды отнесены оз. Тургояк (глубоководное озеро с исключительно чистой водой), оз. Увильды – природный памятник России (Андреева, 1973, 2000; Волков, 2001) и оз. Большое Миассово, при

исследовании которого было «воспитано» современное поколение озерологов различных научных центров России. Оз. Б. Миассово расположено на территории Ильменского Государственного заповедника и, в силу своего исключительного заповедного статуса, практически не испытывает антропогенного воздействия.

С другой стороны была использована гидрологическая, гидрохимическая и гидробиологическая информация о водоемах Южного Урала, которые испытывают огромную техногенную нагрузку в силу их расположения в черте крупного мегаполиса – г. Челябинска – с населением более миллиона человек. К таким водным ПТС относятся оз. Смолино, окруженное сетью крупных промышленных предприятий и оз. Первое, являющееся фактически «очистными» сооружениями Челябинского тракторного и других заводов.

Третьим объектом исследования явилось вдхр. Шершни – основной источник питьевой воды для г. Челябинска.

Основные гидрохимические и гидробиологические параметры контрастных по геоэкологическому статусу озер Южного Урала представлены в табл. 1.

Таблица 1

Основные унифицированные параметры контрастных по геоэкологическому состоянию ПТС Южного Урала

№ п/п	Унифицированные показатели	Оз. Смолино	Оз. Первое	Вдхр. Шершни	Оз. Б.Миассово	Оз. Тургояк	Оз. Увильды
1	Прозрачность, см.	25,5	21,7	31,0	31,0	31,0	31,0
2	pH	8,4	8,0	8,5	7,4	7,8	8,3
3	O <sub>2</sub> , мг/л	7,9	7,9	9,1	13,8	12,2	12,7
4	Минерализация, мг/л	1440	872	302	132	116	286
5	БПК <sub>5</sub> , мгO <sub>2</sub> /л	1,82	2,50	2,63	1,24	1,28	0,85
6	СПАВ, мг/л	0,022	0,012	0,040	0,010	0,081	0,102
7	Фитопланктон г/л	19,73	5,15	9,10	2,93	3,64	3,82
8	Cl, мг/л	503,2	189,1	13,1	12,3	13,8	1,74
9	SO <sub>4</sub> , мг/л.	161,6	158,9	37,3	14,8	21,8	35,9
10	NH <sub>4</sub> , мг/л	0,316	0,194	0,414	0,327	0,135	0,183
11	NO <sub>3</sub> , мг/л	0,608	0,080	0,079	0,051	0,376	0,006
12	NO <sub>2</sub> , мг/л.	0,019	0,160	0,222	0,010	0,010	0,403
13	P <sub>неорг.</sub> , мг/л	0,036	0,060	0,270	0,020	0,117	0,058
14	P <sub>общий</sub> , мг/л	0,052	0,082	0,354	0,045	0,041	0,017
15	HCO <sub>3</sub> , мг/л	319	196	184	126	50	131
16	Fe, мг/л	0,162	0,057	0,353	0,033	0,131	0,574
17	Cu, мг/л	2,75	2,54	1,53	0,01	0,02	6,50
18	Zn, мг/л	0,028	0,034	0,060	0,169	0,019	3,487
19	Si, мг/л	1148	1502	0,675	1,839	1,851	1,725
20	Cr, мг/л	0,002	0,002	0,002	0,006	0,008	0,004
21	Нефтепродукты, мг/л	0,037	0,061	0,940	0,0	0,085	0,878

Из табл. 1. следует, что анализ водных ПТС по критерию прозрачности воды по требованию РД 52.24.496-95 не является информативным, поскольку фактические характеристики оз. Тургояк, оз. Увильды и оз. Б. Миассово значительно превосходят возможности лабораторного анализа (реальная прозрачность воды в оз. Тургояк превышает 10-15 м при тестирующем цилиндре лаборатории Госкомгидромета размером 0,31 м. Одновременно становится очевидным, что при анализе общепринятых для исследования гидрологических показателей, таких как рН, O<sub>2</sub>, минерализация, БПК<sub>5</sub>, СПАВ и биомасса фитопланктона практически невозможно с помощью обычных методов линейного статистического анализа сделать обоснованные выводы о геоэкологическом состоянии водоемов. Концентрации хроматов приблизительно равны у всех исследованных водных ПТС, поэтому не могут быть отнесены к информативным показателям. Концентрации нефтепродуктов оказались максимальными в образцах воды вдхр. Шершни и оз. Увильды, что очевидно, связано с огромной рекреационной нагрузкой на эти водоемы, большим количеством автомобилей и отдыхающих.

По данным табл. 1 можно определить принятые в геоэкологии (см. Дмитриев, Фрумин, 2004) классы качества воды в ПТС Южного Урала (табл. 2).

Таблица 2

Классы качества воды и химические параметры в озерных экосистемах

Водные объекты	O <sub>2</sub> , мг/л	БПК <sub>5</sub> , мгO <sub>2</sub> /л	NH <sub>4</sub> , мг/л
Оз. Смолино	4* (7,96)	2 (1,78)	3 (0,31)
Оз. Первое	4 (7,86)	3 (2,58)	3 (0,19)
Вдхр. Шершни	3 (9,50)	3 (2,47)	4 (0,44)
Оз. Тургояк	1 (12,18)	2 (1,28)	3 (0,13)
Оз. Миассово	1 (13,71)	2 (1,19)	2 (0,27)
Оз. Увильды	1 (12,08)	1 (0,85)	2 (0,18)

- - 1- очень чистые;
- - 2 – чистые;
- - 3 – умеренно загрязненные
- - 4 - грязные

Из табл. 2 видно, что согласно классификации качества воды оз. Смолино и оз. Первое следует отнести к водоемам с низким уровнем геоэкологического состояния и умеренным уровнем загрязнения, в отличие от озер Увильды, Б. Миассово и Тургояк, у которых наблюдается высокий геоэкологический статус, они относятся к классу «чистых». Вдхр. Шершни занимает промежуточное положение.

При анализе независимой выборки экологических данных о водных ПТС Южного Урала мы столкнулись с проблемой отсутствия в официальной отчетной документации (Рабочих документах Госкомгидромета) прецизионных методов экспресс-анализа



биоорганических соединений в водных экосистемах (например, определение БПК<sub>5-20</sub> требует от 5 до 20 сут.). Наиболее перспективным направлением исследования оказался использованный нами метод ЯМР-спектроскопии образцов воды естественного происхождения, ранее не применяемый в геоэкологии. Неоценимую помощь в освоении ЯМР-спектроскопии оказал докт. физ-мат. наук, профессор В.П. Габуда, предложивший для анализа концентраций биоорганических соединений в ПТС редко используемую на практике методику ЯМР-релаксации.

Существуют различные методы измерения  $T_1$ . Для решения нашей задачи наибольший интерес представляет метод инверсии — восстановления.

Макроскопическая намагниченность  $M$  во вращающейся системе координат (рис.1) представляет собой  $180^\circ$ -й импульс, наложенный на систему в начале эксперимента, ориентирует вектор  $M$  вдоль направления  $z$  (б). В результате спинрешеточной релаксации значение  $M$  уменьшается (в), проходя через ноль (г) и начинает возрастать в направлении оси  $z$  (д), достигая, в конце концов, своего первоначального значения. Обозначим времена для ситуаций в — д как  $\tau_1$ ,  $\tau_0$  и  $\tau_2$ , (после  $180^\circ$ -ного импульса). В моменты  $\tau_1$  и  $\tau_2$  намагниченность может быть обнаружена с помощью  $90^\circ$ -ных импульсов, которые ориентируют  $M$  вдоль положительного и отрицательного направлений соответственно. Оба сигнала различаются по фазе на  $180^\circ$ , что приводит к линиям испускания и поглощения соответственно. В момент  $\tau_0$  сигнал не наблюдается, так как намагниченность в образце отсутствует. Отсюда получаем соотношение  $\tau_0 = T_1 \ln 2 = 0,693T_1$ , которое может быть использовано для определения времени релаксации  $T_1$ .

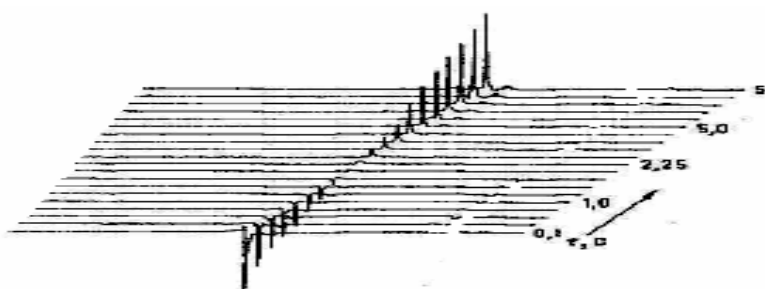


Рис 1. Инверсия — восстановление в спектре ЯМР воды.

Время релаксации  $T_1$  позволяет определить какие изменения произошли с пробой, или чем отличается одна проба от другой. Для сравнения, химически чистая вода имеет время релаксации 1,501 секунды. На показатель времени релаксации влияют все возможные парамагнетики органической природы (органические и биоорганические вещества).

Стандартный метод ЯМР-спектроскопии не позволяет оценить содержание биоорганических соединений в водоемах, поскольку чувствительность прибора на три порядка ниже фактических концентраций этих соединений в природных водах. Концентрирование образцов воды (например методом лиофилизации) также имеет существенные недостатки, поскольку неизвестно состояние биоорганических комплексов при многократном (на несколько порядков) повышении концентрации солей. В силу этого была использована методика ЯМР-релаксации при экспресс-анализе содержания биоорганических соединений в образцах воды в 10 точках исследуемых водоемов, отобранных согласно «Руководству по гидробиологическому мониторингу пресноводных экосистем» (Гидрометеиздат, 1992) и «Руководству по химическому анализу поверхностных вод суши» (Гидрометеиздат, 1977).

Результаты исследований представлены в табл. 3.

Таблица 3

Результаты ЯМР-релаксации проб воды контрастных по экологическому статусу озер Южного Урала (с)

Водоемы (озера)	оз. Смолино	оз. Первое	вдхр. Шершни	Оз. Б.Миассово	Оз. Тургояк	Оз. Увильды
Проба 1	1,917	1,857	1,835	1,697	1,735	1,688
Проба 2	1,987	1,924	1,869	1,850	1,669	1,700
Проба 3	1,968	1,838	1,840	1,640	1,635	1,689
Проба 4	1,933	1,876	1,812	1,555	1,702	1,599
Проба 5	1,947	1,864	1,823	1,690	1,700	1,600
Проба 6	1,954	1,874	1,827	1,698	1,705	1,600
Проба 7	1,944	1,870	1,828	1,699	1,699	1,628
Проба 8	1,956	1,875	1,811	1,694	1,698	1,677
Проба 9	1,951	1,874	1,820	1,694	1,702	1,688
Проба 10	1,950	1,869	1,818	1,690	1,709	1,701
$\bar{X} \pm m$	1,950± 0,006	1,872± 0,007	1,828± 0,005	1,691± 0,022	1,695± 0,008	1,690± 0,014

Из табл. 3. видно, что результаты ЯМР-релаксации позволяют достоверно оценить уровень биоорганических соединений в пробах воды каждого из тестируемых природных объектов – ПТС.

Поскольку данные по ЯМР-релаксационным показателям биоорганических соединений в природных водоемах были получены впервые, представлялось необходимым провести корреляционный анализ между этими параметрами и унифицированными данными филиалов Госкомгидромета по Челябинской области (табл. 4).

При анализе табл. 4 четко выделяется отрицательная корреляционная зависимость с концентрацией  $O_2$ , а также положительные корреляционные связи с минерализацией, концентрацией сульфат-ионов, бикарбонатов и биологической фитомассой водоемов. Подобные корреляционные связи однозначно свидетельствуют об адекватности метода ЯМР-релаксации для оценки геоэкологического статуса озер, полностью соответствуя данным классических работ в этом направлении (Танаева, 1995; Пых, 1996; Кривопалова 1996; Андреева, 2000).

Таблица 4

Корреляционная зависимость между показателями ЯМР-релаксации и унифицированными данными Госкомгидромета

Параметр	Прозр.	pH	$O_2$	Мин.	Cl	$SO_4$	$CO_3$	$NH_4$	$NO_3$	$NO_2$	$P_{мин}$	$P_{общ}$
ЯМР	-0,59	0,52	-0,70	0,76	0,68	0,71	0,74	0,38	0,49	-0,1	0,24	0,32

Окончание таблицы 4

Параметр	СПАВ	нефт.прод	БПК <sub>5</sub>	Фитомас	Fe	Cu	Zn	Si	Cr
ЯМР	-0,43	-0,03	0,56	0,76	-0,2	0,18	-0,43	-0,68	-0,48

ЯМР-спектроскопия позволяет оценить содержание биоорганических соединений в природных водоемах, однако метод имеет существенный недостаток, поскольку нуждается в наличии дорогостоящего оборудования и предъявляет исключительно высокие требования к уровню профессиональной подготовленности персонала.

Результаты ЯМР-релаксации природных водоемов представлены на рис. 2.

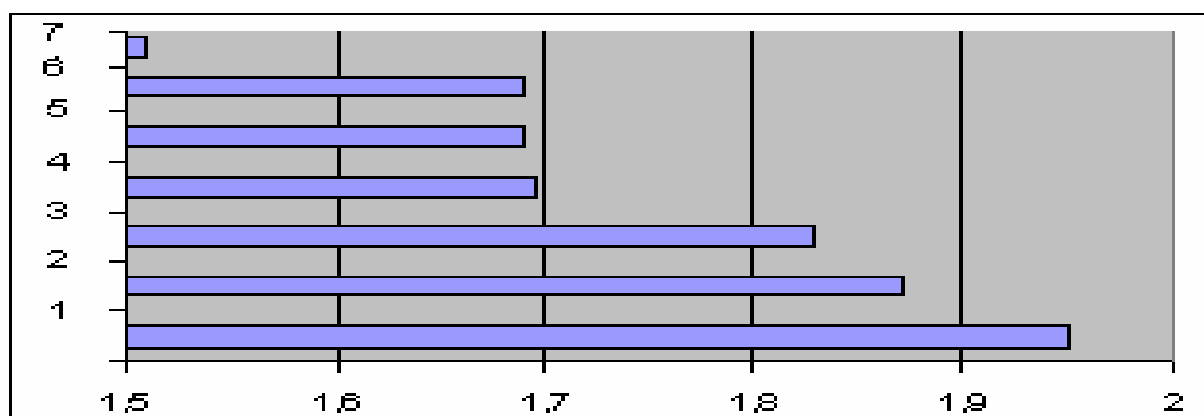


Рис. 2. ЯМР-релаксация проб воды водоемов Южного Урала

и дистиллированной воды (по оси абсцисс - время релаксации, с).

1 - оз. Смолино; 2 - оз. Первое; 3- вдхр. Шершни; 4 - оз. Тургояк; 5 - оз. Увильды; 6 - оз. Б Миассово; 7 - дистиллированная вода.

Из рис. 2 видно, что сигнал ЯМР-релаксации достоверно ниже ( $p < 0,001$ ) у озер с высоким геоэкологическим статусом (оз. Увильды, оз. Тургояк, оз. Б. Миассово) по сравнению с ПТС, загрязненными в результате интенсивного техногенного использования, (оз. Смолино и оз. Первое), а также вдхр. Шершни, являющегося источником питьевой воды г. Челябинска.

Результаты многомерного кластерного анализа представлены на рис. 3. Из данных видно, что при расчете дистанций по 21 унифицированному показателю качества воды в озерных ПТС четко выделяются две контрастных группы: 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 группами равна 480 единицам (рис. 3).

Таким образом, результаты многомерного кластерного анализа однозначно подтверждают правильность выбора объектов для модели контрастных по геоэкологическому статусу ПТС.

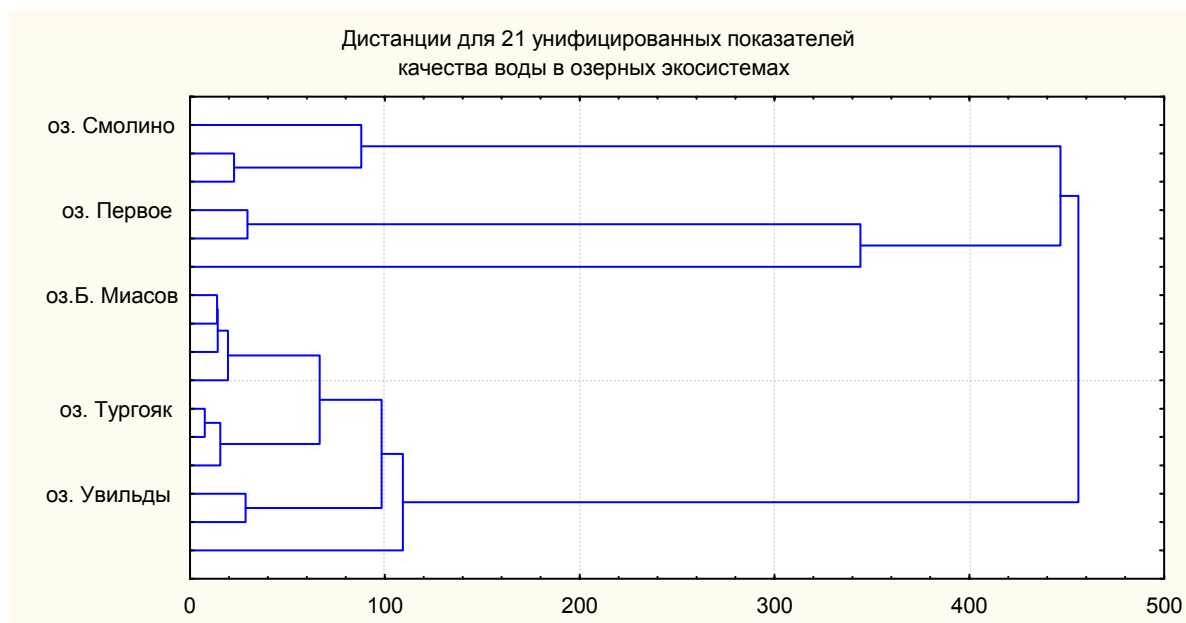


Рис.3. Результаты многомерного кластерного анализа контрастных

по геоэкологическому статусу ПТС Южного Урала.

по оси ординат – классифицируемые признаки;

по оси абсцисс – дистанции (расстояния) между признаками.

Данные о значениях основных параметров проб воды контрастных по геоэкологическому статусу ПТС, использованных для проведения многомерного дискриминантного анализа, представлены в табл. 1. Для объективной оценки контрастных

по экологическому статусу ПТС Южного Урала по компьютерной программе «Статистика-6.0» были рассчитаны весовые коэффициенты для каждого тестируемого параметра, позволяющие оптимальным образом разделить контрастные группы водоемов и количественно оценить дискриминантную функцию в виде:

$$DF(x_i) = k_1x_1 + k_2x_2 + \dots + k_{14}x_{14},$$

где  $k_1 \dots k_{14}$  - коэффициенты дискриминантной функции, а  $x_1 \dots x_{14}$  - экспериментальные значения параметров из табл. 1.

Результаты расчетов коэффициентов дискриминантной функции представлены в табл. 5.

Таблица 5.

Коэффициенты дискриминантной функции для основных параметров контрастных по геоэкологическому статусу водных ПТС Южного Урала

Параметры	pH	O <sub>2</sub>	NH <sub>4</sub>	NO <sub>3</sub>	NO <sub>2</sub>	P мин	P общ
№ п/п	1	2	3	4	5	6	7
Коэффициенты дискриминантной функции	3,068	1,256	-2,565	-3,264	3,942	4,266	-6,341

Окончание таблицы 5

Параметры	СПАВ	Нефте прод.	БПК <sub>5</sub>	Биомасса	Si	Cr	ЯМР
№ п/п	8	9	10	11	12	13	14
Коэффициенты дискриминантной функции	-3,923	-6,402	-1,439	-1,436	-3,225	-3,996	1,680

Компьютерный расчет многомерной дискриминантной функции открывает принципиально новую возможность провести объективную количественную оценку реального экологического статуса любого водоема с использованием 14-ти независимых переменных, полученных по унифицированным Рабочим Документам Госкомгидромета (2000, 2004).

В случае исследованной нами модели контрастных по геоэкологическому статусу ПТС Южного Урала получены следующие значения дискриминантной функции:

1. оз. Первое -  $DF(x_i) = 1,15$  (умеренно загрязненное – III класс)
2. оз. Смолино -  $DF(x_i) = 1,79$  (умеренно загрязненное – III класс)
3. оз. Тургояк -  $DF(x_i) = 11,62$  (чистое – II класс)
4. оз. Б. Миассово -  $DF(x_i) = 12,30$  (чистое – II класс)
5. оз. Увильды -  $DF(x_i) = 12,81$  (чистое – II класс)

При анализе значений дискриминантной функции видно, что различие между контрастными по геоэкологическому статусу ПТС достигают 10-тикратных величин. Используемый нами метод многомерного дискриминантного анализа позволяет потенциально оценить экологический статус практически любого водоема (ПТС) при наличии информации о 14-ти указанных выше параметрах. В нашем исследовании водоемом с «неопределенным» геоэкологическим статусом являлось вдхр. Шершни. Значение дискриминантной функции в этом случае равно 5,27, т.е. находится примерно в промежуточном положении между «чистыми» (Увильды, Тургояк, Б. Миассово) и «умеренно грязными» (Смолино, Первое) озерными ПТС по классу качества воды (Дмитриев, Фрумин, 2004).

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

При анализе отчетной документации о параметрах озерных систем Южного Урала, выполненных филиалом Госкомгидромет по Челябинской области, нам удалось собрать необходимый объем гидрологических параметров по оз. Тургояк, относящихся к 1978, 1979, 1980 и 2004 гг. Динамика изменения многомерной дискриминантной функции при анализе параметров образцов воды оз. Тургояк представлена на рис. 4

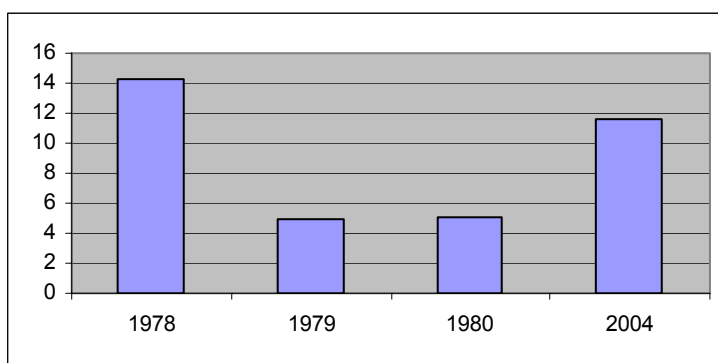


Рис. 4. Динамика изменения дискриминантной функции образцов воды оз. Тургояк в период 1978-2004 гг.

по оси ординат – значение дискриминантной функции;  
по оси абсцисс – годы наблюдения.

Полученные данные однозначно свидетельствует о катастрофическом снижении геоэкологического статуса оз. Тургояк, очевидно спровоцированного огромным забором воды для нужд завода УралАЗ и коммунальных служб г. Миасса. В период с 1979 по 1981 гг. оз. Тургояк находилось в критическом состоянии. Далее по данным о гидрологических параметрах этого уникального озера с помощью расчета дискриминантной функции мы провели статистически обоснованное заключение о восстановлении озерной экосистемы к параметрам, близким к 1978 г. (см. рис. 4).

## **ВЫВОДЫ**

1. Проведен рандомизированный и репрезентативный анализ унифицированных гидробиологических и гидрохимических данных Росгидромета о природно-техногенных озерных геоэкологических системах, что позволило выявить базовые показатели геоэкологического состояния озерных ПТС, в число которых входит интегральный показатель качества воды.
2. Разработана методика проведения и выполнения натурных исследований с применением ЯМР-спектроскопии (апробированная на ПТС Южного Урала).
3. Разработана методика ЯМР-спектроскопии (ЯМР-релаксации) и экспериментально доказана ее применимость в качестве экспресс-метода количественной оценки биоорганических соединений в естественных и искусственных водоемах.
4. Проведен кластерный и дискриминантный анализы, однозначно подтверждающие адекватность использованных в исследовании групп контрастных по геоэкологическому статусу ПТС, позволяющий поставить в соответствие результаты экспресс-метода с унифицированными данными ФГУ Росгидромет.
5. Результаты исследований позволяют оценить текущее состояние и прогнозировать качества воды оз. Тургояк, являющийся основным источником водоснабжения г. Миасс.

### **По теме диссертации опубликованы следующие работы:**

1. Гаврилов С. В., Ткачев В. А., Рогозин А.Г. Состояние экосистем оз. Тургояк. Проблемы экологии и экологического образования Челябинской области: Тез. докл. конф. Гос. Ильменского заповедника. Челябинский гос. пед. ун-т. - Миасс. - 1997, с. 64 -65.
2. Гаврилов С. В., Сарапульцев Б.И. Европейский стандарт паспортизации озерных экосистем (Геохимический анализ). Тр. II Всеросс. научн.-практич. конф. «Безопасность жизнедеятельности в третьем тысячелетии». - Челябинск: Изд-во ЗАО " Челябинская межрайонная типография", 2003, с. 150 -154.

3. Гаврилов С. В., Сарапульцев Б.И. Европейский стандарт паспортизации озерных экосистем (Радиобиологический анализ). Тр. П Всеросс. научн.-практич. конф. «Безопасность жизнедеятельности в третьем тысячелетии». - Челябинск: Изд-во ЗАО " Челябинская межрайонная типография", 2003, с. 154 -159.
4. Гаврилов С. В., Сарапульцев Б.И. Перспективы применения спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР) в экологии. Тр. каф. "Безопасность жизнедеятельности" - Челябинск: Изд-во ЗАО "Челябинская межрайонная типография", 2004, с. 83 - 89.
5. Гаврилов С. В. Исследование озерных экосистем с помощью ЯМР-спектороскопии. Тр. регион. конф. Мин-ва. по радиационной и экологической безопасности Челябинской области. «Экологические проблемы Челябинской области». Изд-во ЗАО " Челябинская межрайонная типография", 2004, с. 40 - 41.
6. Гаврилов С. В., Сарапульцев Б.И. Перспективы применения спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР) в экологических исследованиях. В кн.: «Безопасность жизнедеятельности». Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2005, с. 177-180.
7. Гаврилов С. В. Сарапульцев Б.И. ЯМР-спектроскопия при мониторинге качества воды озерных экосистем Южного Урала. Тр. регион. научно-практич. конф. «Экология Риск. Безопасность», посвященной 10-летию КГУ и 30-летию кафедры "Экология и безопасность жизнедеятельности". – Курган, 2005, с. 37-38.
8. Гаврилов С. В., Сарапульцев Б.И. Дискриминантный анализ озерных экосистем Южного Урала. Регион. межвуз. научн.-техн. конф. «Промышленность. Экология. Безопасность». Уфа, 2005, с. 24 - 27.
9. Гаврилов С. В., Сарапульцев Б.И., Бочарников В.А. Многомерная оценка геоэкологического состояния озер с использованием метода спектроскопии Ядерного магнитного резонанса Усп. совр. естествознания. – 2006. - № 11. - с. 112-114.
10. Гаврилов С. В., Сарапульцев Б.И., Бочарников В.А. Оценка геоэкологического состояния ПТС с использованием метода ЯМР-спектроскопии. Тр. Ш Всеросс. научн.-практич. конф. «Безопасность жизнедеятельности в третьем тысячелетии». Челябинск, 2006, с. 279 - 284.
11. Гаврилов С.В., Сарапульцев Б.И., Бочарников В.А. ЯМР – спектроскопия качества воды при геоэкологическом анализе природно – технических систем. Вестник ЮУрГУ, Серия «Математика. Физика. Химия». – 2006. – Вып.7 - № 7(62). – с. 191-194.