

УДК 556.314+556.388(474.2)

Прийт ИЫГАР

ИССЛЕДОВАНИЕ И АПРОБАЦИЯ ПРИВЕДЕННЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПОДЗЕМНЫХ ВОД ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМ МОДЕЛИРОВАНИЕМ (НА ПРИМЕРЕ СЕВЕРНОЙ ЭСТОНИИ)

С применением математических методов в геологических науках открылись дополнительные возможности изучения различных динамических процессов. Один из методов данного направления заключается в выведении новых производных показателей из некоторых соотношений составляющих многокомпонентных систем. Осуществляется это либо методом подбора, либо минимизацией среднеквадратичного расстояния, либо методами компонентного и факторного анализов, т.е. классическими математическими методами изучения объектов в естественных науках. Целесообразность и правомерность новых показателей доказывается, как правило, практическими результатами.

Для решения поставленной нами задачи наибольший интерес представляют метод главных компонент и факторный анализ. Они широко используются в петрографии и рудной геологии главным образом в классификационных целях. При этом в многокомпонентной системе отыскиваются совершенно новые параметры (факторы), имеющие высокую познавательную ценность и характеризующие эту систему с той или иной стороны — физико-химической, геологической, тектонической и т.д. (Белонин, 1982; Йереског, 1980). В гидрогеохимии в главные факторы многокомпонентных систем объединяются в различных комбинациях химические ионы и показатели физико-химической обстановки (рН, жесткость, сухой остаток), позволяющие в дальнейшем использовать численные значения факторов для составления соответствующих карт или для проведения классификации гидрогеологических объектов (Павличенко, Шапиро, 1982; Прядуненко, 1987; Чесалов, Шмагин, 1989).

В настоящей работе путем экспериментального моделирования идентифицируются признаки загрязнения подземных вод на основе новых показателей (факторов), выводимых из имеющихся доступных химических компонентов. С этой целью нами обработаны данные целого ряда неполных химических анализов и по ним восстановлен ход изменения качества подземных вод. Имеется в виду множество проанализированных в свое время проб подземных вод, отобранных при заложении эксплуатационных скважин в Северной Эстонии начиная с середины 50-х годов. Анализы эти уникальны, потому что они покрывают пространственно-временной сеткой всю территорию республики и характеризуют состояние подземных вод на сравнительно большой глубине (25—70 м от земной поверхности) до начала строительства в том или ином месте производственных сооружений и ферм, т.е. еще в отсутствие источников загрязнения. Однако эти анализы имеют неполный характер, так как в свое время определялось лишь содержание ионов HCO_3^- , SO_4^{2-} , Cl^- , Ca^{2+} , Mg^{2+} и не определялось содержание NO_3^- и других азотсодержащих ионов — основных показателей загрязнения сельскохозяйственного происхождения.

Нами разработана методика устранения неполноты анализов чисто математическими методами. Так, методом подбора среди упомянутых

пяти ионов отыскивается аналог, коррелирующий с содержанием NO_3^- -иона. Для этого обрабатывается прежде всего т.н. обучающий объем данных, включающий информацию о 383 пробах, отобранных в ходе гидрогеологического картирования среднего масштаба Северо-Восточной Эстонии (Йыгар, Перенс, 1988). В обучающем объеме содержатся данные о 15 компонентах — о сухом остатке, HCO_3^- , SO_4^{2-} , Cl^- , Ca^{2+} , Mg^{2+} , $\text{Na}^+ + \text{K}^+$, NO_3^- , NO_2^- , NH_4^+ , Fe^{3+} , O_2 , pH и о двух видах жесткости. В целях улучшения корреляции отсюда исключены данные анализов с экстремальными значениями ионов.

Отметим, что опубликованные в различных источниках (Коротков, 1983; Методы геохимического..., 1988) данные о корреляции между химическими компонентами подземных вод дают весьма противоречивую картину. Поэтому предлагаем свою корреляционную матрицу между компонентами (ионами) подземных вод Северной Эстонии (таблица, а), а также коэффициенты корреляции новых приведенных параметров с NO_3^- и с другими азотсодержащими ионами.

Как видно из таблицы, приведенными параметрами, дающими наиболее приемлемые коэффициенты корреляции с NO_3^- , оказываются соотношения $X18 = \text{Cl}^-/\text{SO}_4^{2-} + \text{HCO}_3^-$ и $X21 = \text{Cl}^-/\text{HCO}_3^-$ *. При этом опробовано около 20 комбинаций, включающих различные соотношения, а также квадратичные, логарифмические и экспоненциальные формы представления шести главнейших ионов (HCO_3^- , SO_4^{2-} , Cl^- , Ca^{2+} , Mg^{2+} , $\text{Na}^+ + \text{K}^+$). Апробация различных вычислительных схем проводилась в четырех подобъемах (таблица, б—д). В первом из них (96 анализов) наилучшая корреляция с содержанием NO_3^- ($r=0,70$) достигается соотношением $\text{Cl}^-/\text{HCO}_3^-$ (таблица, б). Существенная корреляция ионов Cl^- и SO_4^{2-} с ионом NO_3^- в приповерхностном слое может быть обусловлена разными причинами: либо одинаковой миграционной способностью ионов, либо образованием новых химических соединений, либо наличием или отсутствием геохимических барьеров, либо изменением окислительно-восстановительной обстановки. Последняя причина, очевидно, влияет на ухудшение корреляции с ионом NO_3^- с глубиной отбора проб. Так, например, корреляция NO_3^- с Cl^- ухудшается в ряду $0,60 \rightarrow 0,4 \rightarrow 0,36$, а с приведенным параметром $\text{Cl}^-/\text{HCO}_3^-$ (параметр X21) в ряду $0,70 \rightarrow 0,51 \rightarrow 0,41 \rightarrow 0,38$.

На следующем этапе экспериментального моделирования из данных обучающего объема выводятся методами компонентного и факторного анализов новые переменные — факторы. В качестве переменных, составляющих факторы, принимаются шесть главнейших ионов (X2, X3, X4, X7, X8, X9) и новые переменные, только что определенные корреляционным анализом: $X18 = \text{Cl}^-/\text{SO}_4^{2-} + \text{HCO}_3^-$, $X21 = \text{Cl}^-/\text{HCO}_3^-$, $X16 = \text{SO}_4^{2-} + \text{Cl}^-/\text{HCO}_3^-$. Значения факторов для каждого анализа рассчитываются по формуле (Белонин и др., 1982)

$$z_{jh} = \frac{\sum_{i=1}^p \omega_{ij} \bar{x}_{ih}}{\lambda_j}, \quad (1)$$

где z_{jk} — значение j -го фактора у k -го анализа, \bar{x}_{ik} — нормированное

* Соотношение ионов в мг/л.

Коэффициенты корреляции между химическими компонентами подземных вод Северной Эстонии

а) количество анализов N=383, глубина взятия проб 10—110 м

№ параметра и хим. компонент	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8	X9	X10	X11	X12	X13	X14
X1 — сухой остаток														
X2 — Cl ⁻	0,45													
X3 — SO ₄ ²⁻	0,39	0,50												
X4 — HCO ₃ ⁻	0,57	-0,16	-0,32											
X5 — NO ₃ ⁻	0,16	0,40	0,36	-0,33										
X6 — NO ₂ ⁻	0,10	0,19	0,14	-0,06	-0,08									
X7 — Na ⁺ +K ⁺	0,21	0,23	0,01	0,21	-0,08	-0,02								
X8 — Ca ²⁺	0,69	0,22	0,30	0,42	0,21	0,11	-0,25							
X9 — Mg ²⁺	0,16	0,03	-0,13	0,35	-0,22	-0,09	0,30	-0,40						
X10 — Fe ²⁺	-0,03	0,07	-0,09	0,01	0,0	-0,03	-0,09	-0,03	0,08					
X11 — NH ₄ ⁺	0,02	0,03	-0,03	0,03	0,02	-0,03	0,02	0,01	0,01	-0,01				
X12 — O ₂	0,21	-0,22	-0,27	0,47	-0,27	-0,09	0,12	0,25	-0,06	0,05	0,03			
X13 — pH	-0,23	-0,03	0,08	-0,38	0,09	0,01	-0,02	-0,25	-0,06	-0,09	0,06	-0,24		
X14 — жесткость общая	0,75	0,20	0,19	0,64	0,04	0,07	-0,09	0,68	0,17	0,09	0,02	0,23	-0,28	
X15 — жесткость карбонатная	0,54	-0,17	-0,23	0,84	-0,28	-0,05	0,08	0,46	0,28	-0,04	0,03	0,41	-0,31	0,81
X16 — Cl ⁻ +SO ₄ ²⁻ /HCO ₃ ⁻					0,48	0,18								
X18 — Cl ⁻ /SO ₄ ²⁻ +HCO ₃ ⁻					0,47	0,19								
X20 — Cl ⁻ /SO ₄ ²⁻					-0,11	-0,04								
X21 — Cl ⁻ /HCO ₃ ⁻					0,49	0,20								
X22 — SO ₄ ²⁻ /HCO ₃ ⁻					0,42	0,14								

б) количество анализов N=96, глубина взятия проб 10—40 м

	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8	X9	X11
X2										
X3	0,35									
X4	0,47	0,51								
X4	0,66	-0,22	-0,19							

	X5	X6	X7	X8	X9	X10	X11	X12	X13	X14	X15	X16	X17	X18	X19	X20	X21	X22	
X5	0,08	0,60	0,31	-0,43															
X6	0,07	0,08	0,11	0,02	-0,11														
X7	0,38	0,27	0,18	0,24	-0,07	0,28													
X8	0,78	0,17	0,26	0,62	0,04	0,0	0,10												
X9	0,10	0,01	0,0	0,20	-0,11	0,0	0,21												
X10	-0,07	0,07	-0,06	-0,10	0,10	-0,02	0,01												
X11					0,53	0,09	-0,07												
X12					0,69	0,05	0,01												
X13					0,40	0,09	0,05												
X14					0,70	0,06	0,06												
X15					0,40	0,09	-0,02												
X16																			
X17																			
X18																			
X19																			
X20																			
X21																			
X22																			

X19 — $\text{SO}_4^{2-}/\text{Cl}^- + \text{HCO}_3^-$

приведенные
параметры

в) количество анализов N=121, глубина взятия проб 40—60 м

	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8	X9
X2	0,48								
X3	0,31	0,47							
X4	0,57	-0,11	-0,38						
X5	0,23	0,40	0,31	-0,31					
X6	-0,07	0,15	0,17	-0,19	-0,13				
X7	-0,37	0,25	0,12	0,26	-0,08	0,04			
X8	0,64	0,17	0,14	0,46	0,15	-0,07	-0,11		
X9	0,13	0,11	-0,08	0,35	-0,22	0,04	0,35	-0,36	
X10	0,18	0,11	0,14	0,11	-0,03	-0,07	0,05	0,05	-0,06
X11					0,45				
X12					0,49				
X13					0,37				
X14					0,51				
X15					0,38				

г) количество анализов N=119, глубина взятия проб 60—80 м, корреляция с NO_3^-

	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8	X9	X10	X11	X12	X13	X14	X15	X16	X17	X18	X19	X20	X21	X22	
X5	0,32	0,36	0,42	-0,28	0,47	0,38	0,45	0,41	0,45	0,45	0,45	0,45	0,45	0,45	0,45	0,45	0,45	0,45	0,45	0,45	0,45	0,45	0,45

д) количество анализов N=47, глубина взятия проб 80—110 м, корреляция с NO_3^-

	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8	X9	X10	X11	X12	X13	X14	X15	X16	X17	X18	X19	X20	X21	X22
X5	0,10	0,36	0,47	-0,28	0,53	0,31	0,49	0,38	0,50	0,49	0,49	0,49	0,49	0,49	0,49	0,49	0,49	0,49	0,49	0,49	0,49	0,49

значение i -го компонента (переменного) у k -го анализа, λ_j — собственное значение корреляционной матрицы, ω_{ij} — факторные нагрузки.

Различные факторные нагрузки ω_{ij} из формулы (1) определяются с помощью компонентного и факторного анализов и с применением целого ряда стандартных программ, разработанных в Институте кибернетики АН Эстонии (Кукс и др., 1981). После определения значений 1-го и 2-го факторов ($j=1,2$) для каждого анализа обучающего объема проверяется их общая корреляция с показателем NO_3^- .

В ходе работы установлено:

а) корреляция факторов с NO_3^- улучшается по мере уменьшения числа первоначальных компонент, включаемых в компонентный и факторный анализы;

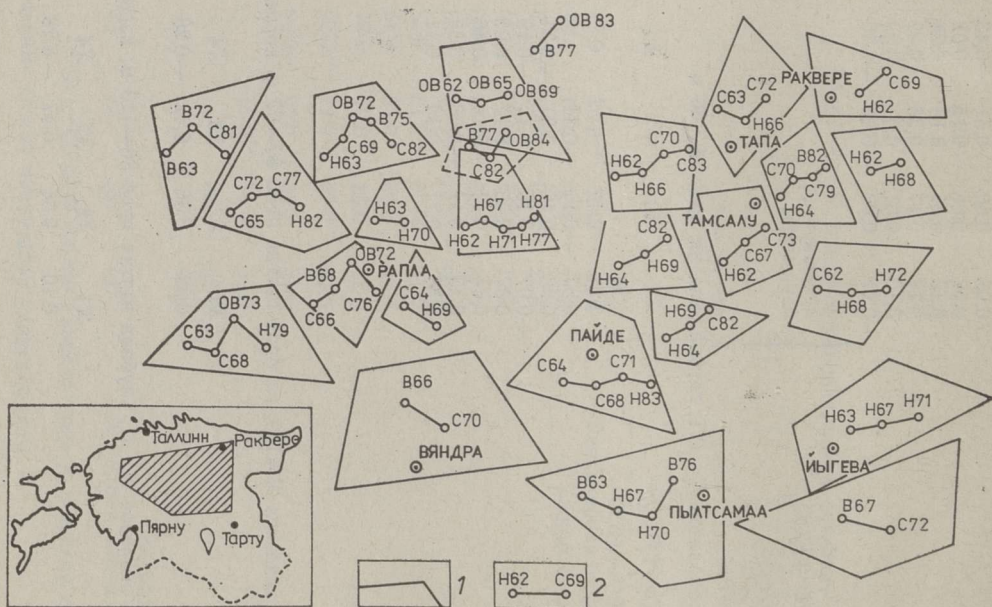
б) корреляция улучшается с применением специфических методов факторного анализа — варимаксного и особенно промаксного вращения факторных осей.

Далее из данных анализов обучающего объема отыскиваются коэффициенты A, B, C и D для основного объема анализов (с пятью компонентами). Наилучшая корреляция ($r=0,702$) с факторными нагрузками 1-го фактора ($j=1$) достигалась при следующих коэффициентах:

$$z_{jk} = A \cdot X18 + B \cdot X21 + C \cdot X16 - D, \quad (2)$$

где $A=19,24$; $B=17,0$; $C=1,92$; $D=1,85$.

Разработанная нами методика была практически опробована с основным объемом данных анализов эксплуатационных скважин (за 1962—1983 гг.), расположенных на территории Раплаского, Харьюского, Пайдеского, Раквереского и Йыгеваского районов. После исключения из объема анализов с экстремальными значениями содержания ионов HCO_3^- , SO_4^{2-} и Cl^- были определены индексы z_{jk} с коэффи-



Изменение осредненного индекса z_{jk} (формула (2)) во времени по неполным данным химических анализов подземных вод в сельскохозяйственных районах Северной Эстонии. Условные обозначения: 1 — граница пространственной группы скважин (анализируемых данных), 2 — график изменения индекса (Н — низкий, С — средний, В — высокий, ОВ — очень высокий уровень загрязнения подземных вод, цифры обозначают год).

циентами формулы (2) для 725 анализов. Разделением анализов на пространственно-временные группы был получен график изменения осредненного индекса z_{jk} , коррелирующего с содержанием иона NO_3^- во времени и по отдельным подрайонам (рисунок). Величины осредненного индекса колебались в пределах от $-0,7$ до $1,3$.

Прослеживаются характерные особенности в поведении осредненного индекса, связанные с природными геологическими и гидрогеологическими факторами и отмеченные уже ранее (Йыгар, Перенс, 1988). Прежде всего обращает на себя внимание стабилизация роста индекса в районах с мощным четвертичным покровом (Вооремаа), а также в районах восточного, южного и западного склонов и подножий Пандивереской возвышенности, где, очевидно, на процесс загрязнения влияют напорные воды.

Апробация метода показала хорошую сходимость роста или падения индекса в смежных пространственных группах отобранных проб. Так, в Западной Эстонии сходимость составляла около 75%, на Пандивереской возвышенности — 90%.

Сравнительно высокие коэффициенты корреляции и хорошая сходимость результатов позволяют рекомендовать данный методический подход при определении загрязненности подземных вод и в других регионах интенсивного сельскохозяйственного землепользования.

ЛИТЕРАТУРА

- Белонин М. Д., Голубева В. А., Скублов Г. Т. Факторный анализ в геологии. М., 1982.
Иереског К. Г., Клован Д. П., Реймент Р. А. Геологический факторный анализ. М., 1980.
Йыгар П., Перенс Р. Упорядочение данных по химическому составу подземных вод Северной Эстонии (новые скважины 1971—1985 гг.) // Изв. АН ЭССР. Геол., 1988, 37, № 4, 175—180.
Коротков А. И. Гидрогеохимический анализ при региональных геологических и гидрогеологических исследованиях. Л., 1983.
Кукс Я., Каролин М., Тийте Т. Программы дискриминантного и факторного анализов. Таллинн, 1981.
Методы геохимического моделирования и прогнозирования в гидрогеологии. М., 1988.
Павличенко Л. М., Шапиро С. М. Исследование процессов формирования гидрогеологических условий дельты р. Или методом главных компонент // Водные ресурсы, 1982, № 4, 77—84.
Прудуненко Т. И. Оценка факторов формирования химического состава вод р. Чирчик методом главных компонент // Применение ЭВМ при решении задач гидрогеологии в инженерной геологии. Ташкент, 1987, 59—65.
Чесалов С. М., Шмагин Б. А. Статистические методы решения гидрогеологических задач на ЭВМ. М., 1989.

Институт геологии
Академии наук Эстонии

Поступила в редакцию
26/XII 1989

Priit JÖGAR

PÕHJAVETE PÕLLUMAJANDUSLIKU REOSTUSE HINDAMINE PÕHJA-EESTIS KAUDSETE PARAMETRITE ABIL

Ioonide HCO_3^- , Cl^- , SO_4^{2-} , Ca^{2+} ja Mg^{2+} sisaldusest põhjavee analüüsidest on katsetamise teel tuletatud kaudsed parameetrid, mis korreleeruvad nitraatiooniga NO_3^- . Parima tulemuse ($r=0,70$) andis suhe $\text{Cl}^-/\text{HCO}_3^-$ (mg/l). Teise variandi puhul on korreleeruvad kaudsed parameetrid tuletatud faktoritena peakomponentide meetodi või faktoranalüüsi abil. Meetodi hindamiseks on kasutatud Põhja-Eestis varematest aastakümnetel võetud põhjaveeproovide mittetäielikke analüüse (5 iooniga). Nende alusel on rajoonide kaupa antud hinnang põllumajanduslikule reostusele aastail 1962—1983 kuni 70 m sügavuses lasuvas põhjavees. Kasutatava reostusindeksi z_{jk} (valem (2)) muutused ajas langevad vaatlusaladel kokku.

ASSESSMENT OF AGRICULTURAL GROUNDWATER CONTAMINATION
IN NORTH ESTONIA BY MEANS OF INDIRECT PARAMETERS

A technique for assessing agricultural contamination in case of incomplete information on the chemical composition of groundwater (only HCO_3^- , Cl^- , SO_4^{2-} , Ca^{2+} , and Mg^{2+} ions are known), is presented. Contamination is usually expressed as the content of the NO_3^- ion in groundwater. It was ascertained that the parameter $\text{Cl}^-/\text{HCO}_3^-$ correlates best to the changes in the NO_3^- ion. As another method, factor analysis was used, and the best correlation to NO_3^- content occurred for the factor calculated by Eq. 2. To estimate the methods, factors were calculated for 725 groundwater samples using Eq. 2. The factors show the contamination of groundwater in North Estonia in 1962–1983 (see the Figure).