

Моделирование диэлектрических свойств воды из природных минерализованных водоемов с использованием регрессионного анализа

А.Ю. Суковатова¹, А.Н. Романов², Н.М. Оскорбин^{1*}

¹ Алтайский государственный университет

656015, г. Барнаул, пр. Ленина, 61

² Институт водных и экологических проблем СО РАН

656038, г. Барнаул, ул. Молодежная, 1

Поступила в редакцию 18.04.2011 г.

Установлены зависимости диэлектрических параметров воды из соленых и горько-соленых озер равнинной части Алтайского края от совокупности химических показателей. Приведены результаты расчета диэлектрических свойств с учетом растворенных в воде химических веществ. Предложена методика учета влияния растворенных в воде химических веществ на диэлектрические свойства с использованием регрессивного анализа.

Ключевые слова: диэлектрические характеристики, многомерный анализ данных, РГК, ПЛС, соленые и горько-соленые озера; dielectric characteristics, data multivariate analysis, PCR, PLS, salty and brackish lakes.

В последние годы в связи с развитием методов и приборов дистанционного зондирования становится возможным осуществление глобального мониторинга природных ресурсов [1, 2]. Важная роль в сборе достоверной и своевременной информации о состоянии природной среды отводится радиофизическим системам космического базирования.

Основной проблемой при разработке дистанционных радиофизических методов диагностики экологического состояния окружающей среды, в частности внутренних водоемов, является необходимость учета химических параметров воды, оказывающих влияние на ее диэлектрические свойства [3–6].

В настоящей статье приведены результаты исследований диэлектрических характеристик воды, отобранный из соленых и горько-соленых озер равнинной части Алтайского края, в частотном диапазоне 0,6÷1,42 ГГц. Использовали регрессионный анализ для моделирования диэлектрических свойств воды. При обработке данных эксперимента исследовали зависимости показателей преломления и поглощения электромагнитной волны, проходящей через образец воды от следующих химических веществ: CO_3^{2-} , HCO_3^- , Cl^- , SO_4^{2-} , Ca^{2+} , Mg^{2+} , NO_2^- , NO_3^- , Р и др.

Методика измерений и обработка данных

Диэлектрические характеристики воды измеряли в дециметровом диапазоне, в котором наблюдаются

заметные различия в диэлектрических свойствах разных водных фракций, образующихся в результате взаимодействия с ионами растворенных солей. Применили метод мостовых схем, обладающий высокой точностью определения диэлектрических параметров дисперсных смесей и жидкостей, характеризующихся высокой поглощательной способностью. Лабораторная установка, выполненная с помощью измерительного и опорного каналов промышленного фазометра ФК2-18, позволяла измерять диэлектрические параметры жидкостей в диапазоне частот от 300 МГц до 5,0 ГГц и имела следующие технические характеристики: диапазон однозначных измерений фазы $\pm 180^\circ$; диапазон измерения затуханий от 0 до 60 дБ; погрешность измерений ослабления 0,5 дБ, фазы – 2° .

В качестве величины, характеризующей содержание химических веществ в воде, использовали массовую долю S растворенного вещества, которую определяли по формуле $S = M_c/M$, где M , M_c – массы образца и сухого остатка, измеренные путем взвешивания на аналитических весах с точностью до 0,001 г до и после выпаривания воды из образца в термостате при температуре 215 °C. Измеряли на разных частотах ослабление A и сдвиг фазы ϕ электромагнитной волны в исследуемом образце, применяемые для расчета показателей преломления n и поглощения k , связанных с комплексной диэлектрической проницаемостью ϵ формулой $\sqrt{\epsilon} = n + ik$. Измерения диэлектрических параметров воды проводили при температуре $(25 \pm 1)^\circ\text{C}$.

Для расчета n и k воды использовали известные методы регрессионного анализа данных: регрессию на главные компоненты (РГК) и проекцию на

* Анна Юрьевна Суковатова (usanna1311@gmail.com); Андрей Николаевич Романов; Николай Михайлович Оскорбин.

латентные структуры (ПЛС) [7]. Проводили многомерную калибровку данных по 30 образцам воды (параметры модели: показатели преломления и поглощения, частота сигнала, массовая концентрация, данные химического анализа). Строили многомерную регрессионную модель (X , Y) для экспериментальных данных, которую затем использовали для определения новых значений Y по новым измерениям X . Смысл этой операции заключался в том, чтобы получить возможность в дальнейшем не изменять значения Y , а определять их по значениям X .

Установлены следующие зависимости n и κ от массовых долей химических веществ (S_i) и частоты сигнала f (0,6; 1,11; 1,42 ГГц):

1. Метод ПЛС:

$$\begin{aligned} n = & 9,72 + S_1 \cdot 0,01 - S_2 \cdot 0,06 + S_3 \cdot 0,002 + \\ & + S_4 \cdot 0,006 + S_5 \cdot 0,27 + S_6 \cdot 0,007 + S_7 \cdot 15,15 + \\ & + S_8 \cdot 1,63 + S_9 \cdot 19,56 - f \cdot 0,45, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \kappa = & 3,26 - S_1 \cdot 1,21 - S_2 \cdot 0,3 + S_3 \cdot 0,004 + \\ & + S_4 \cdot 0,018 + S_5 \cdot 0,28 + S_6 \cdot 0,01 + S_7 \cdot 72,32 + \\ & + S_8 \cdot 1,2 + S_9 \cdot 7,2 - f \cdot 0,06. \end{aligned} \quad (2)$$

2. Метод РГК:

$$\begin{aligned} n = & 8,91 + S_1 \cdot 0,13 - S_2 \cdot 0,004 + S_3 \cdot 0,002 + \\ & + S_4 \cdot 0,0003 + S_5 \cdot 0,14 + S_6 \cdot 0,003 - S_7 \cdot 16,43 + \\ & + S_8 \cdot 0,99 + S_9 \cdot 21,93 - f \cdot 0,51, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \kappa = & 3,38 - S_1 \cdot 0,14 - S_2 \cdot 0,002 + S_3 \cdot 0,002 + \\ & + S_4 \cdot 0,01 + S_5 \cdot 0,075 + S_6 \cdot 0,0054 + S_7 \cdot 13,03 + \\ & + S_8 \cdot 0,5 - S_9 \cdot 0,36 + f \cdot 0,18. \end{aligned} \quad (4)$$

В (1)–(4) цифры в индексах и i обозначают следующие химические вещества, растворенные в воде: 1 – CO_3^{2-} , 2 – HCO_3^- , 3 – Cl^- , 4 – SO_4^{2-} , 5 – Ca^{2+} , 6 – Mg^{2+} , 7 – NO_2^- , 8 – $\text{N}-\text{NH}_4$, 9 – P .

Исследованные величины изменялись в следующих пределах (г/л):

$$S_1 = 0,015 \div 0,9; S_2 = 0,026 \div 3,6; S_3 = 3 \div 195;$$

$$S_4 = 3 \div 36; S_5 = 0,04 \div 4; S_6 = 0,45 \div 63;$$

$$S_7 = 0 \div 0,009; S_8 = 0 \div 0,52;$$

$$S_9 = 0 \div 0,001; f = 0,6 \div 1,42 \text{ ГГц}.$$

Использование установленных эмпирических зависимостей n и κ от исследованных параметров позволяет рассчитать численные значения n и κ по химическим параметрам воды для разных случаев. Построение таких моделей позволит контролировать изменение минерализации водоема и, таким образом, осуществлять диагностику экологического состояния.

Для показателя κ число главных компонент как в РГК, так и в ПЛС равно 1, для показателя n число главных компонент для РГК равно 5, для ПЛС – 4. В данном случае целесообразнее использовать модель, построенную с помощью метода ПЛС, так как он использует меньшее число главных компонент и значение ошибки предсказания для этого метода меньше.

1. Кондратьев К.Я., Крапивин В.Ф. Глобальные изменения: реальные и возможные в будущем // Исслед. Земли из космоса. 2003. № 4. С. 3–12.
2. Njoku E.G. Passive Microwave Remote Sensing of Earth from Space – a review // Proc. IEEE. 1982. V. 70. P. 728–749.
3. Романов А.Н. Влияние массовой концентрации минеральных солей на диэлектрические характеристики их водных растворов в микроволновом диапазоне // Радиотехн. и электрон. 2004. Т. 49, № 9. С. 1157–1163.
4. Митник Л.М. Излучательные характеристики водной поверхности. Сер. Океанология (обзор). Обнинск: Информ. центр, 1978. 66 с.
5. Артамонов В.Г., Любимов Ю.А. Диэлектрические и оптические свойства жидкостей. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986. 101 с.
6. Либерман Б.М., Гайдук В.И. Расчет диэлектрических и излучательных спектров водных растворов электролитов в широком диапазоне длин волн. Гидратная модель // Радиотехн. и электрон. 1999. Т. 44, № 1. С. 97–103.
7. Эсбенсен К. Анализ многомерных данных. Избранные главы: Пер. с англ. С.В. Кучерявского / Под ред. О.Е. Родионовой. Барнаул: Изд-во АГУ, 2002. 158 с.

A.Yu. Sukovatova, A.N. Romanov, N.M. Oskorbin. Modeling of dielectric properties of water from natural mineralized reservoirs by the regression analysis method.

Dependencies Altai steppe lakes water dielectric characteristics on a set of chemical parameters are determined. Calculation data of water dielectric features subject to soluted matters are presented. Method of accounting of the soluted matters dependence on dielectric characteristics with regression analysis application is suggested.