

УДК: 574.52: 57.045

Поиск связей между биологическими и физико-химическими характеристиками экосистемы Рыбинского водохранилища.

Часть 1. Критерии неслучайности связи

**Д. В. Рисник^{1,a}, А. П. Левич^{1,b}, Н. Г. Булгаков^{1,c}, Э. С. Бикбулатов²,
Е. М. Бикбулатова², Ю. В. Ершов², И. В. Конюхов¹,
Л. Г. Корнева², В. И. Лазарева², А. С. Литвинов², В. Н. Максимов¹,
С. В. Мамихин³, В. А. Осипов¹, Н. Г. Отюкова², С. А. Поддубный²,
И. Л. Пырина², Е. А. Соколова², И. Э. Степанова², П. В. Фурсова¹,
О. Л. Цельмович²**

¹Биологический факультет Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова,
Россия, 119234, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12

²Институт биологии внутренних вод имени И. Д. Папанина РАН,
Россия, 152742, Ярославская обл., Некоузский р-н, п. Борок, ИБВВ РАН

³Факультет почвоведения Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова
Россия, 119234, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12

E-mail: ^a biant3@mail.ru, ^b apl@chronos.msu.ru, ^c bulgakov@chronos.msu.ru

*Получено 20 июня 2012 г.,
после доработки 4 сентября 2012 г.*

На основании данных по содержанию пигментов фитопланктона, интенсивности флуоресценции проб и некоторыми физико-химическим характеристикам вод Рыбинского водохранилища проведен поиск связи между биологическими и физико-химическими характеристиками. Исследованы стандартные методы статистического анализа (корреляционный, регрессионный), методы описания связи между качественными классами характеристик, основанные на отклонении исследуемого распределения характеристик от независимого распределения. Предложен метод поиска оптимальных границ качественных классов по критерию максимума коэффициентов связи.

Ключевые слова: флуоресценция, фитопланктон, пигменты, хлорофилл, коэффициент Юлла, коэффициент Пирсона, поиск связи, Рыбинское водохранилище

Searching for connections between biological and physico-chemical characteristics of Rybinsk reservoir ecosystem. Part 1. Criteria of connection non-randomness

D. V. Risnik¹, A. P. Levich¹, N. G. Bulgakov¹, E. S. Bikbulatov², E. M. Bikbulatova²,
Yu. V. Ershov², I. V. Konyuhov¹, L. G. Korneva², V. I. Lazareva², A. S. Litvinov²,
V. N. Maksimov¹, S. V. Mamihin³, V. A. Osipov¹, N. G. Otyukova², S. A. Poddubnii²,
I. L. Pirina², E. A. Sokolova², I. E. Stepanova², P. V. Fursova¹, O. L. Cel'movich²

¹ Moscow State University, Faculty of Biology, MSU, 1-12, Leninskiye Gory, Moscow, 119991, Russia

² I.D. Papanin Institute for biology of inland waters Russian Academy of Sciences, IBIW RAS, Borok, Nekouzskii District, Yaroslavskii region, 152742, Russia

³ Moscow State University, Faculty of Soil Science, MSU, 1-12, Leninskiye Gory, Moscow, 119991, Russia

Abstract. — Based on contents of phytoplankton pigments, fluorescence samples and some physico-chemical characteristics of the Rybinsk reservoir waters, searching for connections between biological and physico-chemical characteristics is working out. The standard methods of statistical analysis (correlation, regression), methods of description of connection between qualitative classes of characteristics, based on deviation of the studied characteristics distribution from independent distribution, are studied. A method of searching for boundaries of quality classes by criterion of maximum connection coefficient is offered.

Keywords: fluorescence, phytoplankton, pigments, chlorophyll, Yule coefficient, Pearson coefficient, searching for connection, Rybinsk reservoir

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2013, vol. 5, no. 1, pp. 83–105 (Russian).

Работа частично поддержана грантами РФФИ №№ 13-04-01027а, 12-07-00580а.

© 2013 Дмитрий Владимирович Рисник, Александр Петрович Левич, Николай Гурьевич Булгаков, Эрнст Саяфнурович Бикбулатов, Екатерина Максимовна Бикбулатова, Юрий Викторович Ершов, Иван Владимирович Конюхов, Людмила Генриховна Корнева, Валентина Ивановна Лазарева, Александр Сергеевич Литвинов, Виктор Николаевич Максимов, Сергей Витальевич Мамихин, Владимир Алексеевич Осипов, Наталья Георгиевна Отыукова, Сергей Артурович Поддубный, Инна Логиновна Пырина, Евгения Александровна Соколова, Ирина Эрнстовна Степанова, Полина Викторовна Фурсова, Ольга Леонидовна Цельмович

Предлагаем читателю серию статей, посвященных поиску подходов к описанию взаимосвязей между полученными в натурных измерениях экологическими характеристиками. В первой статье подробно сформулированы проблемы, возникающие при анализе натурных данных, в деталях описаны исходные материалы и предложены критерии, указывающие на степень неслучайности связей между характеристиками. Во второй статье испытаны меры связи, предлагаемые детерминационным анализом, исследующим прогностические связи вида «из того, что характеристика X имеет значения в диапазоне A , следует, что характеристика Y имеет значения в диапазоне B ». В третьей статье серии рассмотрен частный, но важный в прикладном отношении случай поиска взаимосвязей между биологическими и физико-химическими характеристиками — поиск границ классов качества вод на основе установления экологических норм для биологических индикаторов состояния вод и для факторов среды.

1. Постановка проблемы

В контролируемых условиях лабораторных экспериментов «хорошо организованные» зависимости между биологическими и физико-химическими характеристиками имеют вид однозначных функций, поддающихся корреляционному, регрессионному и другим видам статистического анализа (рис. 1).

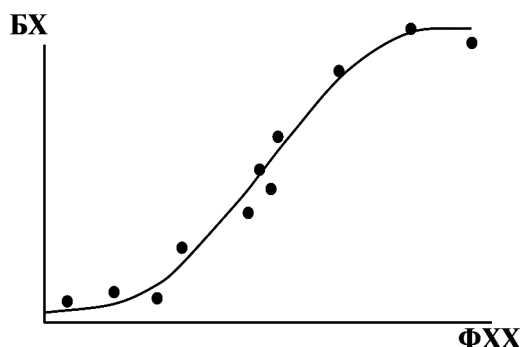


Рис. 1. Зависимости между биологическими (БХ) и физико-химическими (ФХХ) характеристиками в лабораторных опытах

В природных экосистемах на биологические характеристики одновременно действует множество факторов среды, среди которых только часть представлена в экспедиционных измерениях. Биологическая характеристика становится функцией многих физико-химических переменных. Зависимость между переменными в этом случае имеет вид «плохо организованного», «размытого» облака точек (рис. 2).

Корреляционный анализ «размытых» зависимостей обычно демонстрирует сравнительно низкую и незначимую величину связей. Многомерный регрессионный анализ также осложнен рядом обстоятельств [Налимов, Чернова, 1965]. Если даже в некоторых редких случаях регрессионный анализ приводит к получению высокого множественного коэффициента корреляции, то остается нерешенной задача о поиске тесноты связи между биологической переменной и каждым из факторов, поскольку частные коэффициенты корреляции остаются незначительными. Следует добавить [Рисник, Рыбка, 2011], что применение множественного регрессионного анализа очень часто осложнено недостаточным количеством данных, причем недостаточность определяется фактором с самым малочисленным количеством наблюдений, сколь бы много их ни было для других переменных.

Применение многих статистических процедур предполагает, что исходные данные обладают какими-либо априорными статистическими свойствами, например, распределены по гауссовскому, пуассоновскому или другому закону. Однако для реальных экологических данных это предположение выполняется очень редко.

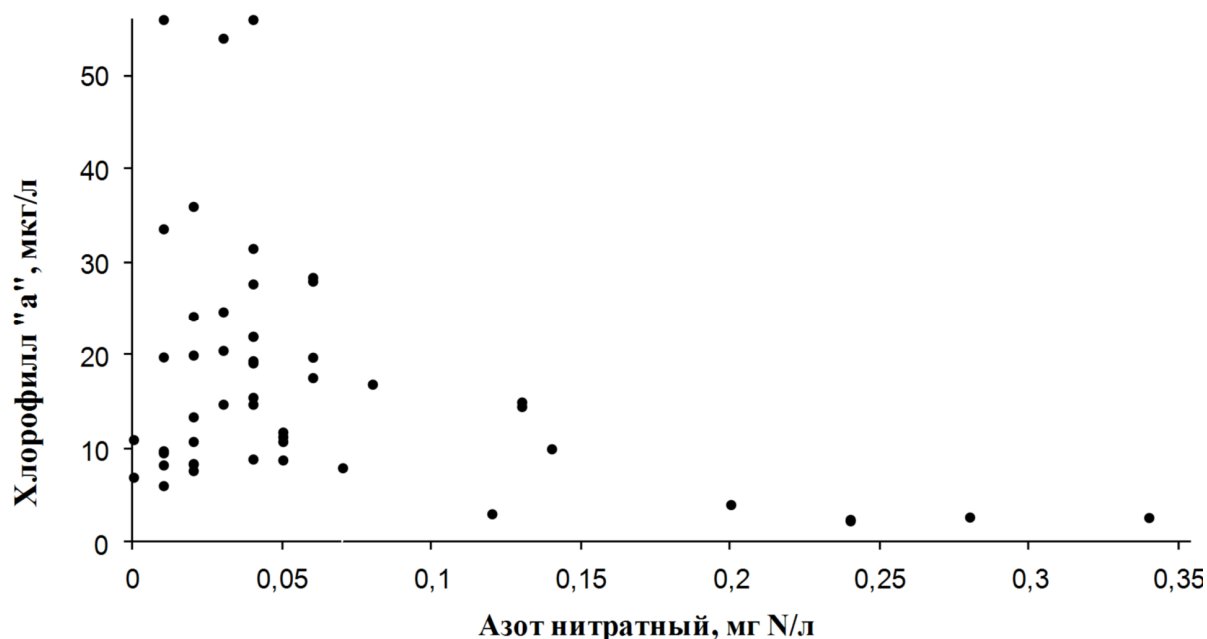


Рис. 2. Пример типичной зависимости между значениями биологической и физико-химической характеристик для Рыбинского водохранилища (июнь–август 2010 года)

Для анализа натурных данных необходим метод поиска взаимосвязи между переменными, позволяющий выявлять корреляции, скрытые при рассмотрении парных зависимостей между характеристиками. Один из методов анализа «плохо организованных» данных — переход от количественных переменных к их качественным классам. Такими классами могут быть низкие, средние и высокие значения; благополучные и неблагополучные; допустимые и недопустимые значения и т. п. После выделения качественных классов возможен поиск корреляций и других видов связи уже между качественными классами различных переменных.

Применение анализа качественных переменных, в свою очередь, сталкивается по крайней мере с двумя трудностями. Во-первых, возникает проблема выбора объективного критерия для выделения качественных классов: какие значения считать высокими и какие низкими, какие допустимыми и какие недопустимыми. Обычно границы между качественными классами вводят в большой степени субъективно: например, диапазон измерения характеристики делят на равные интервалы (в линейной или логарифмической шкале) или экспертным образом назначают высокие и низкие или другие значения. Субъективность выбора границ ставит под сомнение обоснование всех последующих процедур установления связей. Вторая трудность вызвана упомянутым выше неустранимым *in situ* влиянием на биологические характеристики всех факторов среды и состоит в том, что некоторое значение биологической характеристики может быть вызвано не исследуемым фактором, а каким-либо другим, действующим одновременно с ним.

Данная работа посвящена обсуждению следующих исследовательских проблем.

Возможно ли не субъективное, а основанное на четких критериях выделение качественных классов экологических характеристик? Если классы значений выделены, то какими методами следует оценивать связи между качественными переменными?

Предложено решение следующих исследовательских задач.

Найти связи между количественными значениями биологических и физико-химических характеристик экосистемы Рыбинского водохранилища с помощью корреляционного и регрессионного статистического анализа. В случаях, когда из-за «размытости» зависимостей эти виды анализа не обнаруживают связи, предложить методы поиска связей между качественными переменными и подходы к строгому обоснованию выделения качественных классов.

В качестве объективного обоснования для выделения качественных классов количественных переменных предложен экстремальный принцип: оптимальное разделение на классы соответствует экстремуму (минимуму или максимуму) некоторого количественного критерия. В качестве критериев в предлагаемой серии работ рассмотрены:

- Минимум суммарного отклонения «точек» класса от среднего для класса значения (метод k -средних в кластерном анализе, где k — количество качественных классов).
- Максимум коэффициента ассоциации Юла или коэффициента контингенции Пирсона, характеризующих неслучайность связи и аналогичных коэффициенту корреляции между количественными переменными в случае качественных переменных (для дихотомических признаков коэффициент Пирсона совпадает с соответствующим коэффициентом корреляции).
- Максимум прогностических коэффициентов Гуттмана, Валлиса и Чеснокова, описывающих степень достоверности утверждения «если характеристика X имеет значение в классе A , то характеристика Y имеет значение в классе B ».

Полученные в работе методы и подходы позволяют ответить на целый ряд вопросов экологических исследований:

- Какие физико-химические характеристики Рыбинского водохранилища влияют на биологические и в какой степени?
- Где проходят границы между высокими и низкими или благополучными и неблагополучными значениями для биологических характеристик Рыбинского водохранилища?
- Как объективно обосновать границы классов качества вод, устанавливаемых по биологическим показателям?
- Где проходят границы между допустимыми и недопустимыми (с точки зрения качества среды) значениями физико-химических характеристик, т. е. как объективно обосновать границы классов качества вод, устанавливаемых по физико-химическим показателям?

2. Экспериментальная часть

В качестве биологических характеристик использовали содержание пигментов и показатели флуоресценции фитопланктона, в качестве физико-химических — содержание минеральных и органических веществ, показатели кислотности, щелочности, утилизации кислорода, электропроводность, прозрачность, цветность, температуру воды и воздуха. Первичные данные, используемые для анализа, были получены в результате измерения этих характеристик в поверхностных и батометрических пробах в различных районах Рыбинского водохранилища в июне–августе 2010 года в ходе пяти рейсов научно-исследовательского судна «Академик Топчиев» Института биологии внутренних вод им. И. Д. Папанина РАН (ИБВВ РАН). Первичные данные опубликованы коллективом соавторов [Данные совместных измерений..., 2011]. Станции и даты отбора проб приведены на рисунке 3 и в таблице 1.

Сотрудниками ИБВВ РАН получены следующие показатели:

1. физические характеристики (температура воды и воздуха, электропроводность, прозрачность, цветность);
2. значения кислотности (рН) и щелочности;
3. содержание минеральных веществ (Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ , K^+ , Cl^- , SO_4^{2-} , HCO_3^- , сумма ионов);
4. содержание биогенных элементов (NO_3^- , NO_2^- , NH_4^+ , общий азот, PO_4^{3-} , общий фосфор);
5. содержание различных фракций органических веществ (ХПК, БПК₅, органический углерод во взвеси, нефтепродукты);
6. содержание хлорофиллов «а», «b», «с», феопигментов и чистого хлорофилла «а» (с поправкой на феопигменты), соотношение каротиноидов и хлорофилла, установленное по отношению поглощения экстракта пигментов при длине волны 480 и 664 нм (E_{480}/E_{664}).

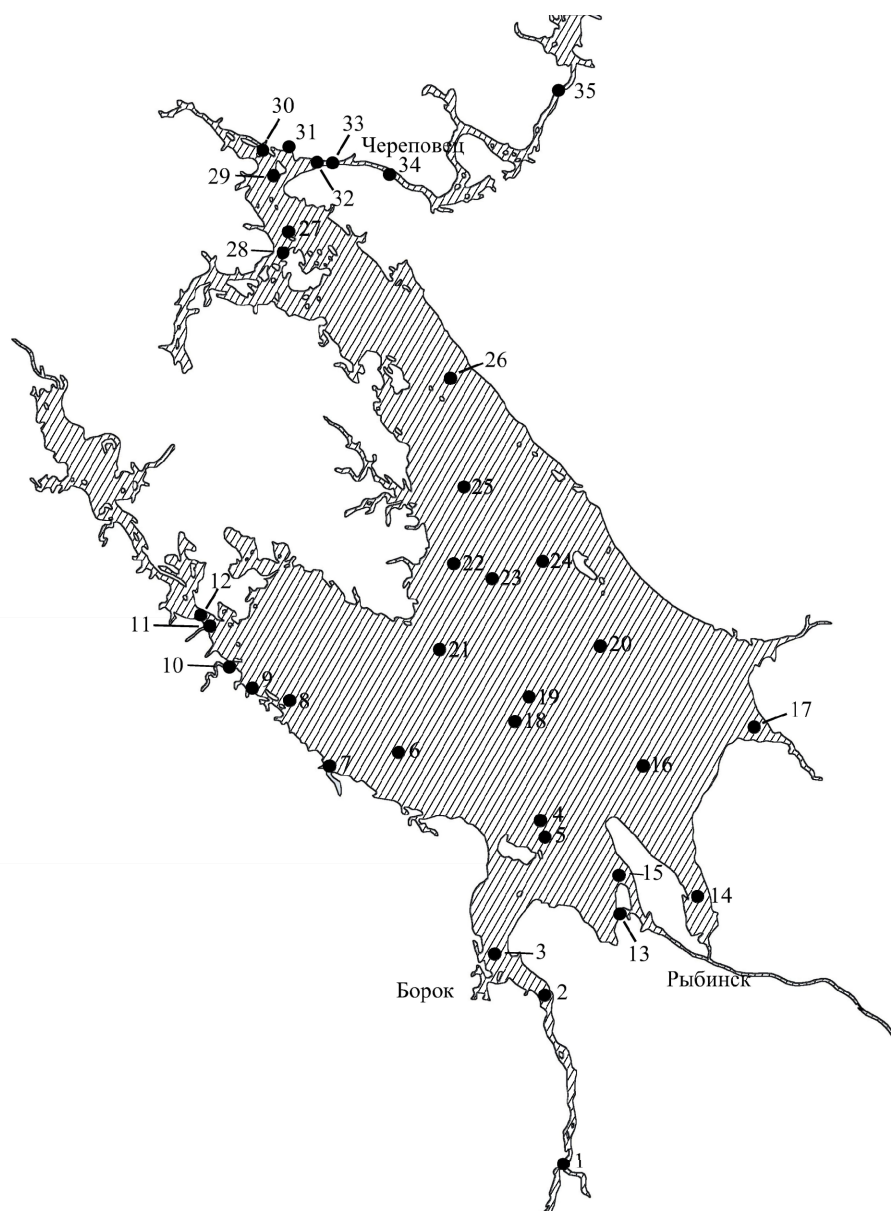


Рис. 3. Схема расположения станций отбора проб. Расшифровка номеров станций приведена в таблице 1

Сотрудниками Биологического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова получены данные по интенсивностям флуоресценции проб.

Определение солевого состава вод выполнено аккредитованным Аналитическим центром ИБВВ (аттестат аккредитации: РОСС RU.0001.512040) в соответствии с методикой выполнения измерений массовых концентраций катионов калия, натрия, лития, магния, кальция, аммония, стронция, бария [Методика выполнения измерений..., 2007] и с методикой выполнения измерений массовых концентраций хлорид-, сульфат- и фторид-ионов [Методика выполнения измерений..., 2009]. Определение содержания биогенных элементов, органических веществ, нефтепродуктов, кислотности и щелочности проводили в той же аккредитованной лаборатории с применением соответствующих аттестованных методов.

Таблица 1. Станции и даты отбора проб. На рисунке 3 станции обозначены номерами из первого столбца данной таблицы

№	Станция	Рейс 1	Рейс 2	Рейс 3	Рейс 4	Рейс 5
1	русло Волги у г. Мышкин					27.08
2	русло Волги у с. Глебово		28.06			
3	русло Волги у бывшего с. Коприно	15.06	28.06	11.07	10.08	24.08
4	русло Волги у затопленного г. Молога	15.06	28.06	11.07	10.08	24.08
5	русло Мологи у буя № 81			11.07		
6	русло Мологи против п. Брейтово	15.06	28.06	10.07	10.08	24.08
7	р. Сить у п. Брейтово		28.06			25.08
8	русло Мологи у о. Первомайка			10.07		25.08
9	устье ручья Тереха против о. Первомайка		29.06			25.08
10	русло Мологи против устья р. Себла		29.06			25.08
11	русло Мологи против устья р. Лама		29.06			25.08
12	русло Мологи у с. Противье			10.07		25.08
13	Югский залив		30.06			
14	русло Шексны у с. Волково			09.07		27.08
15	русло Волги у п. Каменники		30.06			27.08
16	русло Шексны у затопленного с. Всехсвятское		30.06	10.07		26.08
17	устье р. Ухра		30.06	09.07		
18	Молого-Шекснинское междуречье у затопленного с. Наволок	15.06	28.06	10.07	10.08	24.08
19	Наволок-2			10.07		
20	против с. Измайлово	15.06	28.06	09.07	10.08	24.08
21	против Центрального мыса		29.06			25.08
22	правая пойма Шексны близ убежища Средний Двор			09.07		
23	русло Шексны против убежища Средний Двор	15.06	28.06	09.07	10.08	24.08
24	левая пойма Шексны близ убежища Средний Двор			09.07		
25	русло Шексны у затопленного с. Ягорба		29.06	07.07, 09.07		25.08
26	русло Шексны против с. Мякса		29.06	08.07, 09.07		26.08
27	русло Шексны у затопленного с. Любец		29.06	08.07		26.08
28	мелководье к югу от с. Любец		29.06			26.08
29	русло Шексны у о. Ваганиха			08.07		
30	устье р. Суда у турбазы Торово			07.07		26.08
31	устье р. Кошта					26.08
32	сброс промышленных стоков г. Череповец			07.07		
33	ниже устья р. Ягорба			07.07		
34	русло Шексны у п. Кабачино			08.07		
35	р. Шексна в 30 км выше г. Череповец			06.07		

Хлорофиллы «а», «b», «с» определяли стандартным спектрофотометрическим методом [Lorenzen, Jeffrey, 1980; ГОСТ, 1990], феопигменты и «чистый» хлорофилл «а» — по Лоренцену [Lorenzen, 1967] с модификацией процедуры отбора проб и проведения анализов применительно к исследованиям ИБВВ в Рыбинском водохранилище [Пырина, 2000]. Величину E_{480}/E_{664} находили как отношение оптических плотностей экстракта в области наибольшего вклада поглощения каротиноидов и хлорофилла [Burkholder et al., 1959; Пырина, Сигарева, 1986]. Общую ошибку определения исследованных характеристик рассчитывали методом оценки косвенных погрешностей [Зайдель, 1974; Пырина и др., 1993]. Измерения быстрой флуоресценции фитопланктона проводили согласно «Методике измерений обилия и индикации изменения со-

стояния фитопланктона в природных водах флуоресцентным методом» (аттестат №01.00225/205-66-11, ФР.1.39.2011.11246) [Маторин, Осипов, Рубин, 2012]. В отобранных пробах бортовым флуориметром «МЕГА-11» в 3–6-кратных повторностях определяли фоновую интенсивность флуоресценции F_0 общее (все реакционные центры фотосистемы 2, возбуждаемой светом в коротковолновой части спектра, находятся в «открытом» состоянии) и максимальную интенсивность переменной флуоресценции F_m общее (все реакционные центры фотосистемы 2 находятся в «закрытом» состоянии) (рис. 4).

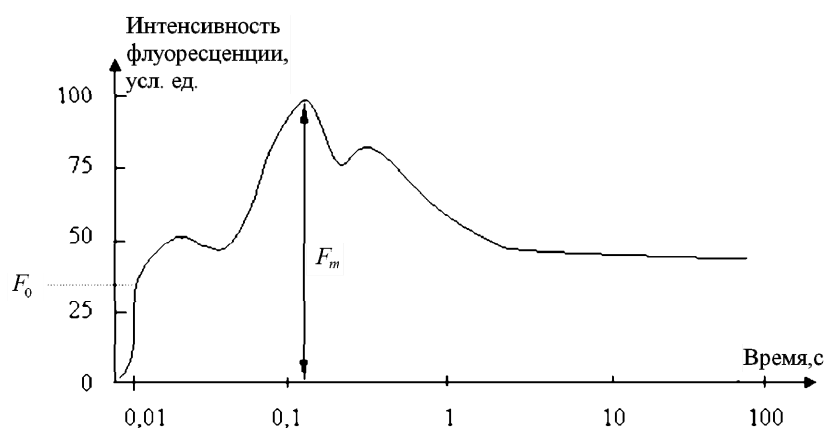


Рис. 4. Типичная кривая индукции флуоресценции фитопланктона

В связи с высоким содержанием в водах Рыбинского водохранилища растворенных органических веществ, вносящих значительный вклад в общую интенсивность флуоресценции, для корректного определения интенсивности флуоресценции фитопланктона необходимо определение интенсивности флуоресценции растворенной органики. Для учета указанного вклада исходя из предположения о том, что этот вклад достаточно постоянен для всей акватории Рыбинского водохранилища, на некоторых станциях во время второго и третьего рейсов, помимо анализа первичных проб, был произведен анализ их фильтратов. Во втором и третьем рейсах фильтрат был получен в результате смешения фильтратов проб с горизонтов 0–2 м, 2–6 м, 6 м–дно как побочный продукт в процессе определения хлорофилла стандартным методом. Однако оказалось, что вклад органических веществ существенно изменялся в зависимости от места отбора проб, поэтому в четвертом и пятом рейсах интенсивность флуоресценции фильтрата определяли для проб со всех станций и горизонтов 0–2 м, 2–6 м и 6 м–дно. После измерения интенсивности флуоресценции пробы фильтровали через трех-четырёхслойный фильтр (ватмановский фильтр JF/F с диаметром пор 0,7 мкм), F_0 фильтрата и F_m фильтрата определяли в трехкратной повторности. Величина

F_0 фильтрата должна быть равна значению F_m фильтрата, поскольку разность между F_0 и F_m связана исключительно с различиями в состоянии реакционных центров в фотосистеме 2.

В анализе исследовали следующие показатели интенсивности флуоресценции фитопланктона: F_0 общее, F_m общее, F_0 фильтрата, F_0 фитопланктона = F_0 общее – F_0 фильтрата, F_m фитопланктона = F_m общее – F_m фильтрата.

Таблица 2 дает представление о количестве проанализированных проб. Во всех таблицах значения характеристик имеют следующие размерности: температура — градусы Цельсия; электропроводность — мкСм/см; прозрачность — см по диску Секки, pH — безразмерные единицы; щелочность — мг/л; $C_{орг.}$ — мг С/л во взвеси; цветность — градусы по Сг–Со шкале; БПК₅, ХПК — мг О₂/л; нефтепродукты — мг/л; NH₄⁺, NO₂[–], NO₃[–], N_{общ.} — мг N/л; PO₄^{3–}, P_{общ.} — мг P/л; Ca²⁺, Mg²⁺, Na⁺, K⁺, Cl[–], SO₄^{2–}, HCO₃[–], сумма ионов — мг/л; пигменты — мкг/л; E₄₈₀/E₆₆₄ — относительные единицы; интенсивности флуоресценции — относительные безразмерные единицы.

Таблица 2. Число станций (с) и измерений (и) экологических характеристик

Характеристики	Номер рейса										Всего	
	1		2		3		4		5			
	с	и	с	и	с	и	с	и	с	и	с	и
Ca ²⁺	6	6	19	19	0	0	6	6	22	22	53	53
Mg ²⁺	6	6	19	19	0	0	6	6	22	22	53	53
Na ⁺	6	6	19	19	0	0	6	6	22	22	53	53
K ⁺	6	6	19	19	0	0	6	6	22	22	53	53
Cl ⁻	6	6	19	19	0	0	6	6	22	22	53	53
SO ₄ ²⁻	6	6	19	19	0	0	6	6	22	22	53	53
HCO ₃ ⁻	6	6	19	19	0	0	6	6	22	22	53	53
Сумма ионов	6	6	19	19	0	0	6	6	22	22	53	53
NH ₄ ⁺	6	6	6	6	0	0	6	6	7	7	25	25
NO ₂ ⁻	6	6	6	6	20	20	6	6	19	19	57	57
NO ₃ ⁻	6	6	6	6	20	20	6	6	19	19	57	57
N _{общ.}	6	6	6	6	20	20	6	6	19	19	57	57
PO ₄ ³⁻	6	6	6	6	20	20	6	6	19	19	57	57
P _{общ.}	6	6	6	6	20	20	6	6	19	19	57	57
Цветность	6	6	11	11	24	24	6	6	20	20	67	67
БПК ₅	6	6	6	6	20	20	6	6	19	19	57	57
ХПК	6	6	6	6	20	20	6	6	19	19	57	57
Температура воды	6	23	12	31	25	97	6	16	20	20	69	187
Электропроводность	6	23	7	26	25	97	6	16	20	20	64	182
Прозрачность	6	6	12	12	25	25	6	6	20	20	69	69
Температура воздуха	0	0	0	0	23	23	0	0	20	20	43	43
pH	6	6	6	6	20	20	6	6	19	19	57	57
Щелочность	6	6	6	6	20	20	6	6	19	19	57	57
Нефтепродукты	5	5	5	5	5	5	5	5	18	18	38	38
С _{орг.} во взвеси	6	6	6	6	18	18	6	6	19	19	55	55
Пигменты фитопланктона	6	23	11	43	23	71	6	16	12	12	58	165
Показатели интенсивности флуоресценции	6	23	20	64	26	99	6	16	23	23	81	225

3. Методы анализа связей между экологическими характеристиками

В работе использованы как стандартные методы статистического анализа количественных характеристик, так и методы выявления связей между качественными классами по таблицам сопряженности. Расчеты проводили с помощью специально созданных программ, написанных на языке Visual Basic for Application для MS Excel.

3.1. Корреляционный и регрессионный анализ

Существует несколько шкал для качественной интерпретации результатов корреляционного анализа [Chaddock, 1925; Голубков, 1998 и другие]. Из их анализа следует, что одни и те же значения коэффициентов корреляции различные специалисты интерпретируют по-разному. Объективный выбор между шкалами, по-видимому, невозможен, поэтому при интерпретации коэффициентов корреляции необходимо и достаточно сослаться на выбранную шкалу.

Множественный регрессионный анализ позволяет определить вес вклада каждого фактора (коэффициенты в уравнении регрессии) и исследовать зависимость биологической характеристики от рассчитанного по уравнению регрессии показателя, учитывающего все включенные в анализ факторы. В данных по Рыбинскому водохранилищу для измеренных биологических характеристик часто отсутствуют те или иные данные по физико-химическим характеристикам, что осложняет регрессионный анализ.

3.2. Коэффициенты связи между качественными классами

Анализ связей в таблицах сопряженности рассмотрен на примере выделения двух качественных классов для каждой из характеристик (табл. 3). Обозначения из этой таблицы использованы в дальнейших формулах.

Таблица 3. Таблица сопряженности для двух характеристик X и Y с двумя классами значений каждой («высокие значения» и «низкие значения»). Символы n_a , n_b , n_c и n_d обозначают количества наблюдений в соответствующих ячейках таблицы

	Низкие значения характеристики X	Высокие значения характеристики X
Высокие значения характеристики Y	n_a	n_b
Низкие значения характеристики Y	n_c	n_d

3.2.1. Степень неслучайности связи

В качестве критерия неслучайности связи между характеристиками обычно применяют коэффициент ассоциации Юла $Q = \frac{n_a n_d - n_b n_c}{n_a n_d + n_b n_c}$ и коэффициент контингенции Пирсона

$P = \frac{n_a n_d - n_b n_c}{\sqrt{(n_a + n_b)(n_b + n_d)(n_d + n_c)(n_c + n_a)}}$ [Миркин, 1980]. Коэффициент Юла характеризует

одностороннюю связь, т. е. для максимальности связи, когда $Q = 1$ или $Q = -1$, достаточно, чтобы была пуста хотя бы одна ячейка таблицы сопряженности. Коэффициент Пирсона характеризует двустороннюю связь. Для максимальности связи, когда $P = 1$ или $P = -1$, необходимо, чтобы одновременно были пусты ячейки « b » и « c » или « a » и « d ». Если $|P| \geq 0.5$, считают, что надежно установлена двусторонняя связь [Паниотто, Максименко, 1982].

Коэффициент контингенции Пирсона равен коэффициенту корреляции соответствующих дихотомических признаков, рассматриваемых как количественные [Миркин, 1980].

В случае более чем двух качественных классов неслучайность связи измеряют коэффициентами, основанными на величине «хи квадрат» (коэффициенте квадратической сопряженности), например, коэффициентом $\Phi = \sqrt{\chi^2 / N}$, где χ^2 — коэффициент квадратической сопряженности, описанный подробнее в разделе 3.2.2.

3.2.2. Значимость связей

Обнаружение приемлемой степени связи между характеристиками по величине коэффициента связи еще не говорит о том, что найденная связь не случайна на исследуемой выборке, тогда как в генеральной совокупности связи между характеристиками нет.

Проверка любой статистической гипотезы сводится к следующему. По выборочным значениям случайной величины подсчитывается некоторая величина — статистика критерия. При допущении, что распределение вероятностей используемой статистики критерия в условиях

справедливости проверяемой гипотезы известно, определяется вероятность появления вычисленного значения статистики. На основе принципа значимости устанавливается уровень значимости — наибольшее значение вероятности, несовместимое с признанием случайности экспериментально вычисленного значения статистики критерия. Событие называется значимым (а не случайным), если теоретическая вероятность его случайного появления меньше, чем принятый уровень значимости. Уровнем значимости определяется критическое значение статистики критерия. Как правило, если значение статистики критерия, вычисленное по экспериментальным данным, больше критического, то гипотеза отклоняется на выбранном уровне значимости. В противном случае она признается не противоречащей результатам наблюдений и не отвергается [Кобзарь, 2006, с. 20 и 202].

Сформулируем нулевую гипотезу для случая независимости характеристик X и Y . В этом контексте независимость означает, что доля общего числа индивидуумов в строке, принадлежащая произвольному, но фиксированному столбцу, одна и та же для всех строк и что доля общего числа индивидуумов в столбце, принадлежащая произвольной, но фиксированной строке, одна и та же для всех столбцов [Афифи, Эйзен, 1982]. При одинаковых долях наблюдений в ячейках по отношению к общему числу наблюдений, и, следовательно, одинаковых коэффициентах связи, значимость увеличивается с ростом общего числа наблюдений. То есть при заметной и высокой связи и низком числе наблюдений, связь может быть незначима, что свидетельствует о необходимости добавления в анализ дополнительных наблюдений. А при слабой и отсутствующей связи, но большом числе наблюдений, связь может быть значимой, что часто неверно трактуют как наличие связи, хотя связь может быть настолько слаба, что фактически ее следует трактовать как отсутствие связи.

Для оценки отклонения исследуемой таблицы сопряженности от сформулированной выше нулевой гипотезы принято использовать [Миркин, 1980, Афифи, Эйзен, 1982, Айвазян и др.,

1985] критерий «хи квадрат»: $\chi^2 = \sum_i \sum_j \frac{(f_{ij} - e_{ij})^2}{e_{ij}}$, где f_{ij} — число наблюдений в ячейке с коор-

динатами i -тая строка, j -тый столбец; e_{ij} — расчетная вероятность числа наблюдений в ячейке с координатами i -тая строка, j -тый столбец, равная $f_i f_j / N$, где f_i — число наблюдений в i -той строке, f_j — число точек в j -том столбце таблицы сопряженности, N — общее число наблюдений [Айвазян и др., 1985].

Для определения значимости связи проводили сравнение расчетной величины χ^2 с табличным значением при уровне значимости $\alpha = 0.05$ и числе степеней свободы $n = (i - 1)(j - 1)$. Если расчетная величина χ^2 больше табличной, то гипотеза об отсутствии связи отвергается. То есть это свидетельствует о значимости связи с уровнем значимости $\alpha = 0.05$. Если расчетная величина χ^2 меньше табличной, то гипотеза об отсутствии связи не отвергается. Это означает, что для установления значимой связи с уровнем значимости $\alpha = 0.05$ необходимо большее число наблюдений. В нашем случае исследования двух классов качества по обоим характеристикам и уровне значимости $\alpha = 0.05$ критическое значение критерия χ^2 равно 3.84.

Применение критерия χ^2 возможно при условии, что ячеек с расчетной $e_{ij} < 5$ не более 20 % от всех ячеек [Дубина, 2006]. При этом общее число наблюдений в таблице должно быть больше 40. Для расчета критерия χ^2 при числе наблюдений менее 40, но более 20 применяли поправку Йетса на непрерывность [Афифи, Эйзен, 1982]. Критерий χ^2 с поправкой Йетса применим только для таблиц сопряженности с двумя классами качества по обоим характеристикам.

3.3. Методы поиска экстремальных качественных связей

Метод k -средних кластерного анализа. Метод k -средних [Айвазян и др., 1989] позволяет задать число качественных классов, необходимых исследователю. В нашем случае были выделены два класса: высоких и низких значений биологических и физико-химических характеристик. Алгоритм метода k -средних стремится минимизировать суммарное квадратичное откло-

нение точек кластера от средней арифметической величины μ_i его значений: $\sum_{i=1}^k \sum_{x_j \in S_i} (x_j - \mu_i)^2$,

где k — число кластеров, S_i — полученные кластеры. Поиск границ проводили отдельно для биологических и физико-химических характеристик, поскольку совместный анализ распределения не позволяет получить четкие границы классов.

Метод максимизации коэффициентов связи (метод МКС). Алгоритм метода состоит в переборе всевозможных положений границ как для биологической, так и для физико-химической характеристики и в выборе таких двух границ, для которых коэффициент связи максимален. Алгоритм включает несколько дополнительных условий:

- 1) Количество наблюдений в ячейках таблицы сопряженности должно быть достаточно представительным, чтобы результат поиска был достоверным. Представительность можно описать критерием $ПР = n_i / N$, где n_i — количество наблюдений в ячейке i , N — общее количество наблюдений. Каждая из представительностей должна быть больше заданного параметра поиска $ПР_{\min}$ (обычно $ПР_{\min}$ варьирует в диапазоне 0.15–0.25). При поиске прямой связи ограничение по минимальной представительности накладывают на ячейки «с» и «b», при поиске обратной связи — на ячейки «a» и «d». В данной работе была принята минимальная представительность, равная 0.2.
- 2) Достоверность результатов поиска может быть обеспечена, если общее число наблюдений N не слишком мало: $N > N_{\min}$, где $N_{\min}$ — еще один параметр поиска (обычно его выбирают в пределах от 30 до 80). Кроме того, для того чтобы судить о значимости связи по критерию χ^2 , необходимо учитывать минимальное количество наблюдений для применимости данного критерия. Для двух классов качества как по биологической, так и по физико-химической характеристике минимальное число наблюдений составляет 20 (минимальное число наблюдений для применимости поправки Йетса на непрерывность), для трех и более классов минимальное число наблюдений составляет 40 [Афифи, Эйзен, 1982].
- 3) Поскольку значимость установленной связи характеризуют превышением величиной χ^2 ее табличного значения, уровень значимости по критерию χ^2 также составляет условие поиска, задаваемое исследователем (как правило, используют уровень значимости $\alpha = 0.05$ –0.10).

4. Результаты поиска связей

Рассчитаны коэффициенты корреляции между биологическими и физико-химическими характеристиками (табл. 4).

Проведено разбиение диапазонов измерения экологических характеристик на качественные классы низких и высоких значений по методу k -средних кластерного анализа. Для полученных классов рассчитаны коэффициенты Юла (табл. 5) и Пирсона (табл. 6).

Минимальная представительность для числа наблюдений в строках и столбцах таблицы сопряженности была равна 0.25.

Стоит отметить, что использование коэффициентов ассоциации в чистом виде плохо поддается трактовке, поэтому в таблице 5 представлен не только коэффициент ассоциации, но и ячейка, в связи с пустотой которой этот коэффициент оказался высок. Приведем пример трактовки полученного результата: все высокие (более 20.5 мкг/л) значения концентрации хлорофилла «a» сопряжены с низкой (менее 160 см) прозрачностью, а высокие значения прозрачности (более 160 см) сопряжены с низкими (менее 20.5 мкг/л) значениями концентрации хлорофилла.

Таблица 4. Коэффициенты корреляции между биологическими и физико-химическими характеристиками. Обозначения: значимые связи выделены жирным шрифтом. А — общий хлорофилл «а» (вместе с феопигментами); В — хлорофилл «b»; С — хлорофилл «с»; F — феопигменты; АЧ — «чистый» хлорофилл «а» (с поправкой на феопигменты); E_{480}/E_{664} — показатель соотношения каротиноидов и хлорофилла; $F_{m \text{ общее}}$ — максимальная интенсивность переменной флуоресценции в пробе без поправки на интенсивность флуоресценции фильтрата (растворенных органических веществ); $F_0 \text{ общее}$ — фоновая интенсивность флуоресценции без поправки на интенсивность флуоресценции фильтрата; $F_0 \text{ фильтрата}$ — интенсивность флуоресценции фильтрата; $F_{m \text{ фито}}$ — максимальная интенсивность переменной флуоресценции фитопланктона в пробе ($F_{m \text{ фито}} = F_{m \text{ общее}} - F_0 \text{ фильтрата}$); $F_0 \text{ фито}$ — фоновая интенсивность флуоресценции фитопланктона в пробе ($F_0 \text{ фито} = F_0 \text{ общее} - F_0 \text{ фильтрата}$). Размерности всех характеристик приведены в разделе 2

Физико-химические характеристики	Биологические характеристики										
	Показатели интенсивности флуоресценции					Хлорофилл				F	$\frac{E_{480}}{E_{664}}$
	$F_{m \text{ общ}}$	$F_{m \text{ фито}}$	$F_0 \text{ общ}$	$F_0 \text{ фито}$	$F_0 \text{ фильтрата}$	A	B	C	АЧ		
Ca ²⁺	0.39	0.41	0.33	0.35	-0.05	0.39	-0.25	0.01	0.42	0.35	-0.44
Mg ²⁺	0.28	0.28	0.23	0.22	-0.03	0.43	-0.44	0.11	0.31	0.42	-0.37
Na ⁺	0.10	0.15	0.00	0.07	-0.26	0.24	-0.31	-0.03	0.20	0.23	-0.37
K ⁺	-0.05	0.00	-0.13	-0.01	-0.25	-0.04	-0.01	0.22	-0.04	-0.03	-0.05
Cl ⁻	0.00	0.07	-0.13	-0.01	-0.41	0.01	0.20	-0.22	0.15	-0.02	-0.29
SO ₄ ²⁻	-0.10	-0.10	-0.08	-0.12	0.00	0.13	-0.04	-0.06	0.05	0.13	0.11
HCO ₃ ⁻	0.36	0.37	0.30	0.32	-0.05	0.34	-0.29	0.06	0.34	0.32	-0.40
Сумма ионов	0.35	0.36	0.29	0.30	-0.07	0.40	-0.32	0.04	0.39	0.38	-0.43
NH ₄ ⁺	0.15	0.19	0.02	0.13	-0.43	0.33	0.17	-0.16	0.28	0.32	-0.25
NO ₂ ⁻	0.04	0.11	-0.08	0.09	-0.28	-0.25	0.02	-0.10	-0.06	-0.27	0.07
NO ₃ ⁻	-0.17	-0.13	-0.19	-0.14	-0.19	-0.39	0.07	-0.17	-0.19	-0.40	0.25
N _{общ}	0.15	0.15	0.16	0.14	0.11	0.44	0.13	-0.06	0.28	0.43	-0.30
PO ₄ ³⁻	0.02	0.09	-0.08	0.05	-0.25	0.10	0.08	-0.03	0.19	0.08	-0.28
P _{общ}	0.27	0.32	0.12	0.24	-0.14	0.61	0.01	-0.19	0.47	0.58	-0.59
БПК ₅	-0.13	-0.18	-0.06	-0.18	0.11	-0.13	-0.16	0.48	-0.33	-0.07	0.36
ХПК	0.29	0.21	0.38	0.23	0.40	0.22	0.19	-0.16	0.17	0.22	-0.12
C _{орг} во взвеси	0.00	-0.05	0.06	-0.04	0.16	0.35	-0.12	-0.02	0.12	0.36	-0.07
Нефтепродукты	0.00	0.04	0.00	0.02	-0.01	0.18	-0.06	-0.06	0.09	0.19	-0.04
pH	-0.04	-0.07	0.06	-0.04	0.18	-0.18	0.02	-0.03	-0.13	-0.18	0.12
Щелочность	0.01	-0.01	0.02	0.00	-0.02	-0.17	0.31	-0.20	0.07	-0.21	0.05
Цветность	0.18	0.08	0.28	0.07	0.34	0.04	0.25	0.00	0.13	0.02	0.06
Прозрачность	-0.43	-0.44	-0.37	-0.44	-0.16	-0.57	-0.18	0.08	-0.47	-0.55	0.37
Электропроводность	0.29	0.29	0.25	0.29	0.10	0.27	0.12	-0.10	0.22	0.25	-0.26
Температура воды	0.15	0.08	0.21	0.08	0.29	0.24	-0.13	0.22	0.11	0.26	-0.21
Температура воздуха	-0.03	-0.14	0.14	-0.13	0.35	-0.47	0.23	-0.27	-0.20	-0.49	0.24

Таблица 5. Коэффициенты ассоциации Юла для таблиц сопряженности с границами между качественными классами, установленными при помощи метода k -средних. Обозначения те же, что в таблице 4

Физико-химические характеристики	Биологические характеристики										
	Показатели интенсивности флуоресценции					Хлорофилл				F	$\frac{E_{480}}{E_{664}}$
	F_m общ	F_m фито	F_0 общ	F_0 фито	F_0 фильтрата	A	B	C	AЧ		
Ca ²⁺	0.68 a	0.54 a	0.28 c	0.71 a	0.41 a	0.17 a	0.13 a	1.00 a	-0.02 a	1.00 a	-0.27 a
Mg ²⁺	0.32 a	0.21 a	-0.03 c	0.37 a	0.37 a	0.43 a	-1.00 b	1.00 a	0.25 a	0.12 a	-0.48 b
Na ⁺	-0.02 b	-0.12 b	-0.42 c	-0.09 b	-0.24 b	0.27 a	-0.39 b	-1.00 b	0.25 a	-0.18 b	-1.00 b
K ⁺	0.00 b	-0.19 b	-0.50 b	-0.05 b	-0.48 b	-0.06 b	-0.04 b	0.18 b	-0.24 b	0.18 b	-0.21 b
Cl ⁻	0.23 d	0.22 d	-0.15 d	0.18 d	-0.75 b	0.09 a	0.59 a	-0.30 b	0.08 a	0.42 a	-0.62 b
SO ₄ ²⁻	-0.57 b	-0.49 b	-0.18 d	-0.48 b	-0.48 b	0.18 a	-0.45 b	-0.24 b	0.17 a	0.47 a	-0.10 b
HCO ₃ ⁻	0.66 a	0.56 a	0.24 c	0.69 a	0.43 a	0.16 a	-0.27 a	0.12 a	-0.05 a	0.12 a	-0.48 b
Сумма ионов	0.58 a	0.45 a	0.21 c	0.61 a	0.47 a	0.16 a	-0.27 a	1.00 a	-0.05 a	0.12 a	-0.48 b
NH ₄ ⁺	0.33 d	0.68 d	0.56 d	0.56 d	-1.00 b	0.85 d	-1.00 b	-1.00 b	0.85 d	0.60 d	-0.60 b
NO ₂ ⁻	0.27 a	0.23 b	0.22 a	0.38 d	-0.59 b	0.17 b	-0.27 b	-0.15 b	0.17 b	0.50 d	0.00 b
NO ₃ ⁻	-0.26 b	-0.18 b	-1.00 b	-0.22 b	-0.55 b	-0.50 b	0.27 b	-1.00 b	-0.50 b	0.26 d	0.00 b
N _{общ}	0.60 a	0.32 b	0.66 a	0.26 d	-0.05 d	0.34 a	0.41 a	0.02 a	0.34 a	0.27 a	-0.16 a
PO ₄ ³⁻	0.18 b	-0.11 b	0.04 b	0.19 d	-0.68 b	0.34 b	0.16 b	-1.00 b	0.34 b	0.43 d	-0.71 b
P _{общ}	0.92 a	0.74 a	1.00 a	0.61 a	-0.51 c	0.69 a	0.52 a	-0.31 b	0.69 a	0.64 a	-0.85 b
БПК ₅	-1.00 b	-1.00 b	-1.00 b	-0.14 b	1.00 d	0.08 b	-0.23 b	0.89 a	0.08 b	-0.37 b	0.59 b
ХПК	1.00 a	0.54 a	1.00 a	0.48 a	0.29 a	0.31 a	0.20 a	-0.19 b	0.31 a	0.13 b	-0.05 b
C _{орг} во взвеси	0.08 b	-0.03 b	-0.50 b	-0.23 b	0.29 d	0.52 a	-0.03 b	-1.00 b	0.52 a	0.39 a	-0.15 b
Нефтепродукты	-0.25 b	-0.50 b	-0.81 b	-0.63 b	-1.00 b	0.50 d	-1.00 b	0.63 b	-1.00 b	0.14 d	-1.00 b
pH	0.10 a	0.33 a	-0.34 a	0.19 a	0.66 a	-0.45 b	-0.26 b	-1.00 b	-0.45 b	-0.43 b	0.33 b
Щелочность	0.53 a	0.69 a	-0.19 a	0.42 a	0.53 a	-0.02 a	0.32 a	-1.00 b	-0.02 a	0.31 a	0.00 a
Цветность	0.24 a	0.13 a	-0.08 a	0.27 a	0.69 d	-0.01 a	0.19 a	0.23 a	0.11 a	0.55 a	0.42 a
Прозрачность	-0.53 b	-0.43 c	-0.77 b	-0.34 c	0.42 a	-1.00 b	-0.61 b	0.20 b	-1.00 b	-1.00 b	0.32 b
Электропроводность	0.72 b	0.62 b	0.08 d	0.49 d	0.10 d	0.32 d	0.30 b	0.06 b	0.57 d	0.10 b	-0.55 b
Температура воды	0.25 a	0.20 a	0.54 a	0.34 a	0.55 a	0.81 a	-0.23 a	0.09 a	0.68 a	0.72 a	-0.73 b
Температура воздуха	-0.08 a	-0.04 a	-0.30 a	0.07 a	0.86 a	-0.78 b	1.00 a	-0.35 a	-0.78 b	0.15 a	0.36 a

Таблица. 6. Коэффициенты контингенции Пирсона для таблиц сопряженности с границами между качественными классами, установленными при помощи метода *k*-средних. Обозначения те же, что в таблице 4

Физико-химические характеристики	Биологические характеристики										
	Показатели интенсивности флуоресценции					Хлорофилл				F	$\frac{E_{480}}{E_{664}}$
	F_m общ	F_m фито	F_0 общ	F_0 фито	F_0 филтрат	A	B	C	AЧ		
Ca ²⁺	0.33	0.27	0.13	0.36	0.19	0.07	0.04	0.20	-0.01	0.2	-0.10
Mg ²⁺	0.15	0.10	-0.01	0.18	0.18	0.20	-0.46	0.24	0.11	0.03	-0.19
Na ⁺	-0.01	-0.06	-0.21	-0.04	-0.12	0.13	-0.12	-0.26	0.12	-0.05	-0.35
K ⁺	0.00	-0.08	-0.23	-0.02	-0.20	-0.02	-0.01	0.05	-0.09	0.05	-0.06
Cl ⁻	0.10	0.10	-0.06	0.08	-0.35	0.04	0.20	-0.09	0.04	0.12	-0.23
SO ₄ ²⁻	-0.29	-0.25	-0.09	-0.24	-0.24	0.09	-0.14	-0.07	0.08	0.14	-0.03
HCO ₃ ⁻	0.34	0.30	0.12	0.37	0.21	0.07	-0.09	0.03	-0.02	0.03	-0.19
Сумма ионов	0.28	0.23	0.10	0.31	0.23	0.07	-0.09	0.24	-0.02	0.03	-0.19
NH ₄ ⁺	0.11	0.27	0.20	0.20	-0.25	0.43	-0.19	-0.17	0.43	0.23	-0.23
NO ₂ ⁻	0.12	0.11	0.07	0.19	-0.32	0.07	-0.10	-0.03	0.07	0.26	0.00
NO ₃ ⁻	-0.08	-0.07	-0.16	-0.08	-0.23	-0.19	0.11	-0.17	-0.19	0.12	0.00
N _{общ}	0.30	0.15	0.24	0.12	-0.02	0.14	0.15	0.00	0.14	0.13	-0.06
PO ₄ ³⁻	0.08	-0.05	0.01	0.09	-0.36	0.15	0.06	-0.18	0.15	0.21	-0.25
P _{общ}	0.49	0.41	0.31	0.34	-0.27	0.34	0.22	-0.07	0.34	0.36	-0.38
БПК ₅	-0.23	-0.29	-0.13	-0.05	0.34	0.02	-0.06	0.38	0.02	-0.13	0.23
ХПК	0.39	0.23	0.21	0.22	0.13	0.14	0.08	-0.04	0.14	0.06	-0.02
C _{орг} во взвеси	0.03	-0.01	-0.14	-0.11	0.14	0.24	-0.01	-0.24	0.24	0.2	-0.06
Нефтепродукты	-0.07	-0.16	-0.36	-0.22	-0.35	0.18	-0.12	0.20	-0.10	0.05	-0.14
pH	0.04	0.13	-0.10	0.08	0.30	-0.17	-0.09	-0.16	-0.17	-0.19	0.13
Щелочность	0.20	0.29	-0.05	0.19	0.25	-0.01	0.11	-0.39	-0.01	0.14	0.00
Цветность	0.11	0.06	-0.03	0.14	0.40	-0.01	0.07	0.05	0.05	0.15	0.16
Прозрачность	-0.27	-0.21	-0.32	-0.16	0.21	-0.39	-0.18	0.04	-0.34	-0.18	0.12
Электропроводность	0.33	0.27	0.03	0.20	0.04	0.14	0.09	0.01	0.27	0.04	-0.15
Температура воды	0.08	0.07	0.26	0.14	0.26	0.41	-0.07	0.01	0.27	0.33	-0.34
Температура воздуха	-0.03	-0.02	-0.11	0.03	0.56	-0.44	0.29	-0.16	-0.44	0.07	0.11

Проведено разбиение диапазонов изменения экологических характеристик на качественные классы низких и высоких значений методом максимизации коэффициентов связи. Границы классов, полученные при максимизации коэффициентов Юла и Пирсона, приведены соответственно в табл. 7 и 8.

Таблица 7. Границы качественных классов, установленные на основании максимизации абсолютного значения коэффициента ассоциации Юла. В числителе — граница качественных классов для биологической характеристики, в знаменателе — граница качественных классов для физико-химической характеристики. Границы приведены только для значимых по критерию χ^2 связей. Обозначения те же, что в таблице 4

Физико-химические характеристики	Биологические характеристики										
	Показатели интенсивности флуоресценции					Хлорофилл				F	$\frac{E_{480}}{E_{664}}$
	F_m общ	F_m фито	F_0 общ	F_0 фито	F_0 фильтрата	A	B	C	AЧ		
Ca ²⁺	$\frac{2.25}{1.22}$	$\frac{0.50}{1.50}$	$\frac{0.97}{1.35}$		$\frac{0.42}{1.35}$	$\frac{10.0}{1.50}$					
Mg ²⁺	$\frac{2.25}{0.49}$	$\frac{0.50}{0.61}$	$\frac{0.97}{0.49}$	$\frac{0.70}{0.49}$	$\frac{0.42}{0.49}$						
Na ⁺	$\frac{2.25}{0.11}$	$\frac{1.98}{0.11}$	$\frac{1.06}{0.11}$	$\frac{0.70}{0.11}$	$\frac{0.26}{0.11}$						
Cl ⁻					$\frac{0.48}{0.09}$						
SO ₄ ²⁻		$\frac{0.79}{0.19}$			$\frac{0.37}{0.26}$						
HCO ₃ ⁻	$\frac{2.25}{1.59}$	$\frac{0.50}{1.98}$	$\frac{0.97}{1.68}$	$\frac{0.70}{1.59}$							
Сумма ионов	$\frac{2.25}{3.64}$	$\frac{0.50}{4.54}$	$\frac{0.97}{4.00}$		$\frac{0.42}{4.00}$						
NH ₄ ⁺											$\frac{1.52}{0.07}$
NO ₂ ⁻			$\frac{0.71}{0.00}$	$\frac{0.32}{0.01}$	$\frac{0.31}{0.01}$	$\frac{8.45}{0.00}$		$\frac{0.94}{0.00}$			
NO ₃ ⁻			$\frac{0.97}{0.07}$		$\frac{0.48}{0.05}$	$\frac{16.9}{0.08}$			$\frac{12.7}{0.08}$	$\frac{5.80}{0.08}$	
N _{общ}	$\frac{0.96}{0.88}$	$\frac{0.47}{0.88}$	$\frac{0.50}{1.00}$	$\frac{0.19}{0.88}$	$\frac{0.49}{0.77}$	$\frac{8.00}{1.00}$		$\frac{0.94}{1.00}$	$\frac{6.40}{1.00}$	$\frac{6.70}{0.88}$	$\frac{0.97}{0.77}$
PO ₄ ³⁻					$\frac{0.41}{0.04}$	$\frac{15.5}{0.02}$			$\frac{11.5}{0.02}$		$\frac{1.44}{0.04}$
P _{общ}	$\frac{1.89}{0.06}$	$\frac{1.47}{0.06}$	$\frac{0.94}{0.06}$	$\frac{0.52}{0.06}$	$\frac{0.26}{0.06}$	$\frac{10.0}{0.09}$	$\frac{0.51}{0.07}$	$\frac{2.10}{0.08}$		$\frac{2.20}{0.09}$	$\frac{1.44}{0.09}$
БПК ₅	$\frac{0.96}{1.82}$	$\frac{0.50}{1.82}$	$\frac{0.51}{1.82}$	$\frac{0.52}{1.55}$	$\frac{0.42}{2.59}$	$\frac{8.00}{2.90}$			$\frac{6.40}{2.90}$	$\frac{5.50}{1.51}$	$\frac{0.97}{1.48}$
ХПК	$\frac{1.89}{33.1}$	$\frac{1.47}{33.1}$	$\frac{0.88}{31.2}$	$\frac{0.52}{33.1}$	$\frac{0.31}{45.0}$		$\frac{0.35}{31.8}$	$\frac{0.91}{45.0}$			$\frac{1.29}{33.8}$
C _{орг} во взвеси					$\frac{0.31}{1.30}$	$\frac{22.0}{0.80}$		$\frac{0.94}{1.10}$			
pH	$\frac{1.64}{8.30}$	$\frac{1.07}{8.30}$	$\frac{0.72}{8.20}$	$\frac{0.47}{8.30}$	$\frac{0.41}{7.94}$		$\frac{0.02}{8.06}$		$\frac{6.40}{8.00}$		$\frac{1.02}{8.30}$
Щелочность		$\frac{1.12}{85.4}$	$\frac{0.70}{85.4}$	$\frac{0.34}{85.4}$	$\frac{0.39}{90.3}$	$\frac{8.93}{97.6}$	$\frac{0.00}{90.3}$	$\frac{1.90}{114.7}$	$\frac{7.30}{100.0}$	$\frac{5.40}{90.3}$	$\frac{1.14}{97.6}$
Цветность	$\frac{0.86}{70.0}$	$\frac{0.50}{70.0}$	$\frac{0.50}{70.0}$	$\frac{0.18}{70.0}$	$\frac{0.24}{60.0}$	$\frac{14.8}{70.0}$	$\frac{0.02}{65.0}$	$\frac{0.94}{70.0}$	$\frac{6.40}{75.0}$		$\frac{1.18}{55.0}$
Прозрачность	$\frac{1.89}{160.0}$	$\frac{1.47}{160.0}$	$\frac{0.94}{160.0}$	$\frac{0.52}{160.0}$	$\frac{0.49}{160.0}$	$\frac{21.0}{160.0}$	$\frac{0.35}{160.0}$	$\frac{0.96}{130.0}$	$\frac{6.40}{110.0}$	$\frac{7.27}{160.0}$	$\frac{0.92}{160.0}$
Электропроводность	$\frac{1.24}{158.3}$	$\frac{0.93}{159.8}$	$\frac{0.75}{161.9}$	$\frac{0.33}{159.8}$	$\frac{0.26}{155.9}$	$\frac{3.05}{155.5}$		$\frac{0.69}{156.2}$	$\frac{2.05}{154.8}$	$\frac{1.30}{174.4}$	$\frac{0.95}{160.0}$
Температура воды	$\frac{0.67}{23.8}$	$\frac{0.35}{23.8}$	$\frac{0.44}{24.5}$	$\frac{0.12}{23.8}$	$\frac{0.42}{18.6}$	$\frac{3.57}{24.5}$	$\frac{0.10}{18.2}$	$\frac{0.70}{25.0}$	$\frac{2.80}{24.5}$	$\frac{5.80}{18.0}$	$\frac{0.92}{18.0}$
Температура воздуха	$\frac{1.24}{24.2}$	$\frac{0.76}{25.5}$	$\frac{0.53}{20.4}$	$\frac{0.38}{24.2}$	$\frac{0.52}{18.9}$	$\frac{11.2}{25.5}$	$\frac{0.05}{25.5}$				$\frac{0.89}{24.2}$

Таблица 8. Границы качественных классов, установленные на основании максимизации абсолютного значения коэффициента контингенции Пирсона. В числителе — граница качественных классов для биологической характеристики, в знаменателе — граница качественных классов для физико-химической характеристики. Границы приведены только для значимых по критерию χ^2 связей. Обозначения те же, что в таблице 4

Физико-химические характеристики	Биологические характеристики										
	Показатели интенсивности флуоресценции					Хлорофилл				F	$\frac{E_{480}}{E_{664}}$
	$F_{т\text{ общ}}$	$F_{т\text{ фито}}$	$F_{0\text{ общ}}$	$F_{0\text{ фито}}$	$F_{0\text{ филтрат}}$	A	B	C	AЧ		
Ca ²⁺	$\frac{1.94}{1.52}$	$\frac{1.66}{1.52}$	$\frac{0.88}{1.52}$	$\frac{0.52}{1.50}$	$\frac{0.42}{1.35}$	$\frac{7.70}{1.23}$	$\frac{0.49}{1.35}$	$\frac{1.84}{1.22}$	$\frac{5.50}{1.25}$	$\frac{7.40}{1.23}$	$\frac{0.85}{1.45}$
Mg ²⁺	$\frac{1.94}{0.54}$	$\frac{1.66}{0.54}$	$\frac{0.88}{0.54}$	$\frac{0.59}{0.54}$	$\frac{0.42}{0.49}$	$\frac{7.70}{0.49}$	$\frac{0.05}{0.48}$	$\frac{1.90}{0.54}$	$\frac{7.60}{0.47}$	$\frac{7.40}{0.49}$	$\frac{0.85}{0.59}$
Na ⁺	$\frac{2.25}{0.11}$	$\frac{1.98}{0.11}$	$\frac{1.06}{0.11}$	$\frac{0.70}{0.11}$	$\frac{0.26}{0.11}$						$\frac{0.85}{0.11}$
Cl ⁻					$\frac{0.24}{0.09}$			$\frac{1.90}{0.07}$			
SO ₄ ²⁻	$\frac{1.57}{0.24}$	$\frac{1.23}{0.24}$	$\frac{0.50}{0.29}$	$\frac{0.47}{0.24}$	$\frac{0.37}{0.26}$			$\frac{1.65}{0.29}$			$\frac{0.87}{0.23}$
HCO ₃ ⁻	$\frac{1.94}{1.89}$	$\frac{1.66}{1.89}$	$\frac{0.88}{1.88}$	$\frac{0.59}{1.89}$	$\frac{0.42}{1.68}$	$\frac{7.70}{1.59}$	$\frac{0.49}{1.64}$	$\frac{2.10}{1.76}$	$\frac{5.50}{1.43}$	$\frac{7.40}{1.76}$	$\frac{0.87}{1.59}$
Сумма ионов	$\frac{1.94}{4.40}$	$\frac{1.66}{4.40}$	$\frac{0.88}{4.30}$	$\frac{0.58}{4.40}$	$\frac{0.42}{4.00}$	$\frac{7.70}{3.70}$	$\frac{0.49}{3.90}$	$\frac{2.50}{3.70}$	$\frac{4.30}{4.50}$	$\frac{12.8}{4.40}$	$\frac{0.85}{4.40}$
NH ₄ ⁺					$\frac{0.31}{0.07}$						$\frac{1.52}{0.07}$
NO ₂ ⁻	$\frac{1.24}{0.006}$		$\frac{0.71}{0.004}$	$\frac{0.32}{0.006}$	$\frac{0.31}{0.005}$	$\frac{8.50}{0.004}$		$\frac{0.94}{0.001}$			
NO ₃ ⁻			$\frac{0.97}{0.05}$		$\frac{0.51}{0.04}$	$\frac{16.9}{0.07}$		$\frac{2.50}{0.03}$	$\frac{1.60}{0.03}$	$\frac{8.00}{0.05}$	$\frac{1.52}{0.03}$
N _{общ}	$\frac{0.96}{0.88}$	$\frac{0.47}{0.88}$	$\frac{0.50}{0.88}$	$\frac{0.19}{0.88}$	$\frac{0.49}{0.77}$	$\frac{14.8}{0.88}$	$\frac{0.35}{0.88}$	$\frac{1.13}{1.00}$	$\frac{6.70}{0.88}$	$\frac{10.8}{0.88}$	$\frac{0.97}{0.80}$
PO ₄ ³⁻	$\frac{1.57}{0.019}$				$\frac{0.41}{0.029}$	$\frac{14.8}{0.024}$			$\frac{5.00}{0.024}$	$\frac{10.6}{0.018}$	$\frac{1.14}{0.019}$
P _{общ}	$\frac{1.64}{0.079}$	$\frac{1.23}{0.079}$	$\frac{0.97}{0.079}$	$\frac{0.42}{0.073}$	$\frac{0.27}{0.070}$	$\frac{11.8}{0.068}$	$\frac{0.51}{0.070}$	$\frac{1.01}{0.073}$	$\frac{3.80}{0.061}$	$\frac{9.60}{0.068}$	$\frac{1.01}{0.079}$
БПК ₅	$\frac{1.01}{1.82}$	$\frac{0.50}{1.82}$	$\frac{0.51}{1.82}$	$\frac{0.52}{1.55}$	$\frac{0.42}{2.59}$	$\frac{8.30}{2.66}$		$\frac{1.17}{1.92}$	$\frac{3.80}{1.60}$	$\frac{8.30}{2.66}$	$\frac{0.90}{1.86}$
ХПК	$\frac{1.58}{33.3}$	$\frac{1.47}{34.5}$	$\frac{0.72}{40.5}$	$\frac{0.52}{34.5}$	$\frac{0.42}{39.7}$	$\frac{14.8}{34.5}$	$\frac{0.35}{31.8}$	$\frac{0.91}{43.2}$	$\frac{4.80}{33.8}$	$\frac{10.70}{34.5}$	$\frac{1.29}{33.8}$
C _{орг} во взвеси	$\frac{0.96}{1.20}$	$\frac{0.48}{1.20}$	$\frac{0.71}{1.20}$	$\frac{0.18}{1.00}$	$\frac{0.31}{1.30}$	$\frac{14.8}{1.10}$		$\frac{1.13}{1.20}$		$\frac{10.70}{1.10}$	
pH	$\frac{0.96}{8.20}$	$\frac{1.07}{8.30}$	$\frac{0.72}{8.2}$	$\frac{0.38}{8.3}$	$\frac{0.41}{8.0}$		$\frac{0.02}{8.1}$			$\frac{7.30}{8.00}$	$\frac{1.14}{8.3}$
Щелочность		$\frac{1.12}{85.4}$	$\frac{0.70}{85.4}$	$\frac{0.34}{85.4}$	$\frac{0.36}{90.3}$	$\frac{8.90}{97.6}$	$\frac{0.00}{90.3}$	$\frac{1.90}{114.7}$	$\frac{5.4}{90.3}$	$\frac{8.30}{100.0}$	$\frac{1.14}{97.6}$
Цветность	$\frac{1.58}{65}$	$\frac{0.50}{70}$	$\frac{0.71}{65}$	$\frac{0.37}{65}$	$\frac{0.49}{65}$	$\frac{14.8}{70}$	$\frac{0.02}{65}$	$\frac{0.92}{65}$		$\frac{9.80}{70}$	$\frac{1.18}{55}$
Прозрачность	$\frac{1.24}{150}$	$\frac{0.87}{150}$	$\frac{0.97}{120}$	$\frac{0.31}{150}$	$\frac{0.49}{160}$	$\frac{16.9}{130}$	$\frac{0.47}{140}$	$\frac{0.96}{130}$	$\frac{5.9}{130}$	$\frac{11.5}{140}$	$\frac{0.90}{115}$
Электропроводность	$\frac{1.24}{162}$	$\frac{0.93}{162}$	$\frac{0.65}{162}$	$\frac{0.37}{168}$	$\frac{0.26}{156}$	$\frac{10.8}{162}$		$\frac{1.73}{169}$	$\frac{1.3}{174}$	$\frac{2.90}{155}$	$\frac{0.99}{160}$
Температура воды	$\frac{0.67}{23.8}$	$\frac{0.35}{23.8}$	$\frac{0.47}{23.8}$	$\frac{0.12}{23.8}$	$\frac{0.36}{20.8}$	$\frac{4.10}{18.4}$	$\frac{0.16}{18.4}$	$\frac{1.10}{24.5}$	$\frac{3.8}{18.4}$	$\frac{3.30}{18.4}$	$\frac{1.32}{18.9}$
Температура воздуха	$\frac{1.24}{24.2}$	$\frac{0.76}{25.5}$	$\frac{0.53}{20.4}$	$\frac{0.38}{24.2}$	$\frac{0.35}{20.4}$	$\frac{11.2}{25.5}$	$\frac{0.05}{25.5}$			$\frac{7.30}{26}$	$\frac{0.89}{24.2}$

Для полученных классов рассчитаны сами коэффициенты Юла (табл. 9) и Пирсона (табл. 10). Оценена значимость всех рассчитанных коэффициентов.

Таблица 9. Коэффициенты ассоциации Юла для таблиц сопряженности с границами между качественными классами, установленными на основании максимизации абсолютного значения коэффициента ассоциации. Обозначения те же, что в таблице 4. Прочерки означают, что границы качественных классов не найдены в связи с невыполнением условий на минимальную представительность ячеек

Физико-химические характеристики	Биологические характеристики										
	Показатели интенсивности флуоресценции					Хлорофилл				F	$\frac{E_{480}}{E_{664}}$
	F_m общ	F_m фито	F_0 общ	F_0 фито	F_0 филтрат	A	B	C	AЧ		
Ca ²⁺	1.00 a	1.00 d	0.84 a	1.00 a	0.68 a	1.00 d	-1.00 b	1.00 a	1.00 d	1.00 d	-1.00 b
Mg ²⁺	1.00 a	1.00 d	1.00 a	1.00 a	0.80 a	1.00 d	-1.00 b	1.00 a	1.00 d	1.00 d	-1.00 c
Na ⁺	0.77 a	1.00 a	0.77 a	1.00 a	-0.80 c	0.58 d	-1.00 b	1.00 a	0.53 d	1.00 d	-1.00 b
K ⁺	—	—	—	—	-0.70 c	0.51 a	—	1.00 a	0.51 a	-0.53 c	-0.24 b
Cl ⁻	-0.44 c	-0.48 c	-0.62 c	-0.48 c	-1.00 b	-0.51 c	0.66 d	-1.00 c	-0.58 c	1.00 d	-1.00 b
SO ₄ ²⁻	1.00 d	-0.75 c	1.00 d	0.70 d	-0.69 b	-0.50 c	0.70 d	1.00 d	-0.58 c	-1.00 c	1.00 a
HCO ₃ ⁻	1.00 a	1.00 d	0.85 a	1.00 a	-0.73 c	1.00 a	-1.00 b	1.00 a	1.00 d	1.00 a	-1.00 c
Сумма ионов	1.00 a	1.00 d	0.86 a	1.00 a	0.73 a	1.00 d	-1.00 b	1.00 a	1.00 d	1.00 d	-1.00 b
NH ₄ ⁺	-0.43 c	0.59 a	-0.67 c	0.59 a	-1.00 c	-1.00 c	1.00 a	-0.72 c	-1.00 c	1.00 d	-1.00 b
NO ₂ ⁻	-0.67 c	-0.49 c	-0.50 b	0.55 d	-0.88 c	-0.66 c	0.45 d	-1.00 c	-0.70 c	0.50 d	0.44 d
NO ₃ ⁻	0.42 a	0.49 a	-1.00 b	0.54 a	-0.88 b	-1.00 b	0.51 d	-1.00 b	-1.00 b	-1.00 b	1.00 d
N _{общ}	0.73 d	0.87 d	1.00 d	0.80 d	0.67 a	1.00 d	-0.60 c	1.00 d	1.00 d	0.92 a	-0.90 c
PO ₄ ³⁻	0.60 a	0.57 a	-0.48 b	0.48 a	-0.88 b	0.71 a	-0.40 b	0.38 d	0.71 a	1.00 d	-1.00 b
P _{общ}	1.00 a	1.00 a	1.00 a	1.00 a	-1.00 c	1.00 d	0.78 a	-0.69 b	1.00 d	1.00 d	-1.00 b
БПК ₅	0.67 d	0.78 d	0.84 d	0.75 a	0.93 d	1.00 d	0.51 d	1.00 a	1.00 d	0.78 a	-0.79 c
ХПК	1.00 a	1.00 a	1.00 a	1.00 a	1.00 d	1.00 a	0.80 a	1.00 d	1.00 a	1.00 a	-0.77 c
C _{орг} во взвеси	0.73 d	-1.00 b	1.00 d	-1.00 b	1.00 d	1.00 a	-0.44 c	0.80 d	0.72 a	0.57 a	-0.43 b
Нефтепродукты	-0.26 b	1.00 d	0.35 d	0.57 d	0.57 d	0.52 d	-0.50 b	-0.40 b	0.61 d	0.63 d	-0.52 b
pH	-0.77 b	-0.85 b	0.58 d	-0.77 b	0.79 a	-0.70 c	0.62 d	-0.54 c	-1.00 c	-1.00 c	0.79 d
Щелочность	0.57 a	0.69 a	0.73 a	0.63 a	0.59 a	-0.87 c	0.83 a	-1.00 b	-0.86 c	0.72 a	0.71 a
Цветность	1.00 d	1.00 d	1.00 d	0.75 d	0.93 d	0.73 d	0.55 d	1.00 d	1.00 d	-0.73 c	0.64 a
Прозрачность	-1.00 b	-1.00 b	-1.00 b	-1.00 b	-0.75 b	-1.00 b	-0.85 b	-0.89 c	-1.00 c	-1.00 b	1.00 d
Электропроводность	0.81 a	0.81 a	0.67 a	0.80 a	-0.68 c	-0.74 c	-0.36 c	-0.49 c	-0.89 c	0.53 d	-0.81 c
Температура воды	0.80 d	0.62 d	0.89 d	0.58 d	0.85 a	1.00 d	-0.72 c	0.86 d	1.00 d	1.00 a	-1.00 c
Температура воздуха	-0.64 b	-0.72 b	0.85 d	-0.66 b	1.00 a	-0.86 c	0.88 a	-0.71 c	-1.00 b	-0.68 c	0.88 d

Таблица 10. Коэффициенты контингенции Пирсона для таблиц сопряженности с границами между качественными классами, установленными на основании максимизации абсолютного значения коэффициента контингенции. Обозначения те же, что в таблице 4. Прочерки означают, что границы качественных классов не найдены в связи с невыполнением условий на минимальную представительность ячеек

Физико-химические характеристики	Биологические характеристики										
	Показатели интенсивности флуоресценции					Хлорофилл				F	$\frac{E_{480}}{E_{664}}$
	F_m общ	F_m фито	F_0 общ	F_0 фито	F_0 фильтра-та	A	B	C	AЧ		
Ca^{2+}	0.49	0.49	0.47	0.47	0.29	0.56	-0.42	0.43	0.49	0.49	-0.64
Mg^{2+}	0.39	0.39	0.40	0.35	0.32	0.48	-0.50	0.49	0.41	0.54	-0.77
Na^+	0.29	0.37	0.29	0.37	-0.32	0.26	-0.33	0.29	0.33	0.26	-0.47
K^+	—*	—	—	—	-0.24	0.18	—	0.33	-0.23	0.18	-0.09
Cl^-	-0.21	-0.22	-0.25	-0.22	-0.80	0.19	0.36	-0.55	0.30	-0.21	-0.35
SO_4^{2-}	-0.44	-0.37	0.31	-0.33	-0.37	-0.25	0.35	0.46	-0.34	-0.31	0.47
HCO_3^-	0.52	0.52	0.50	0.48	0.32	0.48	-0.45	0.41	0.44	0.44	-0.57
Сумма ионов	0.46	0.46	0.45	0.42	0.34	0.52	-0.45	0.44	0.43	0.49	-0.70
NH_4^+	0.20	0.29	-0.34	0.29	-0.75	-0.33	0.43	-0.34	0.45	-0.37	-0.50
NO_2^-	0.26	0.23	-0.27	0.29	-0.56	-0.32	0.22	-0.30	0.26	-0.27	0.20
NO_3^-	0.21	0.23	-0.31	0.23	-0.42	-0.43	0.24	-0.64	0.49	-0.48	-0.54
$\text{N}_{\text{общ}}$	0.37	0.40	0.42	0.39	0.28	0.60	0.29	0.40	0.53	0.60	-0.54
PO_4^{3-}	0.28	0.23	-0.24	0.25	-0.47	0.36	-0.17	0.17	0.29	0.37	-0.44
$\text{P}_{\text{общ}}$	0.56	0.52	0.58	0.57	-0.32	0.60	0.39	0.33	0.60	0.64	-0.68
БПК ₅	0.37	0.44	0.48	0.27	0.66	0.38	0.27	0.39	0.31	0.49	-0.32
ХПК	0.42	0.40	0.58	0.42	0.63	0.55	0.32	0.31	0.40	0.58	-0.45
$\text{C}_{\text{орг}}$ во взвеси	0.28	0.28	0.29	0.35	0.33	0.42	-0.23	0.34	0.28	0.39	-0.21
Нефтепродукты	0.12	0.31	0.17	0.19	-0.24	0.24	-0.25	-0.20	0.34	0.29	-0.23
pH	0.31	-0.37	0.32	-0.30	0.44	-0.27	0.34	-0.21	-0.27	-0.37	0.41
Щелочность	0.25	0.29	0.37	0.29	0.30	-0.42	0.51	-0.39	0.33	-0.44	0.39
Цветность	0.40	0.34	0.53	0.26	0.55	0.36	0.26	0.40	-0.25	0.34	0.29
Прозрачность	-0.48	-0.55	-0.51	-0.51	-0.25	-0.61	-0.44	-0.52	-0.51	-0.58	0.62
Электропроводность	0.41	0.40	0.32	0.39	-0.24	0.28	-0.17	-0.19	0.19	-0.31	-0.37
Температура воды	0.30	0.24	0.34	0.23	0.49	0.76	-0.30	0.32	0.47	0.73	-0.43
Температура воздуха	-0.35	-0.41	0.53	-0.36	0.61	-0.54	0.59	-0.33	-0.37	-0.54	0.55

Таблицы 8 и 10 можно интерпретировать в отношении каждой пары из биологической и физико-химической характеристики. Например, для общего хлорофилла «а» выявлена прямая двусторонняя связь с концентрацией Ca^{2+} в воде (мера связи в виде коэффициента контингенции составляет 0.56). Низкие (менее 1.23 мг-экв/л) концентрации кальция сопряжены с низким (менее 7.7 мкг/л) содержаниями общего хлорофилла «а». Высокие концентрации кальция (более 1.23 мг-экв/л) сопряжены с высоким (более 7.7 мкг/л) содержанием общего хлорофилла «а». Поскольку связь двусторонняя, верно и обратное утверждение о том, что с низким содержанием хлорофилла «а» сопряжены низкие концентрации кальция, а с высоким, соответственно, высокие, что характеризуется тем же коэффициентом контингенции 0.56.

В случаях значимой связи, но низкого коэффициента контингенции, можно использовать коэффициент ассоциации Юла. Например, для содержания хлорофилла «с» и азота нитритов

выявлена обратная связь (коэффициент контингенции « -0.30 »). В тоже время коэффициент ассоциации для этой пары равен « -1 ». Имея дополнительную информацию о том, что в таблице сопряженности наиболее пуста ячейка «с», можно утверждать, что все низкие концентрации азота нитритов (менее 0.001 мкг N/л) сопряжены с высоким (более 0.94 мкг/л) содержанием хлорофилла «с», и низкое (менее 0.94 мкг/л) содержание хлорофилла «с» сопряжено с высокими (более 0.001 , мкг N/л) концентрациями азота нитритов. Поскольку коэффициент ассоциации — односторонняя мера связи, обратные утверждения не верны.

Исходя из таблиц 8 и 10, можно давать односторонние интерпретации качественных связей, например, низкие значения концентраций хлорофилла «а» (менее 10 мкг/л) сопряжены с низким содержанием общего фосфора (менее 0.09 мг P/л) и кальция (менее 1.5 мг-экв/л), а высокие содержания фосфора (более 0.09 мг P/л) и кальция (более 1.5 мг-экв/л) сопряжены с высокими (более 10 мкг/л) концентрациями хлорофилла «а» (мера связи в виде коэффициента ассоциации Юла равна 1).

5. Обсуждение результатов

5.1. Корреляционный и множественный регрессионный анализ

Как видно из таблицы 4, при помощи корреляционного анализа данных выявлено сравнительно мало значимых связей. Максимальный коэффициент корреляции $R = 0.61$, соответствующий умеренной связи по шкале Чеддока, был выявлен между содержанием общего хлорофилла «а» и общего фосфора. Соответствующий данной связи коэффициент детерминации составил $R^2 = 0.37$, что говорит о том, что вариации значений общего хлорофилла «а» на 37% могут быть объяснены вариациями содержания общего фосфора.

Регрессионный анализ позволил определить вес вклада каждого фактора (коэффициенты в уравнении регрессии) и исследовать зависимость биологических характеристик от рассчитанного по уравнению регрессии показателя, учитывающего все включенные в анализ факторы. Для значений биологических характеристик часто отсутствуют те или иные данные по физико-химическим характеристикам. В данном случае для анализа были использованы 225 значений показателей интенсивности флуоресценции, 152 значения содержания хлорофилла и показателя его соотношения с каратиноидами и от 38 до 187 значений показателей физико-химических характеристик. Таким образом, применение множественного регрессионного анализа было осложнено недостаточным количеством данных. Для найденных регрессионных зависимостей связь между переменными практически не была обнаружена. Наибольший коэффициент детерминации (0.35) был получен для хлорофилла «а» и концентраций Mg^{2+} , Na^+ , K^+ , Cl^- , SO_4^{2-} , уравнение нелинейной регрессии: $\ln A = 0.02Mg^{2+} + 0.06Na^+ - 0.09K^+ - 0.29Cl^- + 0.61SO_4^{2-} - 0.72$.

Полученные при помощи корреляционного и регрессионного анализа результаты могут свидетельствовать как об отсутствии связи, так и о том, что данные плохо организованы. В связи с этим были выделены качественные классы характеристик и проанализированы связи между классами.

5.2. Коэффициенты Юла и Пирсона для метода k -средних кластерного анализа

Как видно из таблицы 7, результаты поиска связей для качественных классов, выделенных методом k -средних кластерного анализа, в целом несколько хуже, чем результаты поиска связей при помощи корреляционного анализа (выявлено меньше значимых связей, большинство абсолютных величин коэффициентов Пирсона ниже абсолютных величин коэффициентов корреляции). Однако коэффициенты ассоциации Юла (табл. 5), характеризующие одностороннюю связь, т. е. степень пустоты одной из ячеек таблицы сопряженности, в некоторых случаях дают хорошие результаты. Тем не менее ввиду малого числа найденных значимых связей метод

k -средних для отдельного выделения границ качественных классов индикаторов и факторов можно считать нецелесообразным.

5.3. Границы качественных классов, полученные методом МКС при максимизации коэффициентов Юла и Пирсона

Границы качественных классов при максимизации коэффициента Юла и Пирсона методом МКС приведены соответственно в таблицах 7 и 8. Границы классов для биологических характеристик, установленные по коэффициентам Юла, равны (с учетом 20 % погрешности измерений) аналогичным границам, установленным по коэффициентам Пирсона в 74 % случаев, в 10 % случаев границы по коэффициентам Юла больше границ по коэффициентам Пирсона, в 16 % случаев — меньше. Границы классов для физико-химических характеристик, установленные по коэффициентам Юла, равны аналогичным границам по коэффициентам Пирсона в 86% случаев, в 7 % случаев границы по коэффициентам Юла больше границ по коэффициентам Пирсона, в 7 % случаев — меньше. Таким образом большая часть границ классов биологических и физико-химических характеристик приблизительно совпадают.

5.4. Значения коэффициентов, полученные методом МКС при максимизации коэффициентов Юла и Пирсона

При максимизации коэффициента Юла было получено 149 значимых связей, при максимизации коэффициента Пирсона — 200, в то время как при расчете коэффициентов корреляции только 81 из 275 возможных связей. Тем самым метод МКС помог выявить значительно больше значимых связей, чем коэффициент корреляции.

Поскольку большая часть коэффициентов Пирсона значима даже в тех случаях, когда не было выявлено значимой связи по коэффициентам корреляции, метод МКС выделения границ между качественными классами выявляет взаимосвязи между характеристиками и находит значимые связи, не обнаруженные при помощи корреляционного анализа. Напомним, что для таблиц сопряженности с двумя классами качества по обоим характеристикам для заданного общего числа наблюдений критерий χ^2 возрастает пропорционально коэффициенту контингенции Пирсона. Из этого следует, что нахождение большего (чем при максимизации коэффициента контингенции) числа значимых связей для таких таблиц сопряженности невозможно. Если результаты двустороннего поиска не устраивают исследователя из-за низких коэффициентов Пирсона, целесообразно провести односторонний поиск исходя из максимизации коэффициента Юла (табл. 9).

6. Заключение

Анализ исходных данных показал, что зависимости между характеристиками не могут быть полностью описаны коэффициентами корреляции или регрессии. Применение метода k -средних для разбиения характеристик на качественные классы нецелесообразно, т. к. выявлено меньше значимых связей, чем при расчете коэффициентов корреляции, большинство абсолютных величин коэффициентов Пирсона ниже абсолютных величин коэффициентов корреляции. Применение метода МКС для поиска двух качественных классов по обоим характеристикам позволило как выявить значимые связи, не обнаруживаемые при помощи корреляционного анализа, так и лучше описать большинство выявленных связей. Ввиду того, что методы детерминационного анализа представляются более перспективными, поскольку характеризуют не отклонение взаимного распределения характеристик от случайности, а возможность прогноза качественных значений одной характеристики по качественным значениям другой, в дальнейших работах планируется применение метода МКС с использованием коэффициентов связи, взятых из детерминационного анализа, с введением большего числа классов качества и с использованием мер связи для ранжированных признаков.

Список литературы

- Афифи А., Эйзен С.* Статистический анализ: Подход с использованием ЭВМ. Пер. с англ. — М.: Мир, 1982. — 488 с.
- Айвазян С. А., Бухштабер В. М., Енюков И. С., Мешалкин Л. Д.* Прикладная статистика: Классификация и снижение размерности: Справ. изд. — М.: Финансы и статистика, 1989. — Том 3. — 607 с.
- Айвазян С. А., Енюков И. С., Мешалкин Л. Д.* Прикладная статистика: Исследование зависимостей: Справ. изд. — М.: Финансы и статистика, 1985. — Том 2. — 487 с.
- Голубков Е. П.* Маркетинговые исследования: теория, методология и практика. — М.: Финпресс, 1998. — 416 с.
- ГОСТ 17.1.04.02.90. Вода. Методика спектрофотометрического определения хлорофилла «а». — М: Гос. комитет СССР по охране природы, 1990. — 15 с.
- Данные совместных измерений биологических и физико-химических характеристик экосистемы Рыбинского водохранилища / *Бикбулатов Э. С., Бикбулатова Е. М., Булгаков Н. Г., Еришов Ю. В., Конюхов И. В., Копылов А. И., Корнева Л. Г., Лазарева В. И., Левич А. П., Литвинов А. С., Масленникова Т. С., Митропольская И. В., Осипов В. А., Отюкова Н. Г., Поддубный С. А., Поромов А. А., Пырина И. Л., Рисник Д. В., Соколова Е. А., Степанова И. Э., Цельмович О. Л.* — М.: МАКС Пресс, 2011. — 67 с.
- Дубина И. Н.* Математические основы эмпирических социально-экономических исследований: учебное пособие. — Барнаул: Изд-во Алт. ун-та, 2006. — 263 с.
- Зайдель А. М.* Ошибки измерений физических величин. — Л.: Наука, 1974. — 108 с.
- Кобзарь А. И.* Прикладная математическая статистика. Для инженеров и научных работников. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. — 816 с.
- Маторин Д. Н., Осипов В. А., Рубин А. Б.* Методика измерений обилия и индикации изменений состояния фитопланктона в природных водах флуоресцентным методом. Теоретические и практические аспекты. Учебно-методическое пособие. М.: ПКЦ Альтекс, 2012. 138 с.
- Методика выполнения измерений массовых концентраций катионов калия, натрия, лития, магния, кальция, аммония, стронция, бария в пробах питьевых, природных, сточных вод методом капиллярного электрофореза с использованием системы капиллярного электрофореза «Капель». ПНД Ф 14.1:2:4.167-2000. — М., 2007. — 27 с.
- Методика выполнения измерений массовых концентраций хлорид-ионов, нитрит-ионов, сульфат-ионов, нитрат-ионов, фторид-ионов и фосфат-ионов в пробах природных, питьевых и очищенных сточных вод с применением системы капиллярного электрофореза «Капель». ПНД Ф 14.1:2:4.157-99. — М., 2009. — 32 с.
- Миркин Б. Г.* Анализ качественных признаков и структур. — М.: Статистика, 1980. — 319 с.
- Налимов В. В., Чернова Н. А.* Статистические методы планирования экстремальных экспериментов. — М.: Наука, 1965. — 340 с.
- Паниотто В. И., Максименко В. С.* Количественные методы в социологических исследованиях. — Киев, Наукова думка, 1982. — 272 с.
- Пырина И. Л.* Многолетние исследования содержания пигментов фитопланктона Рыбинского водохранилища // Биология внутренних вод. 2000. — № 1. — С. 37–44.
- Пырина И. Л., Сигарева Л. Е.* Содержание пигментов фитопланктона в Рыбинском водохранилище в различные по гидрометеорологическим условиям годы (1972–1976) // Биология и экология водных организмов. — Л.: Наука, 1986. — С. 65–89.
- Пырина И. Л., Сметанин М. М., Сметанина Т. Л.* Статистический подход к оценке концентраций пигментов и биомассы фитопланктона // Оценка продуктивности фитопланктона. — Новосибирск: Наука, 1993. — С. 30–44.

- Рисник Д. В., Рыбка К. Ю.* О методе поиска сопряженностей между биологическими и физико-химическими характеристиками для натурных данных на примере экосистемы Рыбинского водохранилища // Материалы Всероссийской научно-практической конференции «Мологский край и Рыбинское водохранилище». — М.: МАКС Пресс, 2011. — С. 169–175.
- Burkholder P. R., Burkholder L. M., Rivero J. A.* Chlorophyll «a» in some corals and marine plants // *Nature*. 1959. Vol. 183, № 4671. P. 1338–1339.
- Chaddock R. E.* Principles and methods of statistics – Boston: Houghton Mifflin Company, 1925. 471 pp.
- Lorenzen C. J.* Determination of chlorophyll and pheopigments: spectrophotometric equations // *Limnology and Oceanography*. 1967. V. 12, № 2. P. 343–346.
- Lorenzen C. J., Jeffrey S. W.* Determination of chlorophyll in seawater // *UNESCO Technical Papers in Marine Sciences*. Paris: UNESCO, 1980. № 35. P. 3–20.