

УДК: 574.52: 57.045

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

Часть 2. Детерминационный анализ

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, Биологический факультет МГУ,

²Институт биологии внутренних вод имени И. Д. Папанова 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, Факультет почвоведения МГУ

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 некоторым физико-химическим характеристикам вод Рыбинского водохранилища проведен поиск связи между биологическими и физико-химическими характеристиками. Исследованы методы описания связи между качественными классами характеристик, основанные на прогнозе качественных значений одной характеристики по качественным значениям другой. Найдены границы качественных классов исследуемых характеристик.

Ключевые слова: флуоресценция, фитопланктон, пигменты, хлорофилл, коэффициент Валлиса, коэффициент Гуттмана, коэффициент Чеснокова, поиск связи, Рыбинское водохранилище

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 Отюкова, Сергей Артурович Поддубный, Инна Логиновна Пырина, Евгения Александровна Соколова, Ирина Эрнстовна Степанова, Полина Викторовна Фурсова, Ольга Леонидовна Цельмович

Searching for connections between biological and physico-chemical characteristics of Rybinsk reservoir ecosystem. Part 2. Determination analysis

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 methods of describing of connections between qualitative classes of characteristics, based on forecast of quality values of one characteristics by quality values of another one, are studied. The borders of quality classes of studied characteristics are found.

Keywords: fluorescence, phytoplankton, pigments, chlorophyll, Wallis coefficient, Guttman coefficient, Chesnokov coefficient, searching for connection, Rybinsk reservoir

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2013, vol. 5, no. 2, pp. 271–292 (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

1. Введение

Данная работа — вторая в серии статей, посвященных поиску подходов к описанию взаимосвязей между полученными в натуральных измерениях экологическими характеристиками. В первой статье серии [Поиск связей ..., ч. 1, 2013] подробно сформулированы проблемы, возникающие при анализе натуральных данных, в деталях описаны исходные материалы и предложены критерии неслучайности связей между характеристиками. В данной статье испытаны меры связи из детерминационного анализа, исследующего 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 будет рассмотрен частный, но важный в прикладном отношении случай анализа 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.

Напомним кратко приведённые в первой части причины, в силу которых для анализа натуральных данных неэффективно использовать методы корреляционного и множественного регрессионного анализа:

- 1) 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, и корреляционный анализ демонстрирует сравнительно низкую и незначимую величину связей.
- 2) Многомерный регрессионный анализ также осложнен рядом обстоятельств [Налимов, Чернова, 1965]: регрессионная модель должна включать слишком большое и поэтому трудно анализируемое количество членов; рассматривая натурные данные как пассивный многофакторный эксперимент, трудно оценить ошибки эксперимента и, следовательно, нельзя достаточно строго проверить гипотезу об адекватности представленных данных выбранной модели; некоторые физико-химические переменные оказываются попарно скоррелированными, поэтому их парциальное влияние на биоту невозможно выделить; даже если получен высокий множественный коэффициент корреляции, то остаётся нерешённой исходная задача о поиске «тесноты» связи между биологической переменной и каждым из факторов, поскольку частные коэффициенты корреляции остаются незначительными; недостаточность количества данных определяется фактором с самым малочисленным количеством наблюдений, сколь бы много их ни было для других переменных.
- 3) 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 выполнено очень редко.

В качестве альтернативы анализу количественных переменных предложен метод поиска взаимосвязи между качественными классами переменных, позволяющий выявлять «скрытые» корреляции между характеристиками.

Для объективного выделения границ качественных классов был предложен экстремальный принцип: оптимальное разделение на классы соответствует экстремуму (минимуму или максимуму) некоторого количественного критерия. В качестве критериев в первой части работы были 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 для качественных переменных.

Результаты, полученные при разбиении на классы методом k -средних кластерного анализа, оказались несколько хуже результатов, полученных корреляционным анализом: найдено меньше значимых связей, коэффициенты Пирсона для найденных связей в большинстве случаев были меньше коэффициентов корреляции.

Использование метода максимизации качественных связей (метода МКС) для коэффициентов Юла и Пирсона позволило выявить значимые связи, не выявленные при помощи корреляционного анализа, и лучше описать большинство выявленных связей. Однако 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 данной работе рассмотрены предлагаемые в детерминационном анализе коэффициенты Гуттмана, Валлиса и Чеснокова. Они описывают 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 характеристики 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, устанавливаемые 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, устанавливаемые по физико-химическим показателям?

2. Экспериментальная часть

Используемые для анализа первичные данные были получены в результате исследования биологических (пигментных и флуоресцентных) характеристик фитопланктона и физико-химических характеристик поверхностных и батометрических проб из различных районов Рыбинского водохранилища, собранных в июне-августе 2010 г. в ходе пяти рейсов научно-исследовательского судна «Академик Топчиев» Института биологии внутренних вод им. И. Д. Папанина РАН (ИБВВ РАН). Первичные данные опубликованы коллективом авторов [Данные совместных измерений ..., 2011].

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 длинах волн 480 и 664 нм (E_{480}/E_{664}).

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

Сведения о станциях и датах отбора проб приведены в части 1 [Поиск связей ..., ч. 1, 2013]. Всего получено 225 значений показателей интенсивности флуоресценции, 152 значения содержания хлорофилла и каротиноидов и от 38 до 187 значений показателей физико-химических характеристик.

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.

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 состояния 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 (все реакционные центры фотосистемы 2, возбуждаемой светом в коротковолновой части спектра, находятся в «открытом» состоянии) и максимальную интенсивность переменной флуоресценции (все реакционные центры фотосистемы 2 находятся в «закрытом» состоянии).

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 фильтрата, содержащего растворенную органику и не содержащего фитопланктон. Величина $F_{0 \text{ фильтрата}}$ должна быть равна значению $F_{m \text{ фильтрата}}$, 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:

$$F_{0 \text{ общее}}, F_{m \text{ общее}}, F_{0 \text{ фильтрата}}, F_{0 \text{ фитопланктона}} = F_{0 \text{ общее}} - F_{0 \text{ фильтрата}}, F_{m \text{ фитопланктона}} = F_{m \text{ общее}} - F_{m \text{ фильтрата}}$$

Во всех последующих таблицах значения характеристик имеют следующие размерности: температура — градусы Цельсия; электропроводность — мкСм/см; прозрачность — см по диску Секки, рН — безразмерные единицы; щелочность — мг/л; $S_{\text{орг}}$ — мгС/л во взвеси; цветность — градусы по Сг-Со шкале; БПК₅, ХПК — мг O₂/л; нефтепродукты — мг/л; NH₄⁺, NO₂⁻, NO₃⁻, N_{общ.} — мг N/л; PO₄³⁻, P_{общ.} — мг P/л; Ca²⁺, Mg²⁺, Na⁺, K⁺, Cl⁻, SO₄²⁻, HCO₃⁻, сумма ионов — мг/л; пигменты — мкг/л; E_{480}/E_{664} — относительные единицы; интенсивности флуоресценции — относительные безразмерные единицы.

3. Методы анализа связей между экологическими характеристиками

В работе использованы методы поиска связей между качественными классами характеристик по таблицам сопряженности. Расчёты проводили с помощью специально созданных программ, написанных на языке Visual Basic for Application для MS Excel.

3.1. Детерминационный анализ связей между качественными классами

Анализ связей в таблицах сопряженности рассмотрен на примере выделения двух качественных классов для каждой из характеристик (табл. 1).

Таблица 1. 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

Коэффициенты детерминационного анализа характеризуют степень достоверности детерминаций, а именно, прогностических утверждений вида «если характеристика X имеет значение в классе A , то характеристика Y имеет значение в классе B ». «Потребовалось несколько десятилетий для формирования представлений о том, что мера связи признаков должна не столько оценивать степень отклонения их совместного распределения от независимости, сколько характеризовать возможность прогноза значений одного из них по значениям второго. Л. Гудман и Дж. Крускал в серии статей [Goodman, Kruskal, 1954, 1959, 1963, 1972] дали обзор значительного количества коэффициентов связи качественных признаков с точки зрения операциональной интерпретации их как оценок степени достижения той или иной цели. В этом смысле меры связи как меры качества прогноза или описания могут рассматриваться как оценки степени достижения решения основных задач анализа данных. Самый точный прогноз достигается при однозначном или взаимно-однозначном соответствии значений признаков. Такая ситуация оценивается экстремальным значением меры связи. Критерием отсутствия связи обычно считается статистическая независимость признаков. Однако последовательная реализация идеи о мерах связи как оценках возможности предсказания может приводить... и к иным представлениям о максимально несвязанных признаках.» [Миркин, 1980, с. 94]

С. В. Чесноков [1982] характеризует меру связи критерием точности $T = \frac{n_1}{n_1 + n_2}$, где n_1 и n_2 — количества наблюдений в каких-либо соседних ячейках таблицы сопряженности. Например, точность $T_{a,b} = \frac{n_a}{n_a + n_b}$ ячейки « a » при сравнении с ячейкой « b » есть доля случаев среди высоких значений характеристики Y , когда характеристика X имеет низкие значения. Или точность $T_{d,b} = \frac{n_d}{n_d + n_b}$ ячейки « d » при сравнении с ячейкой « b » есть доля случаев среди высоких значений характеристики X , когда характеристика Y имеет низкие значения.

Коэффициенты точности характеризуют степень достоверности приведенных утверждений независимо от того, вызвана эта точность зависимостью характеристик друг от друга или собственными распределениями характеристик. Для примера предположим, что границы, разделяющие высокие и низкие значения характеристик X и Y , проведены, причем доля высоких значений характеристики Y среди всех её значений составляет 10 %, а доля высоких значений характеристики X среди всех её значений составляет 15 %. В случае отсутствия связи доля высоких и низких значений характеристики Y не зависят от качественного класса характеристики X , т. е. и для высоких, и для низких значений характеристики X доля высоких значений характеристики Y составляет 10 %, что соответствует точности 0.9 ячейки « a » по характеристике Y . Аналогично для высоких и для низких значений характеристики Y доля высоких значений характеристики X составляет 15 %, что соответствует точности 0.85 ячейки « d » по характери-

стике X . Таким образом, мы получаем высокие точности, обусловленные только собственными распределениями характеристик при отсутствии связи между ними. Чтобы оценить именно взаимозависимость характеристик, исследователи вводят коэффициент существенности (термин взят из работы С. В. Чеснокова [1982] и в дальнейшем изложении будет обозначен как коэффициент Чеснокова). Существенность характеризует приращение доли правильных предсказаний одной характеристики, полученное за счет использования информации о значении другой [Миркин, 1980]. Другими словами, существенность представляет собой точность детерминации, например, при сравнении ячейки « a » с ячейкой « b », за вычетом аналогичной точности в случае отсутствия связи между исследуемыми характеристиками, т. е. точность, обусловленную только распределением характеристики X . Существенность детерминации при сравнении ячейки « a » с ячейкой « b » рассчитывают по формуле $C_{a,b} = \frac{n_a}{n_a + n_b} - \frac{n_a + n_c}{N}$, существенность детерминации при сравнении ячейки « d » с ячейкой « b » рассчитывают по формуле $C_{d,b} = \frac{n_d}{n_d + n_b} - \frac{n_d + n_c}{N}$. Результирующую существенность детерминации при сравнении ячеек « a » и « d » с ячейкой « b » можно описать коэффициентом $C_{рез} = \sqrt{C_{a,b} C_{d,b}}$. Результирующую точность — коэффициентом $T_{рез} = \sqrt{T_{a,b} T_{d,b}}$.

Коэффициенты результирующей точности и существенности характеризуют одностороннюю связь между характеристиками, т. е. максимальны в случае отсутствия наблюдений в единственной ячейке таблицы сопряженности.

В качестве меры связи в детерминационном анализе также применяют коэффициенты Гуттмана [Guttman, 1941]:

$$\frac{\max(n_a, n_b) + \max(n_c, n_d) - \max(n_a + n_c, n_b + n_d)}{N(1 - \max(n_a + n_c, n_b + n_d)/N)} \text{ или}$$

$$\frac{\max(n_a, n_c) + \max(n_b, n_d) - \max(n_a + n_b, n_c + n_d)}{N(1 - \max(n_a + n_b, n_c + n_d)/N)},$$

соответственно для прямого и обратного прогноза. Коэффициент Гуттмана максимален и равен 1 только тогда, когда имеется однозначная сопряженность между качественными классами характеристик X и Y . Если исследуемые характеристики статистически независимы, то коэффициент Гуттмана равен нулю, но это равенство нулю может достигаться и в других случаях. Для этого достаточно, чтобы максимумы $\max(n_a, n_b)$ и $\max(n_c, n_d)$ относились к одному качественному классу по характеристике Y . Аналогичная ситуация для обратного прогноза, когда $\max(n_a, n_c)$ и $\max(n_b, n_d)$ относятся к одному качественному классу по характеристике X . Чтобы проиллюстрировать этот недостаток, рассмотрим случай, когда в ячейке « a » находится 50 наблюдений, в ячейке « b » — ноль, в ячейке « c » — 100, в ячейке « d » — 50. Рассмотрим составляющие формулы для прямого коэффициента Гуттмана: $\max(n_a, n_b) = n_a = 50$, $\max(n_c, n_d) = n_c = 100$, $\max(n_a + n_c, n_b + n_d) = n_a + n_c = 150$, соответственно коэффициент равен нулю, хотя очевидно, что связь между характеристиками есть. Это является существенным недостатком коэффициента Гуттмана.

Ещё одна мера связи в детерминационном анализе — коэффициент Валлиса, известный также под именем Гудмана–Крускала [Goodman, Kruskal, 1954]:

$$V = \frac{N \left(\frac{n_a^2 + n_b^2}{n_a + n_b} + \frac{n_c^2 + n_d^2}{n_c + n_d} \right) - (n_a + n_c)^2 - (n_b + n_d)^2}{N^2 - (n_a + n_c)^2 - (n_b + n_d)^2}.$$

Когда характеристики статистически независимы, выполнено $V = 0$. Максимального значения ($V = 1$) коэффициент Валлиса достигает, если возможен однозначный прогноз качественного класса характеристики Y по качественному классу характеристики X , и наоборот. Коэффициенты Гутмана и Валлиса характеризуют двустороннюю связь: для максимальной связи необходимо, чтобы одновременно были пусты ячейки « b » и « c » или « a » и « d ».

В части 1 предлагаемой читателю серии статей [Поиск связей ..., ч. 1, 2013] подробно обоснована необходимость оценки не только силы связей, но и их значимости по статистическим критериям. Напомним кратко, что для оценки значимости принято [Миркин, 1980; Афифи, Эйзен, 1982; Айвазян и др., 1985] использовать критерий «хи квадрат»:

$$\chi^2 = \sum_i \sum_j \frac{(f_{ij} - e_{ij})^2}{e_{ij}}, \text{ где } f_{ij} \text{ — число наблюдений в ячейке с координатами } i\text{-я строка, } j\text{-й столбец; } e_{ij} \text{ — расчетная вероятность числа наблюдений в ячейке с координатами } i\text{-я строка, } j\text{-й столбец, равная } f_i f_j / N, \text{ где } f_i \text{ — число наблюдений в } i\text{-той строке, } f_j \text{ — число точек в } j\text{-м столбце таблицы сопряженности, } N \text{ — общее число наблюдений [Айвазян и др., 1985].}$$

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. Т. е. 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 обеим характеристикам и уровне значимости $\alpha = 0.05$ критическое значение критерия 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 обеим характеристикам.

Его рассчитывают по следующей формуле: $\chi^2 = \sum_i \sum_j \frac{(|f_{ij} - e_{ij}| - 0,5)^2}{e_{ij}}$.

3.2. Метод максимизации коэффициентов связи (метод МКС)

Алгоритм метода состоит в переборе всевозможных положений границ как для биологической, так и для физико-химической характеристик 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 величиной $ПР = n_i / N$, здесь 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 « c » 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} — ещё один параметр поиска (обычно его выбирают в пределах от 30 до 80). Чтобы судить о значимости связи по критерию χ^2 , необходимо учитывать минимальное количество наблюдений для применимости данного критерия. Для двух классов качества минимальное число наблюдений по обеим характеристи-

кам 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) Значимость установленной связи определена тем, превышает ли величина χ^2 некоторое табличное значение, которое зависит от заданного уровня значимости. Поэтому уровень значимости критерия χ^2 также является параметром поиска, задаваемым исследователем (как правило, используют уровень значимости $\alpha = 0.05-0.10$).
- 4) Для МКС с максимизацией коэффициента Чеснокова введено ограничение на минимальную точность $T_{\min} = 0.5$. Это обусловлено тем, что коэффициент Чеснокова отражает одно-стороннюю связь, в связи с этим точность менее 0.5 обозначает пустоту уже не исследуемой ячейки, а соседней с ней.

4. Результаты поиска связей

В первой части работы [Поиск связей ..., ч. 1, 2013] установлено, что результаты поиска связей между качественными классами, выделенными методом k -средних кластерного анализа по отдельности для каждой характеристики, отличаются от результатов, полученных при помощи корреляционного анализа (выявлено меньше значимых связей, большинство абсолютных величин коэффициентов Пирсона ниже абсолютных величин коэффициентов корреляции). Поэтому для прогностических коэффициентов разбиение диапазонов изменения экологических характеристик на качественные классы низких и высоких значений проведено только методом максимизации коэффициентов связи. Границы классов, полученные при максимизации коэффициентов Чеснокова, Гуттмана и Валлиса приведены соответственно в таблицах 2, 3 и 4.

Таблица 2. Границы качественных классов, установленные на основании максимизации коэффициентов существенности Чеснокова. Границы приведены только для значимых по критерию χ^2 связей. Обозначения: Границы качественных классов представлены в виде «граница качественных классов для биологической характеристики / граница качественных классов для физико-химической характеристики». Символами a, b, c, d обозначены ячейки, при поиске сравнительной пустоты которых найдены приведенные границы. 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 общ — максимальная интенсивность переменной флуоресценции в пробе без поправки на интенсивность флуоресценции фильтрата (растворенных органических веществ); F_0 общ — фоновая интенсивность флуоресценции без поправки на интенсивность флуоресценции фильтрата; F_0 фильтрата — интенсивность флуоресценции фильтрата; F_m фито — максимальная интенсивность переменной флуоресценции фитопланктона в пробе (F_m фито = F_m общ - F_0 фильтрата); F_0 фито — фоновая интенсивность флуоресценции фитопланктона в пробе (F_0 фито = F_0 общ - F_0 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 общ	F_m фито	F_0 общ	F_0 фито	F_0 фильтрата	А	В	С	АЧ		
Ca ²⁺	<u>0.93 d</u> 1.50; <u>2.25 a</u> 1.35	<u>0.79 d</u> 1.50; <u>1.98 a</u> 1.35	<u>0.88 d</u> 1.52; <u>0.97 a</u> 1.35	<u>0.24 d</u> 1.50; <u>0.70 a</u> 1.35	<u>0.42 a</u> 1.35	<u>11.8 d</u> 1.50	<u>0.49 b</u> 1.35		<u>4.30 d</u> 1.50; <u>5.50 a</u> 1.22	<u>9.81 d</u> 1.50	<u>0.97 b</u> 1.50; <u>0.87 c</u> 1.30
Mg ²⁺	<u>2.25 a</u> 0.49	<u>0.50 d</u> 0.61; <u>1.98 a</u> 0.49	<u>0.97 a</u> 0.49	<u>0.70 a</u> 0.49	<u>0.42 a</u> 0.49	<u>7.70 d</u> 0.54	<u>0.49 b</u> 0.52; <u>0.05 c</u> 0.44	<u>1.90 d</u> 0.54; <u>2.00 a</u> 0.47	<u>7.60 a</u> 0.47	<u>7.40 d</u> 0.49	<u>0.85 b</u> 0.59; <u>0.85 c</u> 0.49
Na ⁺	<u>2.25 a</u> 0.11	<u>1.98 a</u> 0.11	<u>1.06 a</u> 0.11	<u>0.70 a</u> 0.11	<u>0.26 c</u> 0.11						<u>0.85 c</u> 0.11

Таблица 2 (продолжение)

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		
Cl ⁻					<u>0.28 b</u> <u>0.09;</u> <u>0.24 c</u> <u>0.09</u>			<u>1.90 c</u> <u>0.07</u>			
SO ₄ ²⁻	<u>1.57 b</u> <u>0.24;</u> <u>0.84 d</u> <u>0.29;</u> <u>0.79 c</u> <u>1.57 c</u> <u>0.24</u>	<u>1.19 b</u> <u>0.26;</u> <u>0.79 c</u> <u>0.19</u>	<u>0.50 d</u> <u>0.29</u>	<u>0.47 b</u> <u>0.24;</u> <u>0.32 c</u> <u>0.24</u>	<u>0.37 b</u> <u>0.26;</u> <u>0.37 c</u> <u>0.26</u>			<u>1.65 d</u> <u>0.29</u>			<u>0.87 d</u> <u>0.23</u>
HCO ₃ ⁻	<u>1.51 d</u> <u>1.88;</u> <u>2.25 a</u> <u>1.68</u>	<u>0.79 d</u> <u>1.88;</u> <u>1.98 a</u> <u>1.68</u>	<u>0.52 d</u> <u>1.82;</u> <u>0.88 a</u> <u>1.88</u>	<u>0.30 d</u> <u>1.88;</u> <u>0.70 a</u> <u>1.68</u>	<u>0.42 a</u> <u>1.68</u>	<u>7.70 d</u> <u>1.76</u>	<u>0.49 b</u> <u>1.64;</u> <u>0.05 c</u> <u>1.64</u>	<u>2.50 a</u> <u>1.51</u>	<u>3.93 d</u> <u>1.59;</u> <u>5.50 a</u> <u>1.43</u>	<u>7.40 d</u> <u>1.76</u>	<u>0.97 b</u> <u>1.88;</u> <u>0.87 c</u> <u>1.59</u>
Сумма ионов	<u>0.93 d</u> <u>4.46;</u> <u>2.25 a</u> <u>4.00</u>	<u>0.50 d</u> <u>4.46;</u> <u>1.98 a</u> <u>4.00</u>	<u>0.88 d</u> <u>4.44;</u> <u>0.97 a</u> <u>4.00</u>	<u>0.24 d</u> <u>4.46;</u> <u>0.70 a</u> <u>4.00</u>	<u>0.34 d</u> <u>3.98;</u> <u>0.42 a</u> <u>4.00</u>	<u>11.8 d</u> <u>4.54</u>	<u>0.49 b</u> <u>3.86;</u> <u>0.05 c</u> <u>3.86</u>	<u>2.50 a</u> <u>3.72</u>	<u>4.30 d</u> <u>4.54</u>	<u>7.40 d</u> <u>4.24</u>	<u>0.97 b</u> <u>4.54;</u> <u>0.87 c</u> <u>3.78</u>
NH ₄ ⁺					<u>0.31 b</u> <u>0.07;</u> <u>0.27 c</u> <u>0.06</u>						<u>1.52 b</u> <u>0.07</u>
NO ₂ ⁻	<u>1.24 d</u> <u>0.01</u>		<u>0.71 b</u> <u>0.00</u>	<u>0.32 d</u> <u>0.01;</u> <u>0.32 a</u> <u>0.01</u>	<u>0.31 b</u> <u>0.01;</u> <u>0.31 c</u> <u>0.01</u>	<u>8.45 c</u> <u>0.00</u>		<u>0.94 c</u> <u>0.00</u>			
NO ₃ ⁻			<u>0.97 b</u> <u>0.05</u>		<u>0.48 b</u> <u>0.05;</u> <u>0.31 c</u> <u>0.04</u>	<u>16.9 b</u> <u>0.07;</u> <u>17.6 c</u> <u>0.05</u>		<u>2.50 b</u> <u>0.03;</u> <u>2.07 c</u> <u>0.03</u>	<u>5.80 b</u> <u>0.07;</u> <u>1.60 d</u> <u>0.03;</u> <u>1.60 a</u> <u>0.03</u>	<u>12.7 b</u> <u>0.07;</u> <u>8.00 c</u> <u>0.05</u>	<u>1.52 b</u> <u>0.03;</u> <u>0.90 d</u> <u>0.07;</u> <u>1.52 c</u> <u>0.03</u>
N _{общ}	<u>0.96 d</u> <u>0.88;</u> <u>1.64 a</u> <u>0.78</u>	<u>0.47 d</u> <u>0.88;</u> <u>1.47 a</u> <u>0.78</u>	<u>0.50 d</u> <u>0.88;</u> <u>0.95 a</u> <u>0.77</u>	<u>0.19 d</u> <u>0.88;</u> <u>0.52 a</u> <u>0.77</u>	<u>0.49 a</u> <u>0.77</u>	<u>14.8 d</u> <u>1.00;</u> <u>14.8 a</u> <u>0.88</u>	<u>0.35 d</u> <u>0.88</u>	<u>0.94 d</u> <u>1.00;</u> <u>1.20 a</u> <u>0.77</u>	<u>2.20 d</u> <u>0.80;</u> <u>6.70 a</u> <u>0.88</u>	<u>10.8 d</u> <u>1.00;</u> <u>10.8 a</u> <u>0.88</u>	<u>1.29 b</u> <u>0.80;</u> <u>0.97 c</u> <u>0.77</u>
PO ₄ ³⁻	<u>1.57 a</u> <u>0.02</u>				<u>0.41 b</u> <u>0.03;</u> <u>0.41 c</u> <u>0.03</u>	<u>14.8 d</u> <u>0.02;</u> <u>15.5 a</u> <u>0.02</u>				<u>8.30 d</u> <u>0.03;</u> <u>11.5 a</u> <u>0.02</u>	<u>1.44 b</u> <u>0.04;</u> <u>1.14 c</u> <u>0.02</u>
P _{общ}	<u>1.25 d</u> <u>0.08;</u> <u>1.64 a</u> <u>0.07</u>	<u>0.55 d</u> <u>0.08;</u> <u>1.47 a</u> <u>0.07</u>	<u>0.95 d</u> <u>0.08;</u> <u>0.95 a</u> <u>0.07</u>	<u>0.42 d</u> <u>0.08;</u> <u>0.42 a</u> <u>0.07</u>	<u>0.36 b</u> <u>0.08;</u> <u>0.28 c</u> <u>0.06</u>	<u>9.81 d</u> <u>0.08;</u> <u>11.8 a</u> <u>0.06</u>	<u>0.48 d</u> <u>0.07;</u> <u>0.51 a</u> <u>0.07</u>	<u>2.10 b</u> <u>0.08;</u> <u>1.01 d</u> <u>0.07;</u> <u>1.78 c</u> <u>0.06;</u> <u>1.11 a</u> <u>0.07</u>	<u>3.93 d</u> <u>0.08;</u> <u>4.50 a</u> <u>0.06</u>	<u>9.81 d</u> <u>0.08;</u> <u>9.59 a</u> <u>0.07</u>	<u>1.14 b</u> <u>0.08;</u> <u>1.03 c</u> <u>0.07</u>

Таблица 2 (продолжение)

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		
БПК ₅	<u>0.96 d</u> 1.82; <u>1.72 a</u> 1.90	<u>0.50 d</u> 1.82	<u>0.51 d</u> 1.82; <u>0.94 a</u> 1.90	<u>0.52 a</u> 1.55	<u>0.42 d</u> 2.59; <u>0.42 a</u> 1.90	<u>8.30 d</u> 2.66; <u>14.8 a</u> 1.80		<u>1.17 d</u> 2.53	<u>5.50 a</u> 1.51	<u>8.30 d</u> 2.66; <u>10.7 a</u> 1.80	<u>0.97 c</u> 1.48
ХПК	<u>0.84 d</u> 40.5; <u>1.58 a</u> 33.3	<u>0.47 d</u> 40.5; <u>1.47 a</u> 34.5	<u>0.72 d</u> 40.5; <u>0.94 a</u> 34.5	<u>0.18 d</u> 43.2; <u>0.52 a</u> 34.5	<u>0.31 d</u> 39.7; <u>0.42 a</u> 38.4	<u>14.8 d</u> 34.5; <u>14.8 a</u> 34.5	<u>0.35 a</u> 31.8	<u>0.91 d</u> 43.2	<u>4.00 d</u> 33.8; <u>5.83 a</u> 34.5	<u>10.7 d</u> 34.5; <u>10.7 a</u> 34.5	<u>1.29 b</u> 33.8; <u>0.92 c</u> 34.5
C _{орг} во взвеси	<u>0.96 d</u> 1.20	<u>0.48 d</u> 1.20	<u>0.50 d</u> 1.30	<u>0.18 d</u> 1.00	<u>0.31 d</u> 1.30; <u>0.41 a</u> 1.10	<u>14.8 d</u> 1.10; <u>22.0 a</u> 0.80		<u>0.94 d</u> 1.10		<u>10.7 d</u> 1.10; <u>16.8 a</u> 0.90	
pH	<u>1.64 b</u> 8.30; <u>0.96 d</u> 8.20	<u>1.07 b</u> 8.30	<u>0.55 d</u> 8.20; <u>0.72 a</u> 8.20	<u>0.47 b</u> 8.30	<u>0.38 d</u> 8.16; <u>0.41 a</u> 8.01		<u>0.02 a</u> 8.06			<u>7.30 c</u> 8.00	<u>1.02 d</u> 8.30; <u>1.06 a</u> 7.95
Щелочность		<u>1.12 a</u> 85.4	<u>0.62 d</u> 90.3; <u>0.70 a</u> 85.4	<u>0.34 a</u> 85.4	<u>0.36 d</u> 90.3; <u>0.39 a</u> 90.3	<u>8.93 b</u> 100.0; <u>8.93 c</u> 97.6	<u>0.01 d</u> 97.6; <u>0.02 a</u> 95.2	<u>1.90 b</u> 114.7	<u>5.40 a</u> 90.3	<u>8.45 b</u> 100.0; <u>8.30 c</u> 100.0	<u>1.14 d</u> 97.6; <u>1.14 a</u> 97.6
Цветность	<u>0.90 d</u> 70.0; <u>1.58 a</u> 65.0	<u>0.50 d</u> 70.0; <u>0.99 a</u> 65.0	<u>0.71 d</u> 65.0; <u>0.78 a</u> 65.0	<u>0.18 d</u> 70.0; <u>0.37 a</u> 65.0	<u>0.24 d</u> 60.0; <u>0.48 a</u> 60.0	<u>14.8 d</u> 70.0	<u>0.02 d</u> 65.0	<u>0.92 d</u> 65.0; <u>1.65 a</u> 60.0		<u>9.81 d</u> 70.0	<u>1.18 a</u> 55.0
Прозрачность	<u>1.98 b</u> 130.0; <u>1.16 c</u> 150.0	<u>0.87 b</u> 150.0; <u>0.80 c</u> 150.0	<u>0.93 b</u> 130.0; <u>0.70 c</u> 130.0	<u>0.37 b</u> 140.0; <u>0.38 c</u> 120.0	<u>0.49 b</u> 160.0	<u>16.9 b</u> 130.0; <u>11.3 c</u> 130.0	<u>0.47 b</u> 140.0; <u>0.47 c</u> 140.0	<u>0.96 b</u> 130.0; <u>0.96 c</u> 130.0	<u>7.60 b</u> 130.0; <u>4.30 c</u> 150.0	<u>11.5 b</u> 140.0; <u>8.45 c</u> 130.0	<u>0.90 d</u> 130.0; <u>1.06 a</u> 120.0
Электропроводность	<u>1.32 d</u> 169.8; <u>0.86 c</u> 161.2; <u>1.24 a</u> 161.9	<u>0.88 d</u> 171.5; <u>0.93 a</u> 161.9	<u>0.65 d</u> 161.9; <u>0.73 a</u> 161.9	<u>0.21 d</u> 161.0; <u>0.33 a</u> 161.9	<u>0.26 c</u> 155.9	<u>7.25 d</u> 161.9; <u>3.05 c</u> 155.5; <u>10.8 a</u> 162.3		<u>1.73 b</u> 168.8; <u>0.69 c</u> 156.2	<u>1.30 d</u> 174.4	<u>8.80 d</u> 162.5; <u>2.05 c</u> 154.8; <u>8.80 a</u> 162.5	<u>1.59 b</u> 174.4; <u>0.99 c</u> 159.8
Температура воды	<u>0.67 d</u> 23.8; <u>0.87 c</u> 20.2; <u>1.23 a</u> 19.0	<u>0.35 d</u> 23.8; <u>0.85 a</u> 19.0	<u>0.47 d</u> 23.8; <u>0.57 a</u> 19.2	<u>0.12 d</u> 23.8; <u>0.30 a</u> 19.0	<u>0.35 d</u> 23.6; <u>0.36 a</u> 20.8	<u>4.08 d</u> 20.2; <u>6.00 a</u> 18.4	<u>0.36 b</u> 24.9; <u>0.16 c</u> 18.4	<u>0.80 d</u> 24.5; <u>1.90 a</u> 18.4	<u>2.72 d</u> 18.9; <u>4.30 a</u> 18.4	<u>3.30 d</u> 23.9; <u>3.30 a</u> 18.4	<u>1.32 b</u> 18.9; <u>1.14 d</u> 24.1; <u>1.18 c</u> 18.4
Температура воздуха	<u>1.24 b</u> 24.2; <u>1.24 c</u> 24.2; <u>1.02 a</u> 20.4	<u>0.76 b</u> 25.5; <u>0.80 c</u> 24.2	<u>0.53 d</u> 20.4; <u>0.95 c</u> 24.2; <u>0.53 a</u> 20.4	<u>0.38 b</u> 24.2; <u>0.19 c</u> 26.0	<u>0.35 d</u> 20.4; <u>0.35 a</u> 18.9	<u>20.0 b</u> 25.0; <u>11.2 c</u> 25.5	<u>0.05 d</u> 26.9; <u>0.05 a</u> 25.5			<u>7.30 c</u> 26.0	<u>0.89 d</u> 24.2; <u>1.18 a</u> 24.4

Таблица 3. Границы качественных классов, установленные на основании максимизации абсолютного значения прямого коэффициента Гуттмана. Границы приведены только для значимых по критерию χ^2 связей. Обозначения те же, что в таблице 2

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⁺	<u>1.94</u> 1.52	<u>1.66</u> 1.52	<u>0.88</u> 1.42	<u>0.52</u> 1.44		<u>7.70</u> 1.23			<u>7.40</u> 1.23	<u>3.93</u> 1.25	<u>0.85</u> 1.45
Mg ²⁺	<u>1.94</u> 0.54	<u>1.66</u> 0.54	<u>0.88</u> 0.54	<u>0.58</u> 0.54		<u>7.70</u> 0.49	<u>0.40</u> 0.49	<u>2.50</u> 0.51	<u>7.40</u> 0.49		<u>0.85</u> 0.59
Na ⁺											<u>0.85</u> 0.12
Cl ⁻					<u>0.24</u> 0.09						
SO ₄ ²⁻	<u>1.57</u> 0.24	<u>1.23</u> 0.24		<u>0.34</u> 0.24	<u>0.39</u> 0.24						<u>0.87</u> 0.23
HCO ₃ ⁻	<u>1.94</u> 1.89	<u>1.66</u> 1.89	<u>0.88</u> 1.88	<u>0.52</u> 1.88	<u>0.36</u> 1.76	<u>7.70</u> 1.59	<u>0.40</u> 1.64	<u>2.10</u> 1.76	<u>7.40</u> 1.59	<u>7.60</u> 1.69	<u>0.85</u> 1.69
Сумма ионов	<u>1.94</u> 4.44	<u>1.66</u> 4.44	<u>0.88</u> 4.34	<u>0.52</u> 4.22		<u>7.70</u> 3.74	<u>0.40</u> 3.86		<u>7.40</u> 3.74	<u>7.60</u> 4.00	<u>0.85</u> 4.42
NH ₄ ⁺					<u>0.31</u> 0.07						
NO ₂ ⁻			<u>0.71</u> 0.00		<u>0.31</u> 0.01	<u>8.45</u> 0.00					
NO ₃ ⁻					<u>0.51</u> 0.04	<u>14.5</u> 0.05		<u>2.50</u> 0.03	<u>8.00</u> 0.05	<u>1.60</u> 0.03	<u>1.52</u> 0.03
N _{общ}	<u>1.64</u> 0.88	<u>0.53</u> 0.80	<u>0.50</u> 0.87	<u>0.19</u> 0.87		<u>14.8</u> 0.88	<u>0.35</u> 0.88	<u>1.20</u> 0.88	<u>10.8</u> 0.88	<u>2.20</u> 0.80	<u>0.97</u> 0.80
PO ₄ ³⁻						<u>14.8</u> 0.02			<u>10.6</u> 0.02	<u>4.80</u> 0.02	<u>1.14</u> 0.03
P _{общ}	<u>1.64</u> 0.08	<u>1.19</u> 0.08	<u>0.97</u> 0.08	<u>0.42</u> 0.08	<u>0.36</u> 0.07	<u>11.8</u> 0.07	<u>0.48</u> 0.07	<u>1.01</u> 0.07	<u>9.59</u> 0.07	<u>3.80</u> 0.07	<u>1.14</u> 0.07
БПК ₅	<u>1.01</u> 2.10	<u>0.50</u> 1.82	<u>0.51</u> 1.82		<u>0.42</u> 2.31	<u>10.0</u> 2.10		<u>1.17</u> 1.92	<u>8.30</u> 2.10		<u>0.90</u> 2.10
ХПК			<u>0.71</u> 37.2		<u>0.42</u> 38.4	<u>14.8</u> 34.5			<u>10.7</u> 34.5		<u>1.29</u> 33.8
C _{орг} во взвеси	<u>0.96</u> 1.00			<u>0.18</u> 1.00		<u>10.8</u> 1.00					
pH					<u>0.36</u> 8.08		<u>0.02</u> 8.06				
Щелочность						<u>8.93</u> 104.9	<u>0.02</u> 97.6		<u>8.30</u> 104.9		<u>1.14</u> 104.9
Цветность	<u>1.58</u> 65.0		<u>0.70</u> 60.0		<u>0.49</u> 65.0			<u>1.17</u> 60.0			
Прозрачность	<u>1.89</u> 120.0	<u>0.80</u> 130.0	<u>0.97</u> 120.0	<u>0.38</u> 120.0		<u>16.9</u> 130.0	<u>0.47</u> 130.0	<u>0.96</u> 130.0	<u>10.7</u> 130.0	<u>5.90</u> 130.0	<u>0.90</u> 115.0
Электропроводность	<u>1.32</u> 168.2	<u>0.97</u> 168.2	<u>0.74</u> 163.7	<u>0.37</u> 168.2		<u>10.8</u> 163.2			<u>8.80</u> 165.1		<u>0.95</u> 163.2
Температура воды	<u>0.89</u> 21.2		<u>0.54</u> 21.2		<u>0.36</u> 21.3	<u>4.08</u> 18.4		<u>0.79</u> 20.2	<u>3.30</u> 20.2	<u>2.98</u> 20.2	<u>1.32</u> 20.2
Температура воздуха	<u>1.24</u> 24.2	<u>0.80</u> 24.2	<u>0.53</u> 20.4	<u>0.38</u> 24.2	<u>0.35</u> 20.4	<u>11.2</u> 25.5	<u>0.05</u> 25.5		<u>8.30</u> 25.5		<u>0.89</u> 24.2

Таблица 4. Границы качественных классов, установленные на основании максимизации абсолютного значения коэффициента Валлиса. Границы приведены только для значимых по критерию χ^2 связей. Обозначения те же, что в таблице 2

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⁺	<u>1.48</u> 1.50					<u>7.70</u> 1.23	<u>0.49</u> 1.35	<u>1.84</u> 1.22	<u>7.40</u> 1.23	<u>5.50</u> 1.25	<u>0.85</u> 1.45
Mg ²⁺	<u>1.94</u> 0.54	<u>1.66</u> 0.54	<u>0.88</u> 0.54	<u>0.59</u> 0.54	<u>0.42</u> 0.49	<u>7.70</u> 0.49	<u>0.05</u> 0.48	<u>1.90</u> 0.54	<u>7.40</u> 0.49	<u>7.60</u> 0.47	<u>0.85</u> 0.59
Na ⁺	<u>2.25</u> 0.11	<u>1.98</u> 0.11	<u>1.06</u> 0.11	<u>0.70</u> 0.11	<u>0.26</u> 0.11						<u>0.85</u> 0.11
K ⁺	<u>2.25</u> 0.11	<u>1.98</u> 0.11	<u>1.06</u> 0.11	<u>0.70</u> 0.11							
Cl ⁻					<u>0.24</u> 0.09			<u>1.90</u> 0.07			
SO ₄ ²⁻	<u>1.57</u> 0.24	<u>1.23</u> 0.24	<u>0.50</u> 0.29	<u>0.47</u> 0.24	<u>0.37</u> 0.26			<u>1.65</u> 0.29			<u>0.87</u> 0.23
HCO ₃ ⁻	<u>1.94</u> 1.89	<u>1.66</u> 1.89	<u>0.88</u> 1.88	<u>0.59</u> 1.89	<u>0.42</u> 1.68	<u>7.70</u> 1.59	<u>0.49</u> 1.64	<u>2.10</u> 1.76	<u>7.40</u> 1.76	<u>5.50</u> 1.43	<u>0.87</u> 1.59
Сумма ионов	<u>1.94</u> 4.44	<u>1.66</u> 4.44	<u>0.88</u> 4.34	<u>0.58</u> 4.44	<u>0.42</u> 4.00	<u>7.70</u> 3.74	<u>0.49</u> 3.86	<u>2.50</u> 3.72	<u>12.8</u> 4.42	<u>4.30</u> 4.54	<u>0.85</u> 4.42
NH ₄ ⁺					<u>0.31</u> 0.07						<u>1.52</u> 0.07
NO ₃ ⁻			<u>0.97</u> 0.05		<u>0.51</u> 0.04	<u>16.9</u> 0.07		<u>2.50</u> 0.03	<u>8.00</u> 0.05	<u>1.60</u> 0.03	<u>1.52</u> 0.03
N _{общ}	<u>0.96</u> 0.88	<u>0.47</u> 0.88	<u>0.50</u> 0.88	<u>0.19</u> 0.88	<u>0.49</u> 0.77	<u>14.8</u> 0.88	<u>0.35</u> 0.88	<u>1.13</u> 1.00	<u>10.8</u> 0.88	<u>6.70</u> 0.88	<u>0.97</u> 0.80
PO ₄ ³⁻	<u>1.57</u> 0.02				<u>0.41</u> 0.03	<u>14.8</u> 0.02			<u>10.6</u> 0.02	<u>5.00</u> 0.02	<u>1.14</u> 0.02
P _{общ}	<u>1.64</u> 0.08	<u>1.23</u> 0.08	<u>0.97</u> 0.08	<u>0.42</u> 0.07	<u>0.27</u> 0.07	<u>11.8</u> 0.07	<u>0.51</u> 0.07	<u>1.01</u> 0.07	<u>9.59</u> 0.07	<u>3.80</u> 0.06	<u>1.01</u> 0.08
БПК ₅	<u>1.01</u> 1.82	<u>0.50</u> 1.82	<u>0.51</u> 1.82	<u>0.52</u> 1.55	<u>0.42</u> 2.59	<u>8.30</u> 2.66		<u>1.17</u> 1.92	<u>8.30</u> 2.66	<u>3.80</u> 1.60	<u>0.90</u> 1.86
ХПК	<u>1.58</u> 33.3	<u>1.47</u> 34.5	<u>0.72</u> 40.5	<u>0.52</u> 34.5	<u>0.42</u> 39.7	<u>14.8</u> 34.5	<u>0.35</u> 31.8	<u>0.91</u> 43.2	<u>10.7</u> 34.5	<u>4.80</u> 33.8	<u>1.29</u> 33.8
C _{орг} во взвеси	<u>0.96</u> 1.20		<u>0.50</u> 1.30	<u>0.18</u> 1.00	<u>0.31</u> 1.30	<u>14.8</u> 1.10		<u>1.13</u> 1.20	<u>10.7</u> 1.10		
Щелочность		<u>1.12</u> 85.4	<u>0.70</u> 85.4	<u>0.34</u> 85.4	<u>0.36</u> 90.3	<u>8.93</u> 97.6	<u>0.00</u> 90.3	<u>1.90</u> 114.7	<u>8.30</u> 100.0	<u>5.40</u> 90.3	<u>1.14</u> 97.6
Цветность		<u>1.12</u> 85.4	<u>0.71</u> 65.0	<u>0.34</u> 85.4	<u>0.49</u> 65.0	<u>8.93</u> 97.6	<u>0.00</u> 90.3	<u>1.90</u> 114.7	<u>8.30</u> 100.0	<u>5.40</u> 90.3	<u>1.14</u> 97.6
Прозрачность	<u>1.24</u> 150.0	<u>0.87</u> 150.0	<u>0.97</u> 120.0	<u>0.31</u> 150.0	<u>0.49</u> 130.0	<u>16.9</u> 130.0	<u>0.47</u> 140.0	<u>0.96</u> 130.0	<u>11.5</u> 140.0	<u>5.90</u> 130.0	<u>0.90</u> 115.0
Температура воды	<u>0.67</u> 23.8	<u>0.35</u> 23.8	<u>0.47</u> 23.8	<u>0.12</u> 23.8	<u>0.36</u> 20.8	<u>4.08</u> 18.4	<u>0.16</u> 18.4	<u>1.10</u> 24.5	<u>3.30</u> 18.4	<u>2.72</u> 18.9	<u>1.32</u> 18.9
Температура воздуха			<u>0.53</u> 20.4		<u>0.35</u> 18.9	<u>20.0</u> 20.8	<u>0.05</u> 25.5		<u>16.0</u> 20.8		<u>0.89</u> 24.2

Для полученных классов рассчитаны коэффициенты Чеснокова (коэффициент существенности — таблица 5 и критерий точности — таблица 6), Гуттмана (в таблице 7 приведены только прямые коэффициенты) и Валлиса (табл. 8). Оценена значимость всех рассчитанных коэффициентов. Отрицательные знаки перед коэффициентами Гуттмана и Валлиса говорят о нали-

ции обратной зависимости между характеристиками и приведены для облегчения трактовки результатов, сами коэффициенты Гутмана и Валлиса всегда положительны.

Таблица 5. Результирующие существенности для таблиц сопряженности с границами между качественными классами, установленными на основании максимизации коэффициента Чеснокова. Приведены только значимые по критерию χ^2 связи. Обозначения те же, что в таблице 2

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 филь- рата	A	B	C	AЧ		
Ca ²⁺	0.26 d; 0.28 a	0.29 d; 0.27 a	0.23 d; 0.25 a	0.24 d; 0.27 a	0.20 a	0.32 d	0.26 b		0.31 d; 0.32 a	0.31 d	0.36 b; 0.36 c
Mg ²⁺	0.26 a	0.23 d; 0.25 a	0.28 a	0.25 a	0.23 a	0.29 d	0.31 b; 0.31 c	0.28 d; 0.30 a	0.29 a	0.31 d	0.35 b; 0.34 c
Na ⁺	0.21 a	0.27 a	0.21 a	0.27 a	0.22 c						0.32 c
Cl ⁻					0.33 b; 0.36 c			0.34 c			
SO ₄ ²⁻	0.23 b; 0.23 d; 0.21 c	0.20 b; 0.20 c	0.24 d	0.18 b; 0.17 c	0.22 b; 0.15 c			0.31 d			0.26 d
HCO ₃ ⁻	0.26d; 0.29 a	0.27 d; 0.28 a	0.25 d; 0.26 a	0.26 d; 0.28 a	0.21 a	0.29 d	0.27 b; 0.22 c	0.29 a	0.21 d; 0.31 a	0.31 d	0.26 b; 0.36 c
Сумма ионов	0.23 d; 0.30 a	0.27 d; 0.29 a	0.21 d; 0.27 a	0.20 d; 0.29 a	0.12 d; 0.22 a	0.30 d	0.27 b; 0.22 c	0.30 a	0.29 d	0.29 d	0.34 b; 0.36 c
NH ₄ ⁺					0.38 b; 0.41 c						0.33 b
NO ₂ ⁻	0.14 d		0.14 b	0.16 d; 0.13 a	0.24 b; 0.30 c	0.19 c		0.23 c			
NO ₃ ⁻			0.22 b		0.28 b; 0.24 c	0.30 b; 0.14 c		0.33 b; 0.28 c	0.26 b; 0.24 d; 0.21 a	0.28 b; 0.25 c	0.27 b; 0.26 d; 0.22 c
N _{общ}	0.23 d; 0.21 a	0.26 d; 0.25 a	0.27 d; 0.23 a	0.25 d; 0.22 a	0.19 a	0.34 d; 0.28 a	0.13 d	0.27 d; 0.17 a	0.28 d; 0.30 a	0.34 d; 0.28 a	0.30 b; 0.30 c
PO ₄ ³⁻	0.18 a				0.29 b; 0.18 c	0.17 d; 0.22 a				0.20 d; 0.22 a	0.24 b; 0.24 c
P _{общ}	0.24 d; 0.32 a	0.28 d; 0.32 a	0.22 d; 0.35 a	0.25 d; 0.34 a	0.15 b; 0.24 c	0.36 d; 0.30 a	0.14 d; 0.24 a	0.20 b; 0.20 d; 0.18 c; 0.13 a	0.33 d; 0.30 a	0.35 d; 0.30 a	0.37 b; 0.34 c
БПК ₅	0.19 d; 0.18 a	0.24 d	0.26 d; 0.25 a	0.20 a	0.34 d; 0.33 a	0.27 d; 0.16 a		0.21 d	0.22 a	0.33 d; 0.18 a	0.22 c
ХПК	0.26 d; 0.30 a	0.28 d; 0.28 a	0.31 d; 0.31 a	0.21 d; 0.29 a	0.35 d; 0.33 a	0.23 d; 0.32 a	0.23 a	0.24 d	0.16 d; 0.25 a	0.25 d; 0.33 a	0.21 b; 0.24 c
C _{орг} во взвеси	0.19 d	0.20 d	0.22 d	0.22 d	0.25 d; 0.13 a	0.24 d; 0.25 a		0.23 d		0.22 d; 0.19 a	
pH	0.21 b; 0.20 d	0.25 b	0.18 d; 0.15 a	0.21 b	0.21 d; 0.25 a		0.17 a			0.27 c	0.25 d; 0.18 a
Щелочность		0.20 a	0.16 d; 0.22 a	0.18 a	0.12 d; 0.18 a	0.15 b; 0.28 c	0.24 d; 0.26 a	0.28 b	0.22 a	0.16 b; 0.27 c	0.16 d; 0.23 a
Цветность	0.25 d; 0.19 a	0.25 d; 0.13 a	0.29 d; 0.24 a	0.19 d; 0.11 a	0.30 d; 0.28 a	0.22 d	0.16 d	0.28 d; 0.16 a		0.22 d	0.19 a
Прозрачность	0.29 b; 0.21 c	0.30 b; 0.24 c	0.31 b; 0.21 c	0.30 b; 0.22 c	0.19 b	0.34 b; 0.31 c	0.27 b; 0.16 c	0.20 b; 0.30 c	0.32 b; 0.22 c	0.33 b; 0.29 c	0.32 d; 0.30 a

Таблица 5 (продолжение)

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 филь- рата	A	B	C	AЧ		
Электро- проводность	0.16 d; 0.09 c; 0.26 a	0.16 d; 0.25 a	0.13 d; 0.20 a	0.16 d; 0.25 a	0.18 c	0.12 d; 0.18 c; 0.16 a		0.12 b; 0.13 c	0.14 d	0.11 d; 0.23 c; 0.16 a	0.18 b; 0.25 c
Температура воды	0.22 d; 0.09 c; 0.11 a	0.17 d; 0.10 a	0.24 d; 0.17 a	0.16 d; 0.13 a	0.24 d; 0.26 a	0.33 d; 0.38 a	0.18 b; 0.20 c	0.22 d; 0.16 a	0.19 d; 0.29 a	0.33 d; 0.38 a	0.18 b; 0.13 d; 0.25 c
Температура воздуха	0.19 b; 0.16 c; 0.16 a	0.23 b; 0.19 c	0.19 b; 0.26 d; 0.12 c; 0.25 a	0.20 b; 0.17 c	0.28 d; 0.31 a	0.26 b; 0.30 c	0.30 d; 0.30 a			0.33 c	0.29 d; 0.29 a

Таблица 6. Результирующие точности для таблиц сопряженности с границами между качественными классами, установленными на основании максимизации значения коэффициентов существенности Чеснокова. Приведены только значимые по критерию χ^2 связи. Обозначения те же, что в таблице 2

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 филь- рата	A	B	C	AЧ		
Ca ²⁺	0.94 d; 1.00 a	0.95 d; 1.00 a	0.75 d; 0.94 a	0.89 d; 1.00 a	0.88 a	1.00 d	0.91 b		1.00 d	1.00 d; 1.00 a	1.00 b; 1.00 c
Mg ²⁺	1.00 a	1.00 d; 1.00 a	1.00 a	1.00 a	0.94 a	1.00 d	1.00 b; 1.00 c	0.86 d; 0.92 a	0.92 d	1.00 a	0.92 b; 1.00 c
Na ⁺	0.93 a	1.00 a	0.93 a	1.00 a	0.93 c						1.00 c
Cl ⁻					0.90 b; 0.95 c			1.00 c			
SO ₄ ²⁻	0.76 b; 1.00 d; 0.68 c	0.78 b; 0.93 c	1.00 d	0.71 b; 0.71 c	0.81 b; 0.56 c			1.00 d			0.85 d
HCO ₃ ⁻	0.80 d; 1.00 a	0.90 d; 1.00 a	0.89 d; 0.79 a	0.86 d; 1.00 a	0.88 a	1.00 d	0.91 b; 0.75 c	1.00 a	1.00 d	0.74 d; 1.00 a	0.85 b; 1.00 c
Сумма ионов	0.93 d; 1.00 a	1.00 d; 1.00 a	0.72 d; 0.94 a	0.88 d; 1.00 a	0.58 d; 0.89 a	1.00 d	0.91 b; 0.75 c	1.00 a	1.00 d	1.00 d	1.00 b; 1.00 c
NH ₄ ⁺					0.91 b; 1.00 c						1.00 b
NO ₂ ⁻	0.71 d		0.67 b	0.71 d; 0.57 a	0.69 b; 0.87 c	0.82 c		1.00 c			
NO ₃ ⁻			0.94 b		0.95 b; 0.86 c	1.00 b; 0.52 c		0.94 b; 0.78 c	1.00 b; 0.80 c	1.00 b; 0.79 d; 0.69 a	0.84 b; 1.00 d; 0.69 c
N _{общ}	0.86 d; 0.85 a	0.94 d; 0.94 a	0.94 d; 0.94 a	0.90 d; 0.94 a	0.89 a	0.95 d; 0.77 a	0.60 d	1.00 d; 0.72 a	0.95 d; 0.77 a	0.89 d; 0.94 a	0.90 b; 0.94 c
PO ₄ ³⁻	0.81 a				0.91 b; 0.56 c	0.65 d; 0.84 a			0.83 d; 0.84 a		1.00 b; 0.81 c
P _{общ}	0.77 d; 0.95 a	0.91 d; 1.00 a	0.66 d; 1.00 a	0.72 d; 0.95 a	0.73 b; 1.00 c	1.00 d; 0.90 a	0.53 d; 0.88 a	0.88 b; 0.83 d; 0.74 c; 0.54 a	0.95 d; 0.77 a	0.95 d; 0.90 a	0.95 b; 0.87 c

Таблица 6 (продолжение)

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 филь- рата	A	B	C	AЧ		
БПК ₅	0.74 d; 0.84 a	0.81 d	0.85 d; 0.90 a	0.93 a	0.88 d; 0.91 a	1.00 d; 0.72 a		0.80 d	1.00 d; 0.73 a	0.93 a	0.93 c
ХПК	1.00 d; 1.00 a	1.00 d; 1.00 a	0.87 d; 1.00 a	0.94 d; 1.00 a	1.00 d; 0.88 a	0.65 d; 0.90 a	0.93 a	1.00 d	0.68 d; 0.90 a	0.61 d; 0.94 a	0.72 b; 0.89 c
C _{орг} во взвеси	0.88 d	0.93 d	1.00 d	0.89 d	1.00 d; 0.58 a	0.80 d; 1.00 a		0.93 d	0.80 d; 0.87 a		
pH	0.93 b; 0.85 d	0.94 b	0.81 d; 0.62 a	0.93 b	0.76 d; 0.83 a		0.67 a		1.00 c		0.88 d; 0.82 a
Щелочность		0.89 a	0.63 d; 0.85 a	0.84 a	0.55 d; 0.77 a	0.52 b; 0.94 c	0.74 d; 0.81 a	1.00 b	0.56 b; 0.89 c	0.88 a	0.58 d; 0.81 a
Цветность	1.00 d; 0.70 a	1.00 d; 0.58 a	0.86 d; 0.74 a	0.94 d; 0.56 a	0.95 d; 0.91 a	0.85 d	0.81 d	1.00 d; 0.70 a	0.89 d		0.85 a
Прозрачность	1.00 b; 0.67 c	0.87 b; 0.70 c	0.96 b; 0.66 c	0.89 b; 0.69 c	0.94 b	0.89 b; 0.82 c	0.91 b; 0.53 c	0.61 b; 0.91 c	0.88 b; 0.84 c	1.00 b; 0.74 c	0.95 d; 0.88 a
Электро- проводность	0.57 d; 0.51 c; 0.88 a	0.65 d; 0.89 a	0.54 d; 0.85 a	0.61 d; 0.89 a	0.92 c	0.61 d; 0.94 c; 0.74 a		0.74 b; 0.86 c	0.51 d; 0.97 c; 0.75 a	0.88 d	0.89 b; 0.91 c
Температура воды	0.94 d; 0.51 c; 0.79 a	0.88 d; 0.78 a	0.94 d; 0.74 a	0.87 d; 0.81 a	0.81 d; 0.80 a	0.91 d; 0.98 a	0.92 b; 0.88 c	0.91 d; 0.91 a	0.98 d; 0.98 a	0.65 d; 0.95 a	0.63 b; 0.74 d; 0.91 c
Температура воздуха	0.74 b; 0.61 c; 0.68 a	0.79 b; 0.68 c	0.80 b; 0.78 d; 0.51 c; 0.74 a	0.77 b; 0.68 c	0.76 d; 0.93 a	0.85 b; 0.86 c	0.86 d; 0.82 a		1.00 c		0.85 d; 0.86 a

Как видно из таблиц 2, 5 и 6, при помощи метода максимизации коэффициента Чеснокова найдены некоторые связи, не обнаруженные при максимизации двусторонней связи по коэффициентам Валлиса и Гуттмана. Многие результаты имеют результирующую точность, равную 1. Это свидетельствует о том, что доступна однозначная трактовка результатов. Например, результирующая точность для связи содержания хлорофилла «а» и содержания магния равна 1 при поиске сравнительно пустой ячейки «d». Это означает, что все низкие (менее 7.7 мкг/л) значения концентрации хлорофилла «а» сопряжены с низкими (менее 0.54 мг-экв/л) концентрациями магния, и все высокие (более 0.54 мг-экв/л) концентрациями магния сопряжены с высокими (более 7.7 мкг/л) концентрациями хлорофилла «а», причем, принимая во внимание таблице 5, можно сказать, что на 29 % (величина существенности) обнаруженная зависимость обусловлена связью между характеристиками (влиянием одной характеристики на другую) и на 71 % (разность точности и существенности) собственными распределениями двух исследуемых характеристик. Обратное утверждение — «все низкие концентрации магния сопряжены с низкими концентрациями хлорофилла «а», а все высокие концентрации хлорофилла «а» сопряжены с высокими концентрациями магния» — неверно. Заметим, что коэффициенты Гуттмана и Валлиса аналогично коэффициенту существенности основаны на описании влияния одной характеристики на другую за вычетом влияния собственных распределений характеристик. Более низкие результирующие точности также могут быть легко интерпретированы. Например, для связи показателя F_m фито и температуры воды найденная результирующая точность при поиске сравнительно пустой ячейки «d» составила 0.88. Это можно трактовать как утверждение, что низкие (менее 0.35) значения F_m фито соответствуют низким (менее 23.8° C) температурам, и высокие температуры (более 23.8° C) соответствуют высоким (более 0.35) значениям F_m фито.

Таблица 7. Прямые коэффициенты Гуттмана для таблиц сопряженности с границами между качественными классами, установленными на основании максимизации значения прямого коэффициента Гуттмана. Приведены только значимые по критерию χ^2 связи. Обозначения те же, что в таблице 2

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⁺	0.37	0.37	0.38	0.36		0.46			0.38	0.36	-0.50
Mg ²⁺	0.35	0.35	0.38	0.31		0.40	-0.40	0.40	0.47		-0.63
Na ⁺											-0.36
Cl ⁻					-0.71						
SO ₄ ²⁻	-0.42	-0.35		-0.31	-0.27						0.40
HCO ₃ ⁻	0.43	0.43	0.43	0.39	0.27	0.40	-0.38	0.25	0.33	0.33	-0.47
Сумма ионов	0.35	0.35	0.36	0.31		0.43	-0.38		0.36	0.33	-0.56
NH ₄ ⁺					-0.67						
NO ₂ ⁻			-0.19		-0.48	-0.28					
NO ₃ ⁻					-0.37	-0.05		-0.53	-0.37	0.35	-0.41
N _{общ}	0.28	0.32	0.26	0.26		0.52	0.19	0.14	0.52	0.44	-0.52
PO ₄ ³⁻						0.33			0.33	0.25	-0.38
P _{общ}	0.48	0.43	0.48	0.48	-0.23	0.57	0.29	0.26	0.61	0.45	-0.65
БПК ₅	0.30	0.35	0.39		0.58	0.25		0.35	0.33		-0.21
ХПК			0.43		0.58	0.33			0.39		-0.25
C _{орг} во взвеси	0.08			0.13		0.32					
pH					0.33		0.24				
Щелочность						-0.28	0.37		-0.32		0.28
Цветность	0.22		0.39		0.43			0.23			
Прозрачность	-0.39	-0.41	-0.42	-0.42		-0.57	-0.32	-0.46	-0.54	-0.43	0.52
Электропроводность	0.33	0.33	0.22	0.33		0.18			0.22		-0.30
Температура воды	0.15		0.24		0.46	0.58		0.21	0.49	0.20	-0.20
Температура воздуха	-0.33	-0.38	0.40	-0.33	0.47	-0.53	0.59		-0.47		0.46

Приведенное утверждение верно в 88 % случаев. Исходя из значения критерия результирующей существенности для данной связи (0.17), можно утверждать, что 17 % случаев удачного прогноза из 88 % связаны с влиянием одной характеристики на другую. Оставшийся 71 % объясняется собственными распределениями двух исследуемых характеристик.

Для коэффициента Гуттмана трактовка связи асимметрична. Например, низкие (менее 1.23 мг-экв/л) концентрации кальция сопряжены с низким (менее 7.7 мкг/л) содержанием общего хлорофилла «а», высокие концентрации кальция (более 1.23 мг-экв/л) сопряжены с высоким (более 7.7 мкг/л) содержанием общего хлорофилла «а». Эта связь характеризуется прямым коэффициентом Гуттмана, равным 0.46. Обратное утверждение характеризуется обратным коэффициентом Гуттмана, равным 0.38. Один из этих коэффициентов целесообразно применять, когда точно известно, изменение какой из двух исследуемых характеристик является причиной изменения другой.

Коэффициент Валлиса для двух качественных классов по обеим характеристикам является симметричной мерой связи (для трех и более классов он асимметричен). Т. е. связь можно трактовать в обоих направлениях с одинаковым значением коэффициента Валлиса. Например, высокие (более 5.4 мкг/л) концентрации феопигментов сопряжены с высокими (более 90.3 градусов по Pt-Co шкале) значениями цветности; в свою очередь, низкие (менее 5.4 мкг/л) концентрации феопигментов сопряжены с низкими (менее 90.3 градусов по Pt-Co шкале) значениями цветности, эта связь характеризуется коэффициентом Валлиса, равным 0.77. Также верно и обратное утверждение, что высокие (более 90.3 градусов по Pt-Co шкале) значения цветности сопряжены с высокими (более 5.4 мкг/л) концентрациями феопигментов, а низкие (менее 90.3 градусов по Pt-Co шкале) значения цветности сопряжены с низкими (менее 5.4 мкг/л) кон-

центрациями феопигментов, эта связь характеризуется тем же коэффициентом Валлиса, равным 0.77.

Таблица 8. Коэффициенты Валлиса (Гудмана–Крускала) для таблиц сопряженности с границами между качественными классами, установленными на основании максимизации значения коэффициента Валлиса. Приведены только значимые по критерию χ^2 связи. Обозначения те же, что в табл. 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	AЧ		
Ca ²⁺	0.12					0.32	-0.17	0.18	0.24	0.24	-0.41
Mg ²⁺	0.15	0.15	0.16	0.13	0.10	0.23	-0.25	0.24	0.17	0.29	-0.59
Na ⁺	0.09	0.13	0.09	0.13	-0.1						-0.22
K ⁺	-0.09	-0.13	-0.09	-0.13							
Cl ⁻					-0.64			-0.31			
SO ₄ ²⁻	-0.19	-0.13	-0.1	-0.11	-0.14			0.22			0.22
HCO ₃ ⁻	0.27	0.27	0.25	0.23	0.10	0.23	-0.2	0.17	0.20	0.20	-0.33
Сумма ионов	0.21	0.21	0.20	0.18	0.11	0.27	-0.2	0.19	0.18	0.24	-0.49
NH ₄ ⁺					-0.56						-0.25
NO ₃ ⁻			-0.1		-0.18	-0.19		-0.41	0.24	-0.23	-0.29
N _{общ}	0.14	0.16	0.18	0.16	0.08	0.36	0.08	0.16	0.28	0.36	-0.29
PO ₄ ³⁻	0.08				-0.22	0.13			0.08	0.14	-0.19
P _{общ}	0.31	0.27	0.33	0.33	-0.1	0.36	0.15	0.11	0.36	0.41	-0.46
БПК ₅	0.14	0.19	0.23	-0.07	0.44	0.15		0.15	0.09	0.24	-0.1
ХПК	0.18	0.16	0.33	0.18	0.39	0.31	0.10	-0.1	0.16	0.34	-0.2
C _{орг} во взвеси	0.08		-0.08	0.12	0.11	0.18		0.11		0.15	
Щелочность		0.08	0.14	0.08	0.09	-0.18	0.26	-0.15	0.11	-0.19	0.15
Цветность		0.33	0.28	0.3	0.31	0.5	0.43	0.5	0.72	0.77	0.81
Прозрачность	-0.23	-0.3	-0.26	-0.26	-0.06	-0.37	-0.19	-0.27	-0.26	-0.34	0.39
Температура воды	0.09	0.06	0.12	0.05	0.24	0.58	-0.09	0.10	0.21	0.53	-0.19
Температура воздуха			0.28		0.32	-0.27	0.35			-0.27	0.31

Некоторые исследователи [Миркин, 1980] интерпретируют коэффициент Валлиса в терминах качественной дисперсии как аналог количественного корреляционного отношения, которое для корреляционного анализа соответствует коэффициенту детерминации R^2 , т. е., например, коэффициент Валлиса, равный 0.77 означает, что 77 % дисперсии биологической характеристики может быть объяснено дисперсией физико-химической характеристики.

5. Обсуждение результатов

5.1. Сопоставление границ качественных классов, полученных методом МКС для коэффициентов Чеснокова, Гуттмана и Валлиса

Границы качественных классов при максимизации коэффициента Чеснокова, Гуттмана и Валлиса приведены соответственно в таблицах 2, 3, 4.

В таблицах 9 и 10 представлены доли случаев, когда границы, установленные по различным коэффициентам связи, близки, т. е. входят в 20 %-й коридор погрешностей измерений.

Из таблиц 9, 10 видно, что большинство границ (от 73 до 91 %) близки друг к другу. Наиболее часто совпадают границы для коэффициентов Гуттмана и Валлиса (в 84–89 % случаев).

Доля случаев, когда границы, полученные по коэффициентам Чеснокова, не вошли в 20 %-ный коридор погрешностей измерений и были больше границ, полученных по коэффициентам Гуттмана от случаев, когда граница была найдена для обоих коэффициентов, составила 9 %, доля случаев, когда границы были меньше — также 9 %. В 8.5 % случаев границы по коэффициентам Чеснокова больше границ по коэффициентам Валлиса, в 10 % — меньше. В 7.5 % слу-

чаев границы по коэффициентам Гуттмана больше границ по коэффициентам Валлиса, в 6 % — меньше. Из таблиц видно, что число наблюдений с границами выше и ниже границ для изучаемого метода мало (от 1 до 16 %) и для всех методов границы можно считать близкими.

Таблица 9. Доля случаев, когда граница биологической характеристики, полученная при максимизации одного коэффициента, близка к границе биологической характеристики, полученной при максимизации другого коэффициента, от случаев, когда граница биологической характеристики была найдена при максимизации обоих коэффициентов

	Коэффициент Чеснокова	Коэффициент Гуттмана прямой	Коэффициент Валлиса
Коэффициент Чеснокова	1.00	0.73	0.76
Коэффициент Гуттмана прямой	0.73	1.00	0.84
Коэффициент Валлиса	0.76	0.84	1.00

Таблица 10. Доля случаев, когда граница физико-химической характеристики, полученная при максимизации одного коэффициента, близка к границе физико-химической характеристики, полученной при максимизации другого коэффициента, от случаев, когда граница физико-химической характеристики была найдена при максимизации обоих коэффициентов

	Коэффициент Чеснокова	Коэффициент Гуттмана прямой	Коэффициент Валлиса
Коэффициент Чеснокова	1.00	0.91	0.87
Коэффициент Гуттмана прямой	0.91	1.00	0.89
Коэффициент Валлиса	0.87	0.89	1.00

5.2. Сопоставление мер связи, описываемых различными коэффициентами

Величины коэффициентов корреляции, ассоциации Юла и контингенции Пирсона приведены в таблицах 5, 10, 11 части 1 данной серии статей [Поиск связей ..., ч. 1, 2013].

Число найденных значимых связей, полученных при максимизации различных коэффициентов связи, приведено в таблице 11.

Таблица 11. Число значимых связей среди связей, описываемых различными коэффициентами

Коэффициент корреляции	Коэффициент Юла	Коэффициент Пирсона	Коэффициент Чеснокова	Коэффициент Гуттмана прямой	Коэффициент Валлиса	Всего связей
81	149	200	198	155	172	275

Из таблицы 11 видно, что метод МКС в целом помог выявить значительно больше значимых связей, чем коэффициент корреляции.

Для таблиц сопряженности с двумя классами качества по обеим 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.

Однако использование в качестве критериев максимизации коэффициентов Чеснокова, Гуттмана и Валлиса (табл. 6, 8, 9 соответственно) более правильно с точки зрения прогноза качественных значений одной характеристики по качественным значениям другой. Заметим, что величины этих коэффициентов нецелесообразно сравнивать со значениями коэффициентов корреляции и коэффициентов Пирсона, т.к. для одной и той же таблицы сопряженности значения коэффициентов Гуттмана и Валлиса всегда ниже коэффициента Пирсона.

Общее число значимых связей для коэффициента Чеснокова незначительно меньше, чем для коэффициента Пирсона. Коэффициент Чеснокова является односторонним. Это означает, что его использование для характеристики таблиц сопряженности с двумя качественными классами по обоим характеристикам дает четыре варианта границ для поиска степени пустоты каждой из ячеек «а», «b», «с», «d». Одновременное обнаружение значимой связи при пустоте ячеек «а» и «d» или «b» и «с» свидетельствует о необходимости поиска двусторонней связи с использованием коэффициентов Гуттмана или Валлиса.

В частном, но важном в прикладном отношении случае, когда биологическая характеристика рассматривается в качестве индикатора состояния экосистемы, а физико-химическая — в качестве влияющего на экологическое состояние фактора среды, метод МКС с максимизацией коэффициента Чеснокова становится (с некоторыми изменениями в требованиях) методом установления локальных экологических норм (методом ЛЭН), который позволяет не просто найти одностороннюю связь, а выявить зависимости индикаторов от факторов, и, соответственно, провести границы, разделяющие «благополучные» и «неблагополучные» значения индикатора, а также «допустимые» и «недопустимые» значения фактора. В случае анализа зависимости индикатора от фактора искомая сравнительно пустая ячейка соответствует «недопустимым» значениям фактора, соответствующим «благополучным» значениям индикатора. Если биологическая характеристика действительно является индикатором для исследуемого фактора, такая ячейка должна быть пуста. Однако, вследствие ошибок и погрешностей расчета в неё может попадать некоторое количество наблюдений, поэтому при анализе требуют, чтобы ячейка была как можно более пуста. Минимальную величину пустоты ограничивают критерием минимальной точности, равным 0.75–0.80 (напомним, что при поиске зависимостей между двумя характеристиками используют критерий минимальной точности, равный 0.5). Результаты, полученные методом ЛЭН, позволяют: 1) выявить существенные для экологического неблагополучия факторы и дифференцировать причины несущественности других факторов; 2) охарактеризовать вклад каждого фактора в степень экологического неблагополучия и ранжировать факторы по этому вкладу; 3) диагностировать состояние экосистемы в местах наблюдения и в случае неблагополучия состояния выявить, какими факторами вызвано это неблагополучие; 4) охарактеризовать достаточность программ мониторинга. Методические основы метода ЛЭН изложены в работе А. П. Левича с соавторами [2011]. Метод ЛЭН применен к анализу данных по Дону [Левич и др., 2009] и Нижней Волге [Левич и др., 2010, Булгаков и др. 2010].

6. Заключение

Анализ исходных данных показал, что зависимости между характеристиками не могут быть полностью описаны коэффициентами корреляции или регрессии. Применение метода МКС для поиска качественных классов позволило выявить значимые связи, не установленные при помощи корреляционного анализа, и точнее описать большинство выявленных связей. В таблице 12 подытожены свойства приведенных коэффициентов связи, рассмотренных в первой части настоящей серии статей и в данной работе, чтобы облегчить исследователю выбор мер связи, адекватных решаемым задачам.

Коэффициенты Юла и Пирсона есть смысл использовать, только если существует необходимость сравнить свои результаты с результатами авторов, применявших эти же коэффициенты ранее. Если коэффициент Пирсона низок, то вероятен случай односторонней связи, и для поиска необходимо использовать коэффициент Юла. Если нет необходимости сравнения результатов, то более обоснованно использовать коэффициенты детерминационного анализа, поскольку

Таблица 12. Классификация коэффициентов связи

Свойства коэффициентов связи	Коэффициенты				
	Юла	Пирсона	Чеснокова	Гуттмана	Валлиса
Характеризует неслучайность связи	+	+			
Характеризует прогностические свойства связей (из <i>A</i> следует <i>B</i>)			+	+	+
Характеризует одностороннюю связь (степень «пустоты» одной из ячеек таблицы сопряженностей)	+		+		
Характеризует двустороннюю связь (степень «пустоты» двух ячеек таблицы сопряженности)		+		+	+

они характеризуют именно наличие связи, а не отклонение от случая отсутствия связи. В детерминационном анализе коэффициенты Гуттмана и Валлиса характеризуют двустороннюю связь. Коэффициент Гуттмана имеет существенный недостаток: в случаях, когда максимальные ячейки в классах характеристики *X* относятся к одному классу характеристики *Y*, коэффициент Гуттмана равен нулю. В свою очередь, коэффициент Валлиса в равной степени зависит от всех ячеек таблицы сопряженности, т. е. больше подходит для выявления более сложных, ненаправленных связей при числе классов качества больше двух. В случае отсутствия двусторонней связи или при необходимости целенаправленного поиска односторонней связи целесообразно использовать коэффициент Чеснокова.

В третьей части данной работы будут приведены результаты применения метода МКС (в версии метода установления локальных экологических норм) для поиска границ классов качества вод Рыбинского водохранилища.

Список литературы

- Афифи А., Эйзен С. Статистический анализ: Подход с использованием ЭВМ. Пер. с англ. — М.: Мир, 1982. — 488 с.
- Айвазян С. А., Енюков И. С., Мешалкин Л. Д. Прикладная статистика (Том 2): Исследование зависимостей: Справ. изд. — М.: Финансы и статистика, 1985. — 487 с.
- Булгаков Н. Г., Рисник Д. В., Левич А. П., Милько Е. С. Анализ экологического состояния вод для отдельных створов Нижней Волги на основе биоиндикации по показателям видового разнообразия фитопланктона // Вода: химия и экология. — 2010. — № 12. — С. 27–34.
- 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. Ошибка измерений физических величин. — Л.: Наука, 1974. — 108 с.
- Левич А. П., Булгаков Н. Г., Максимов В. Н., Рисник Д. В. «In situ»-технология установления локальных экологических норм // Вопросы экологического нормирования и разработка системы оценки состояния водоемов. — М.: Товарищество научных изданий КМК, 2011. — С. 32–57.
- Левич А. П., Забурдаева Е. А., Максимов В. Н., Булгаков Н. Г., Мамихин С. В. Поиск целевых показателей качества для биоиндикаторов экологического состояния и факторов

- окружающей среды (на примере водных объектов р. Дон) // Водные ресурсы. — 2009. — Т. 36, № 6. — С. 730–742.
- Левич А. П., Рисник Д. В., Булгаков Н. Г., Милько Е. С., Леонов А. О. Методические вопросы применения показателей видового разнообразия фитопланктона для анализа качества вод Нижней Волги // Использование и охрана природных ресурсов России. — 2010. — № 5. — С. 44–48; № 6. — С. 33–37.
- 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.
- Поиск связей между биологическими и физико-химическими характеристиками экосистемы Рыбинского водохранилища. Часть 1. Критерии неслучайности связи / Рисник Д. В., Левич А. П., Булгаков Н. Г., Бикбулатов Э. С., Бикбулатова Е. М., Еришов Ю. В., Конюхов И. В., Корнева Л. Г., Лазарева В. И., Литвинов А. С., Максимов В. Н., Мамихин С. В., Осипов В. А., Отюкова Н. Г., Поддубный С. А., Пырина И. Л., Соколова Е. А., Степанова И. Э., Фурсова П. В., Цельмович О. Л. // Компьютерные исследования и моделирование. — 2013. — № 1. — С. 83–105.
- 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.
- Чесноков С. В. Детерминационный анализ социально-экономических данных. — М.: Наука, 1982. — 168 с.
- Burkholder P. R., Burkholder L. M., Rivero J. A. Chlorophyll «a» in some corals and marine plants // Nature. — 1959. — Vol. 183, No 4671. — P. 1338–1339.
- Goodman L. A. Kruskal W. H. Measures of association for cross classifications: I–IV. — J. Amer. Stat. Assoc., Vol. 49, 1954. — P. 723–764; 54, 1959, P. 123–163; 58, 1963, P. 310–364; 67, 1972 P. 322–345.
- Guttman L. An outline of the statistical theory of prediction // In: Horst P. and others (ed.). The Prediction of Personal Adjustment, Social Science Research Council, Bulletin 48, New York, 1941. P. 253–318.
- Lorenzen C. J. Determination of chlorophyll and pheopigments: spectrophotometric equations // Limnology and Oceanography. — 1967. — Vol. 12, No 2. — P. 343–346.
- Lorenzen C. J., Jeffrey S. W. Determination of chlorophyll in seawater // UNESCO Technical Papers in Marine Sciences. Paris: UNESCO, 1980. — No 35. — P. 3–20.