

Определение концентрации летучих молекулярных маркеров эвтрофикации водоемов с использованием терагерцовой спектроскопии и методов машинного обучения*

А.К. Третьяков¹, В.В. Николаев¹, Ю.В. Кистенев¹

¹Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

Приведена оценка концентраций молекул-маркеров процесса эвтрофикации водоемов (CO_2 , H_2S , CH_4 , N_2O и PH_3) с применением алгоритма формально независимого моделирования аналогий классов (Soft Independent Modeling of Class Analogy, SIMCA). Объектом исследования являлись терагерцовые спектры многокомпонентных газовых смесей на основе атмосферного воздуха, сгенерированные в диапазоне частот $0.667\text{--}36.692\text{ см}^{-1}$ с разрешением 0.01 см^{-1} . Продемонстрирована эффективность алгоритма SIMCA в определении концентраций молекул-маркеров процесса эвтрофикации.

Ключевые слова: эвтрофикация, метан, диоксид углерода, сероводород, закись азота, фосфин, терагерцовая спектроскопия, машинное обучение, SIMCA.

Введение

Антропогенное эвтрофирование внутренних водоемов представляет собой одну из наиболее распространенных и масштабных угроз для водных экосистем по всему миру [1]. Поступление избыточных количеств биогенных элементов, главным образом азота и фосфора, со стоками сельскохозяйственных угодий и коммунально-бытовых вод приводит к каскаду негативных последствий, включая массивное развитие фитопланктона (в том числе токсичных цианобактерий), снижение прозрачности воды и деоксигенацию придонных слоев [2, 3].

Количественную оценку трофического состояния водных объектов принято оценивать при помощи индекса трофического состояния (Trophic State Index, TSI), основанного на измерениях концентрации хлорофилла-а, прозрачности по диску Секки и общем содержании фосфора [4]. Диапазон значений индекса составляет от 0 до 100, при этом более высокие значения указывают на более высокую степень обогащения питательными веществами и повышенную биологическую активность. Выделяют четыре основных состояния: олиготрофное ($\text{TSI} < 40$), мезотрофное ($\text{TSI} \in [40, 50]$), эвтрофное ($\text{TSI} \in (50, 80]$) и гиперэвтрофное ($\text{TSI} > 80$) [5]. При протекании в водоеме процессов эвтрофикации значение TSI превышает 50, также наблюдаются высокий уровень питательных веществ, обильный рост водорослей и снижение прозрачности воды.

Традиционно исследования последствий эвтрофикации сфокусированы на изменениях в биоте и гидрохимическом режиме [6]. В последние годы все большее внимание уделяется роли эвтрофированных водоемов как значимых источников парниковых газов – диоксида углерода (CO_2), сероводорода (H_2S), метана (CH_4), закиси азота (N_2O), фосфина (PH_3) и др., которые далее обозначены как молекулы-маркеры процесса эвтрофикации (МПЭ) [7–13]. Список рассмотренных в исследовании молекул МПЭ и их характерные величины концентраций при протекании процесса эвтрофикации приведены в табл. 1. Большинство существующих работ оценивают потоки газов с поверхности водоемов в целом, без детализации пространственной неоднородности, связанной с локализованными очагами эвтрофикации [8]. В частности, остаются малоизученными процессы в прибрежных зонах, наиболее подверженных антропогенной нагрузке [9].

Перспективным направлением является применение методов спектроскопии в терагерцовом (ТГц) диапазоне, который обладает уникальной чувствительностью к вращательным переходам молекул, что позволяет проводить как их идентификацию, так и количественный анализ [14]. Для анализа многокомпонентных газовых смесей, которыми являются пробы газов над эвтрофированными водоемами, особенно эффективны методы машинного обучения с многомерной классификацией и регрессией. Одним из таких методов является алгоритм формально независимого моделирования аналогий классов (Soft Independent Modeling of Class Analogy, SIMCA) [15]. Алгоритм SIMCA осуществляет классификацию в пространстве метода главных компонент (Principal

* Работа выполнена в рамках государственного задания ТГУ, тема номер FSWM-2025-0038.