

CZU: 543.3:502

OPTIMIZAREA DETERMINĂRII CAPACITĂȚII DE INHIBIȚIE A APELOR NATURALE

Vladislav BLONCHI, Viorica GLADCHI

Universitatea de Stat din Moldova

În lucrare sunt prezentate rezultatele studiului multianual ce țin de optimizarea determinării capacității de inhibiție, obținute în urma prelucrării statistice a datelor empirice din perioada anilor 2008-2017. În rezultatul prelucrării statistice a datelor multianuale, a fost propusă valoarea medie a vitezei de decolorare a indicatorului PNDMA în apă distilată, care optimizează calcularea capacității de inhibiție a apelor.

Cuvinte-cheie: *capacitate de inhibiție, serie statistică, distribuție normală Gauss, distribuție normală Student, limite de siguranță.*

OPTIMIZE DETERMINATION OF NATURAL WATER INHIBITION CAPACITY

This paper contain the results of multi-annual study on the optimization of inhibition capacity determination, obtained after statistical processing of empirical data from 2008-2017. Thereafter of statistical processing of multi-annual data, it was proposed the average value of fading speed of PNDMA indicator in distilled water, that optimize computation of the inhibition capacity of waters.

Keywords: *inhibitory capacity, statistical series, normal Gaussian distribution, normal Student distribution, safety limits.*

Introducere

Apele naturale posedă capacitatea de autopurificare, prin care se înțelege ansamblul proceselor hidrodinamice, fizice, chimice și biologice care contribuie la micșorarea sau înlăturarea substanțelor nocive din mediu și la restabilirea parametrilor fizico-chimici inițiali. Procesele chimice de autopurificare se limitează la transformarea poluanților ca rezultat al hidrolizei, oxidării sau fotolizei [1].

Intensitatea proceselor de autopurificare radicalică a apelor naturale poate fi evaluată cu ajutorul parametruului *capacitatea de inhibiție*, care precede la determinarea indirectă a concentrației staționare de radicali OH și presupune utilizarea „capcanei” de radicali – a colorantului N,N-dimetil-4-nitrozodimetilanilina (PNDMA). Determinarea practică a acestui parametru necesită timp relativ îndelungat, îndeosebi în cazul în care concomitent se analizează mai multe probe de apă.

Prelucrarea statistică a datelor empirice existente, obținute în perioada anilor 2008-2017, oferă posibilitatea de a micșora durata determinărilor, precum și de a efectua experimentul în aceleași condiții, grație duratei mai scurte de timp, ceea ce permite ulterior compararea mai obiectivă a rezultatelor obținute.

Material și metode

Datele empirice la determinarea parametruului *capacitatea de inhibiție* a probelor de apă din diferite obiecte acvatice ale bazinului hidrografic al Nistrului au fost obținute în perioada anilor 2008-2017, în cadrul Laboratorului „Chimie Ecologică” al Universității de Stat din Moldova.

Capacitatea de inhibiție se calculează conform metodologiei descrise în [1], reieșind din vitezele de destrucție fotochimică a colorantului PNDMA în apa distilată și în apa naturală. Destrucția se realizează ca rezultat al interacțiunii colorantului cu radicalii OH, care sunt generați la fotoliza peroxidului de hidrogen adăugat în sistem. În calitate de sursă de raze UV se folosește lampa policromatică DRT-400, care se caracterizează cu spectrul efectiv de emisie cuprins între 240 și 440 nm. Concentrația PNDMA în sistem a fost determinată spectrofotometric la lungimea de undă de 440 nm, apoi a fost calculată viteza inițială de decolorare a colorantului în diverse sisteme studiate.

Seria de date obținute empiric a fost prelucrată statistic după următorul algoritm:

- 1) au fost calculați parametrii statistici: media (\bar{x}), mediana (x_{med}), dispersia (S^2) și abaterea standard (S) [2];
- 2) a fost stabilită distribuția normală Gauss, care reprezintă dependența grafică a vitezei de decolorare a PNDMA funcție de frecvența apariției valorilor în serie [2];

3) au fost stabilite gradele de libertate, conform relației:

$$f = n - 1 ,$$

unde n – numărul de valori în serie;

4) a fost ales nivelul de încredere (P sau α);

5) au fost interpretați parametrii statistici: media (\bar{x}), dispersia (S^2), abaterea standard (S), în scopul argumentării posibilității de a utiliza valoarea obținută pe post de constantă în formula de calcul a capacității de inhibiție;

6) a fost aplicat testul Student, limitele de siguranță a seriei de date fiind calculate după formula:

$$A = \bar{x} \pm \delta , \text{ iar } \delta = t_{p,f} \frac{S}{\sqrt{n}} ,$$

unde: δ – limitele de siguranță;

\bar{x} – media seriei de date;

S – abaterea standard;

n – numărul de valori în serie;

$t_{p,f}$ – coeficientul Student tabelar.

Rezultate și discuții

Viteza de decolorare fotochimică a PNDMA în apa distilată variază într-un interval foarte îngust, de aceea de fiecare dată s-a lucrat respectând aceleași concentrații de PNDMA și peroxid de hidrogen și a fost folosită aceeași apă distilată, preparată conform standardelor de calitate. Analiza rezultatelor denotă posibilitatea optimizării metodicii de determinare a capacității de inhibiție, care constă în omiterea determinării practice a vitezei de decolorare a PNDMA în apa distilată ($W_{a.d.}$), utilizând în calcule valoarea medie multianuală a acestui parametru.

Seria de date obținute pe parcursul cercetărilor obiectelor acvatice ale bazinului hidrografic al Nistrului conține 37 de valori ale vitezelor de decolorare a PNDMA în apă distilată ($W_{a.d.}$) (a se vedea Tabelul), toate fiind numeric cuprinse în limitele unui ordin – 10^{-8} M/s. Pentru simplitatea efectuării calculelor a fost omis ordinul valorilor (10^{-8}).

Tabel

Vitezele de decolorare a colorantului PNDMA în perioada studiului multianual și unii parametri statistici (media (\bar{x}), dispersia (S^2) și abaterea standard (S))

Nr.	$W_{a.d.} \cdot 10^8, \text{ M/s}$	Parametrii statistici
1	2,73	$\bar{x} = 4,34$
2	3,01	
3	3,09	
4	3,13	
5	2,89	
6	6,36	
7	7,93	
8	7,06	
9	6,40	
10	6,37	
11	6,08	
12	5,92	
13	5,74	
14	5,83	
15	5,92	
16	4,95	
17	4,25	
18	5,55	
19	3,40	
20	6,59	
		$S^2 = 2,96$

21	5,94
22	5,04
23	4,22
24	3,21
25	4,77
26	4,72
27	4,31
28	2,94
29	3,80
30	3,68
31	2,09
32	2,22
33	2,00
34	2,02
35	2,39
36	1,97
37	1,66

$S = 1,72$

Inițial a fost stabilită distribuția normală Gauss, deoarece seria statistică conține mai mult de 20 de valori [2].

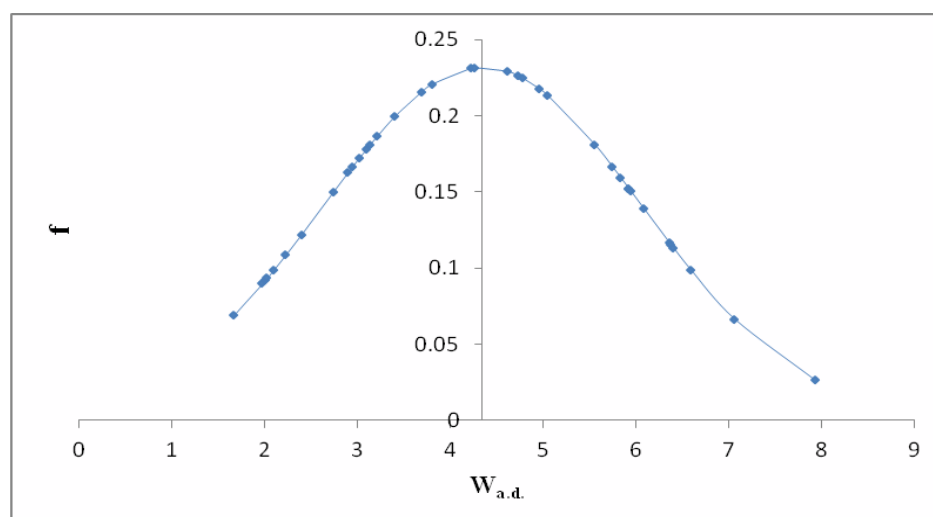


Fig.1. Distribuția normală Gauss a seriei de date.

Rezultatul obținut confirmă distribuția normală, care în cazul curbei Gauss trebuie să fie sub forma unui clopot simetric, în care vârful trece prin media șirului. *Distribuția t* sau *distribuția normală Student* (conform căreia în cazul seriilor de date, în care $f > 20$, distribuția tinde spre normalitate, adică $t_{p,f}$ tinde spre 2, conform coeficientului Student tabelar) încă o dată confirmă normalitatea seriei de date [2].

După ce a fost stabilit că seria de date este normal distribuită, au fost determinate gradele de libertate (f), fiind egale cu 36, și nivelul de încredere ales (P), care este egal cu 95% (ceea ce reprezintă un nivel la care cel mai des se operează în prelucrarea statistică și care presupune că în intervalul $\pm 2S$ se vor include 95% din toate valorile, iar probabilitatea că rezultatul obținut nu se va cuprinde în acest interval constituie 5% ($\alpha=0,05$)) [2].

Valorile parametrilor statistici determinați ($\bar{x} = 4,34$, $x_{med} = 4,25$), care caracterizează tendința de centrare a seriei de date, au demonstrat că seria este moderat centrată: media și mediana sunt apropiate ca valoare. Parametrii $S^2 (2,96)$, $S (1,72)$, ce caracterizează tendința de împrăștiere, la fel au confirmat că seria este moderat centrată. Acest fapt satisface cerințele prelucrării statistice, deoarece datele sunt foarte mici (de ordinul 10^{-8}), iar, conform curbei Gauss, acestea sunt distribuite normal (se respectă forma de clopot cu un singur vârf).

Așadar, în baza parametrilor statistici calculați, a fost stabilit că poate fi omisă determinarea practică a vitezei de decolorare a PNDMA în apa distilată și în calcul poate fi folosită valoarea medie multianuală a acestui parametru. Cu ajutorul testului Student au fost determinate limitele de siguranță ($\delta = 2,03 * \frac{1,72}{\sqrt{37}} = 0,57$) și valoarea respectivă a vitezei ($W_{a.d.} = (4,34 \pm 0,57) \cdot 10^{-8}$ M/s).

Concluzii

1. În baza rezultatelor cercetărilor hidrochimice ale obiectelor acvatice ale bazinului hidrografic al râului Nistru privind determinarea parametrului *capacitatea de inhibiție* și în urma prelucrării statistice a seriei de date s-a reușit de a optimiza determinarea acestui parametru prin utilizarea valorii medii a vitezei de decolorare a PNDMA în apă distilată ($W_{a.d.}$), ceea ce va contribui la reducerea timpului de efectuare a experimentului și va permite efectuarea acestuia în aceleași condiții.

2. Valoarea vitezei de decolorare a PNDMA în apă distilată ($W_{a.d.}$), obținută în urma prelucrării statistice, propusă în calitate de constantă, constituie $(4,34 \pm 0,57) * 10^{-8}$ M/s, iar mărimea limitelor de siguranță ($\pm 0,57$) este acceptabilă, din motiv că valorile vitezei de decolorare sunt foarte mici, de ordinul 10^{-8} M/s.

Referințe:

1. DUCA, Gh., GLADCHI, V., GOREACEVA, N. *Lucrări practice la chimia apelor naturale*. Chișinău: CEP USM, 2007, p.102-106.
2. ВАСИЛЬЕВ, В. *Аналитическая химия. Часть I. Гравиметрический и титриметрический методы анализа*. Москва: Высшая школа, 1989, с.122-143.

Notă: *Lucrarea a fost efectuată în cadrul Proiectului Instituțional „Elaborarea procedeeleor de epurare a apelor reziduale de poluanți greu biodegradabili și compoziția, autopurificarea chimică, posibilități de valorificare a apelor din bazinul Nistrului de Jos”, din cadrul direcției strategice 50.07 „Materiale, tehnologii și produse inovative”, înscris în Registrul de Stat al proiectelor din sfera științei și inovării cu cifrul 15.817.02.35A.*

Prezentat la 03.10.2017