

На правах рукописи



Байбакова Евгения Васильевна

**ХЕМОМЕТРИЧЕСКИЙ ПОДХОД К РЕГИОНАЛЬНОМУ
НОРМИРОВАНИЮ ПРИРОДНЫХ ВОД В УРБООЭКОСИСТЕМЕ**

1.5.15. Экология

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата химических наук

Казань – 2024

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ» и в Институте проблем экологии и недропользования (обособленном подразделении Государственного научного бюджетного учреждения «Академия наук Республики Татарстан»).

Научный
руководитель доктор химических наук, профессор,
Тунакова Юлия Алексеевна

Официальные
оппоненты: **Фрумин Григорий Тевелевич** – доктор химических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена», ведущий научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории рационального природопользования;

Ахметшин Динар Агзямович – кандидат технических наук, доцент, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет», и.о. заведующего кафедрой интеллектуальных систем и управления информационными ресурсами

Ведущая
организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр «Карельский научный центр
Российской Академии наук», г. Петрозаводск

Защита состоится «25» декабря 2024 г. в 14:00 часов на заседании объединенного диссертационного совета 99.2.028.02, созданного на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет», федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет» по адресу: 420015, г. Казань, ул. К. Маркса, 68, Зал заседаний Ученого совета (А-330).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет» и на сайте https://www.kstu.ru/event.jsp?id=161754&id_cat=141

Автореферат диссертации разослан «__» октября 2024 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета
99.2.028.02



Хабибрахманова
Венера Равиловна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы связана с несколькими аспектами. Во-первых, пространственная неоднородность химического состава поверхностных вод является неоспоримым аргументом в пользу развития системы нормирования с учетом региональных особенностей. Предельно допустимые концентрации химических веществ (ПДК), установленные на общегосударственном уровне, часто ниже фоновых концентраций для нормируемых загрязняющих веществ в сточных водах, что, в конечном итоге, приводит к некорректному установлению нормативов допустимых сбросов (НДС) и снижению эффективности водоохранной деятельности в целом. Во-вторых, часто водные объекты урбанизированных территорий являются одновременно источниками питьевого водоснабжения и приемниками сточных вод. Антропогенный привнос загрязняющих веществ со сточными водами является одним из значимых факторов формирования качества поверхностных вод урбоэкосистемы. Необходимость разработки взаимоувязанной системы региональных нормативов обусловлена естественной тесной связью водных элементов урбоэкосистемы «природные воды - питьевые воды - сточные воды - очищенные сточные воды - природные воды». Система региональных нормативов и показателей качества вод урбоэкосистемы, выстроенная с применением единых подходов, необходима для повышения эффективности управления водопользованием. В-третьих, в условиях цифровизации отрасли водопользования, разработка региональных нормативов с использованием хеометрических подходов позволяет выявлять региональные природно-антропогенные особенности при анализе массивов экспериментально полученных гидрохимических данных о составе природных, питьевых и сточных вод, что, в свою очередь, расширяет возможности хеометрики.

Степень разработанности темы. Результаты исследований природно-антропогенных отличий химического состава природных вод дают исчерпывающее обоснование необходимости разработки региональных нормативов качества для природных водных объектов (Кузьмич и др., 2013; Левич, 2011; Лазарев, 2022; Лепихин, Мирошниченко, 2002; Лепихин и др., 2015; Никаноров, 2013; Носаль, 2004; Янин, 2012 и др.). Многие специалисты выступают с конструктивной критикой действующего подхода обоснования нормативов допустимых сбросов загрязняющих веществ (НДС), отмечая, что при обосновании пределов антропогенного воздействия на водные экосистемы применяются не достаточно обоснованные требования, что является одной из основных причин неудовлетворительного состояния поверхностных вод (Гагарина, 2010; Иванов, 2018; Моисеенко, 2009; Мусихина, Черезова, 2009; Селезнев, Селезнева, 2013 и др.). Однако отсутствие общепринятого представления об особенностях учета региональных природных и антропогенных факторов, формирующих состав природных вод, препятствует созданию единой и общепринятой методологии регионального нормирования.

В работе подчеркивается необходимость цифровой трансформации отрасли водопользования, что требует развития расчетных методов и информационных технологий, которые представляют собой основные инструменты хеометрики, для регионального нормирования вод урбоэкосистемы.

Целью работы является создание новых хеометрических подходов к формированию системы региональных нормативов и показателей качества, а также предельных величин допустимых воздействий на природные воды урбоэкосистемы.

Задачи, решаемые в работе:

1. Выделение классифицирующих показателей и классификация поверхностных вод Волжско-Камского бассейна в пределах Республики Татарстан по совокупности гидрохимических показателей, обоснование значений региональных пороговых концентраций;
2. Модификация способа расчета удельного комбинаторного индекса загрязненности поверхностных вод на основе региональных пороговых концентраций;

3. Разработка показателя для оценки гидрохимического состава питьевых вод (гидрохимический статус), приготавливаемых из вод поверхностного водоисточника, как водного элемента урбоэкосистемы, с определением интервала перехода от приемлемого уровня риска к опасному;

4. Разработка методики расчета нормативов допустимого сброса загрязняющих веществ, с учетом региональных особенностей водного объекта, с апробацией для предприятия химической отрасли промышленности.

Научная новизна:

1. Разработан способ хемометрической классификации поверхностных вод урбоэкосистемы с применением нейросетевого кластерного, факторного анализа и экспертной оценки для выявления природно-антропогенных особенностей формирования их химического состава. Установлены диапазоны значений региональных пороговых концентраций основных и вспомогательных классифицирующих гидрохимических показателей для выделения классов поверхностных вод.

2. На основании установленных региональных пороговых концентраций модернизирован способ расчета удельного комбинаторного индекса загрязненности поверхностных вод, для устранения завышения или занижения его значений за счет учета природных и антропогенных особенностей, корректирующих результаты оценки классов качества поверхностных вод.

3. Впервые предложен показатель, гидрохимический статус, для комплексной оценки питьевых вод, как водного элемента урбоэкосистемы, объединяющий санитарно-гигиенические и экологические подходы для характеристики их качества, сопоставленный с уровнями экологического риска, для определения интервала перехода от приемлемого уровня загрязненности к опасному и классов качества питьевых вод.

4. Разработана методика расчета нормативов допустимого сброса загрязняющих веществ для сточных вод урбоэкосистемы с применением обоснованных региональных пороговых концентраций, позволяющая в целом снижать антропогенное воздействие на водный объект за счет применения более жестких нормативов допустимого сброса в отношении загрязняющих веществ преимущественно антропогенного происхождения, и предъявлять более обоснованные, с точки зрения региональных особенностей, требования к водопользователям.

Теоретическая и практическая значимость. Теоретическая значимость работы заключается в расширении возможностей хемометрики в части разработки подходов к оценке качества и регионального нормирования природных вод в урбоэкосистеме на базе массивов гидрохимических данных, с применением современных расчетных методов и информационных технологий. Результаты проведенных исследований изложены в монографии «Региональное нормирование природных вод в урбоэкосистеме».

Практическая значимость работы заключается в том, что установленные диапазоны пороговых концентраций классифицирующих гидрохимических показателей поверхностных вод могут применяться для экологического мониторинга и расчета нормативов допустимых сбросов в регионе. Разработанный способ расчета региональных нормативов и компьютерная программа, позволяют относить пробу воды поверхностного водоисточника Волжско-Камского бассейна к одному из выделенных классов вод. Полученные результаты предназначены для цифровой трансформации управления водопользованием и переданы в Министерство экологии и природных ресурсов Республики Татарстан (справка о передаче результатов диссертационной работы). Способ и результаты оценки составов поверхностных вод в районе г. Казани используются в практической деятельности ОАО «Казанский завод синтетического каучука» (ОАО «КЗСК») (акт использования результатов расчета фоновых концентраций и региональных пороговых концентраций для оценки уровня негативного воздействия сточных вод предприятия в отношении веществ двойного генезиса).

Теоретическую и практическую значимость работы подчеркивает то, что научные исследования проведены при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках

исполнения обязательств по Соглашениям №075-03-2023-032 от 16.01.2023 г и №075-03-2024-067 от 17.01.2024 г. (номер темы FZSU-2023-0005).

Материалы диссертации внедрены в учебный процесс Казанского национального исследовательского технического университета им. А.Н.Туполева-КАИ для подготовки бакалавров по направлению 20.03.01 «Техносферная безопасность» при изучении дисциплин «Прикладная экология», «Экологический мониторинг и производственный экологический контроль» (акт о внедрении). Материалы диссертационной работы использованы при подготовке учебных пособий «Прикладная экология» и «Экологический мониторинг и производственный экологический контроль».

Методология и методы исследования. Работа разделена на четыре взаимосвязанных блока:

1. Получение и обработка результатов химического анализа вод урбоэкосистемы с формированием баз данных гидрохимических показателей природных вод и приготавливаемых из них вод питьевого качества; классификация поверхностных вод по гидрохимическим показателям с применением разработанной компьютерной программы (Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2024616050), обоснование пороговых значений гидрохимических показателей);
2. Оценка качества поверхностных вод с использованием удельного комбинаторного индекса загрязненности воды (УКИЗВ) с применением региональных пороговых концентраций (РПК);
3. Обоснование показателя ГХ-статус для оценки качества питьевых вод, как водного элемента урбоэкосистемы;
4. Разработка методики расчета нормативов допустимого сброса загрязняющих веществ с применением обоснованных РПК.

Методическая часть работы включала работу с литературными и статистическими данными, изучение проектных документов предприятия, нормативных и правовых актов в области нормирования качества природных вод и антропогенного воздействия на них, отбор проб, пробоподготовку, химический анализ и обработку результатов анализа.

Отбор проб воды из поверхностных водных объектов, питьевых вод, производственных сточных вод производился в соответствии с требованиями актуальных ГОСТ и РД. Химико-аналитические исследования поверхностных, питьевых и сточных вод проводились в специализированных лабораториях кафедры общей химии и экологии Казанского национального исследовательского технического университета им. А.Н. Туполева-КАИ, лаборатории биогеохимии Института проблем экологии и недропользования Академии наук Республики Татарстан. Исследования выполнены (с участием диссертанта) с использованием современных методов анализа, в том числе, рекомендуемых для государственного экологического контроля. Результаты измерений интегрировали в электронную базу данных в формате MicroSoft Excel 2010.

При определении РПК использованы инновационные методы искусственного интеллекта. Для классификации массивов гидрохимических данных использовался алгоритм на основе самообучающихся нейронных сетей Кохонена с последующей двумерной визуализацией SOM-картами. Статистическую обработку данных проводили с применением программного пакета Statistica 10 в комплекте поставки «Automated Neural Networks + DataMiner». Проектные данные для расчета нормативов допустимого сброса получены на ОАО «Казанский завод синтетического каучука».

Объекты исследования: химический состав поверхностных вод Волжско-Камского бассейна, сточные воды предприятия ОАО «Казанский завод синтетического каучука», питьевые воды из централизованной системы водоснабжения г. Казани, приготавливаемые из поверхностных вод.

Предмет исследования: нормативы качества и воздействия для вод урбоэкосистемы.

На защиту выносятся:

1. Региональная классификация поверхностных вод и значения региональных пороговых концентраций классифицирующих гидрохимических показателей Волжско-Камского бассейна, обоснованные на массивах результатов гидрохимических измерений, многомерном нейросетевом кластерном, факторном анализе и экспертной оценке.
2. Модификация способа расчета УКИЗВ путем учета природно-антропогенных особенностей гидрохимических составов поверхностных вод, позволяющего устранить завышение или занижение значений для веществ двойного генезиса для управления водопользованием в регионе.
3. Показатель гидрохимический статус питьевых вод, предложенный для оценки их гидрохимического состава, увязанный с уровнем экологического риска и величиной УКИЗВ, рассчитанных для вод поверхностного источника водоснабжения.
4. Методика расчета нормативов допустимого сброса загрязняющих веществ в водный объект, апробированная для предприятия химической отрасли промышленности, основанная на учете региональных особенностей водного объекта и обеспечении сохранения класса качества поверхностных вод после отведения сточных вод.

Соответствие диссертации паспорту специальности. Диссертация соответствует паспорту специальности 1.5.15. Экология согласно: п.3. Научное обоснование, разработка и совершенствование методов проектирования технико-технологических систем и нормирования проектной и изыскательской деятельности, обеспечивающих минимизацию антропогенного воздействия на живую природу химической и нефтегазовой отрасли.

Степень достоверности результатов исследования. Достоверность результатов исследования подтверждается массивом полученных результатов измерений химического состава вод урбозкосистемы, применением актуальных, рекомендуемых для государственного контроля физико-химических методов анализа, применением современного аналитического оборудования в специализированных лабораториях, использованием общепринятых методов статистической обработки результатов, лицензионных компьютерных программ для статистической обработки данных, применением инновационных информационных технологий, экспертной оценки. Полученные значения погрешности измерений при воспроизводимости результатов не выходят за пределы допустимых.

Апробация результатов работы. Основные материалы и результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на 14 международных и всероссийских научных и научно-практических конференциях: XX-XXII Международной научной конференции «Химия и инженерная экология» (школа молодых ученых) (Казань, 2021-2023гг.); на 63 Всероссийской научной конференции Московского физико-технического института (МФТИ) (Москва, 2020); Международной молодежной научной конференции «Тинчуринские чтения» (Казань, 2023); Всероссийской научной конференции с международным участием «Инновационные технологии защиты окружающей среды в современном мире» (Казань, 2021); на III Международной научно-технической интернет конференции «Защита окружающей среды от экотоксикантов: международный опыт и российская практика» (Уфа, 2021); на Международной молодежной научной конференции «XXV Туполевские чтения (школа молодых ученых)», посвященной 60-летию со дня осуществления первого полета человека в космическое пространство и 90-летию Казанского национального исследовательского технического университета им. А.Н. Туполева-КАИ (Казань, 2021); на Национальной научно-практической конференции студентов, аспирантов, молодых ученых и специалистов «Актуальные проблемы экологии и природопользования» (Санкт-Петербург, 2022); на 12-ой Международной научно-практической конференции студентов и аспирантов Казанские научные чтения студентов и аспирантов (Казань, 2022); на Всероссийской научно-практической конференции «Антропогенная трансформация геопространства: меняющийся мир – штрихи к портрету» (Волгоград, 2023); на

Всероссийской научной конференции «Безопасность, защита и охрана окружающей природной среды: фундаментальные и прикладные исследования» (Белгород, 2023).

Личный вклад автора. Автору принадлежит основная роль в проведении лабораторных исследований, анализе и обобщении полученных данных, разработке и апробации методики расчета нормативов допустимых сбросов загрязняющих веществ. Постановка задач, планирование экспериментов, формулирование выводов, подготовка научных статей осуществлены совместно с научным руководителем. Автор приносит благодарность научному руководителю, д.х.н., профессору Ю.А. Тунаковой за научное руководство и помощь в подготовке диссертации к защите, коллегам: д.т.н., профессору КНИТУ-КАИ С.В. Новиковой, сотрудникам ИПЭН АН РТ д.х.н., Шагидуллиной Р.А., д.г.н. Д.В. Иванову, с.н.с. В.С. Валиеву за помощь в проведении исследований и ценные рекомендации.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 23 научные работы, из них 3 статьи в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК Минобрнауки России по специальности, в том числе 2 в журнале, входящем в международные базы данных Scopus и WoS, 1 статья в другом рецензируемом научном издании из перечня ВАК Минобрнауки России, 1 статья в научном журнале, входящем в международные базы данных и системы цитирования Scopus и WoS, 17 публикаций в сборниках материалов и тезисов Международных и Всероссийских научных конференций, 1 авторское свидетельство (№ 2024616050/ 15.03.2024) на программу многоуровневой нейросетевой классификации гидрохимических данных с нечеткими элементами на основе экспертного оценивания.

Структура диссертации. Диссертационная работа изложена на 172 страницах машинописного текста, содержит 31 рисунок и 20 таблиц, состоит из введения, 5 глав, заключения, списка цитируемой литературы и 16 приложений. Библиографический список включает 311 источников, в т.ч. 53 зарубежных авторов.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснованы актуальность темы работы, степень научной проработанности проблемы регионального экологического нормирования вод урбоэкосистемы и соответствие темы паспорту специальности, приводятся цель, задачи исследования, сформулированы научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, положения, выносимые на защиту, методология исследования.

Глава 1. Литературный обзор

В первой главе проанализированы факторы формирования состава природных вод, дается обоснование необходимости разработки региональных нормативов качества природных вод для поверхностных водных объектов, приведен обзор методов разработки региональных нормативов качества поверхностных вод, показаны их преимущества и недостатки, проанализированы подходы к классификации поверхностных вод для учета природно-антропогенных особенностей гидрохимического состава, дан обзор методов комплексной оценки составов вод урбоэкосистемы, методов обработки результатов измерений, показаны преимущества хеометрических, в частности, нейросетевых подходов к анализу экспериментальных данных. Показано развитие хеометрии и использование хеометрических подходов в мониторинге состояния водных объектов. Обоснована применимость искусственной нейронной сети в системе оценки качества природных вод, показаны алгоритмы кластеризации исследуемых в рамках оценки качества вод водных объектов, показаны положительные результаты применения алгоритмов кластеризации в системе оценки качества природных вод. Проанализированы подходы к регулированию антропогенного воздействия на водные объекты, выделены недостатки действующей системы нормирования сбросов загрязняющих веществ, показана необходимость разработки взаимоувязанных региональных нормативов качества природных поверхностных вод и воздействия на них для повышения эффективности управления водопользованием.

Глава 2. Объекты, материалы и методы исследования

Во второй главе описаны объекты и методы исследования, методы статистической обработки результатов. Объектами исследования являлись:

– поверхностные водные объекты Волжско-Камского бассейна: р. Волга, 4,7 км ниже г. Казани; р. Волга, выше г. Зеленодольск; р. Ашит, с. Алан-Бексер; р. Волга, г. Казань, 1 км выше водозабора; р. Волга, с. Кызыл Байрак; р. Казанка, 3-я транспортная дамба; р. Казанка, с. Усады; р. Кама, с. Сорочьи Горы; р. Меша, с. Карадули; р. Меша, с. Узяк; р. Свияга, мост на автодороге М-7; р. Сулица, с. Савино. Пробы поверхностных вод (353 образца) отбирались ежемесячно подразделением Министерства экологии и природных ресурсов Республики Татарстан с 2014 по 2021 гг. В отобранных образцах проб контролировались следующие показатели: алюминий, аммоний ион, взвешенные вещества, гидрокарбонаты, железо, кальций, магний, марганец, медь, цинк, нефтепродукты, никель, нитраты, нитриты, общее содержание ионов (минерализация), сульфаты, фенол, фосфат-ион, хлориды, ХПК, БПК₅ (в мг/дм³), общая жесткость (в градусах жесткости), кислород раствор., мгО₂/дм³, прозрачность, см, температура, °С, электропроводность, мкСм/дм³, рН.

– питьевые воды по территории г. Казани, приготавливаемые из вод поверхностного водоисточника, отобранные по адресам: ул. Боевая, 147; ул. Татарстан, 7; ул. Тимирязева, 2а; ул. Х. Такташ, 123; ул. Космонавтов, 44; ул. Паровозников, 1; ул. Чистопольская, 3; ул. Чистопольская, 4; ул. Дубровка, 2; ул. Трансформаторная, 16; ул. Волкова, 15/17; ул. Коновалова, 26; ул. Карбышева; ул. Окраинная; ул. Горсоветская, 17; ул. Оренбургский тракт; ул. Четаева; ул. Горького, 34; ул. Лукина-Пржевальского; ул. Сибирский тракт, 34; ул. Блюхера, 4; ул. Сеченова, 13а; ул. Тэцевская, 16. Пробы питьевых вод отбирались в период с 2014 г. по 2021 г. и оценивались по показателям (мг/дм³): алюминий, железо, магний, нитраты, нитриты, сульфаты, медь, фториды, хлориды, хлороформ, сухой остаток и общая жесткость (градусы);

– сточные воды ОАО «Казанский завод синтетического каучука», оцениваемые по показателям (мг/дм³): аммоний ион, БПК₅, нефтепродукты, нитраты, нитриты, сульфаты, хлориды, фосфат-ион, анионные поверхностные активные вещества (АПАВ), формальдегид, сульфиды.

Химико-аналитические исследования выполнены с применением общепринятых методов анализа (флуориметрии, фотометрии, атомно-абсорбционной спектрометрии, газожидкостной и ионной хроматографии и др.).

В главе приведены диапазоны значений анализируемых гидрохимических показателей исследуемых водных объектов, дается подробное описание природных и антропогенных условий формирования состава вод исследуемых водных объектов, условий и факторов формирования питьевых вод, приготавливаемых из поверхностных вод. Приведена характеристика сточных вод предприятия ОАО «Казанский завод синтетического каучука». Приведены методы математической обработки результатов, дано описание метода многомерной нейросетевой кластеризации, применяемого для классификации поверхностных водных объектов по гидрохимическим показателям. Дано подробное описание методических подходов к исследованию (рисунок 1).

Представленные на рисунке 1 этапы исследования, позволяют учесть тесную взаимосвязь составов поверхностных, питьевых, сточных вод в урбоэкосистеме, а также осуществлять оценку их качества и региональное нормирование с учетом природно-антропогенных особенностей состава их вод, что необходимо при принятии управленческих решений для минимизации антропогенного воздействия на водные объекты, повышения эффективности водоохранной деятельности.

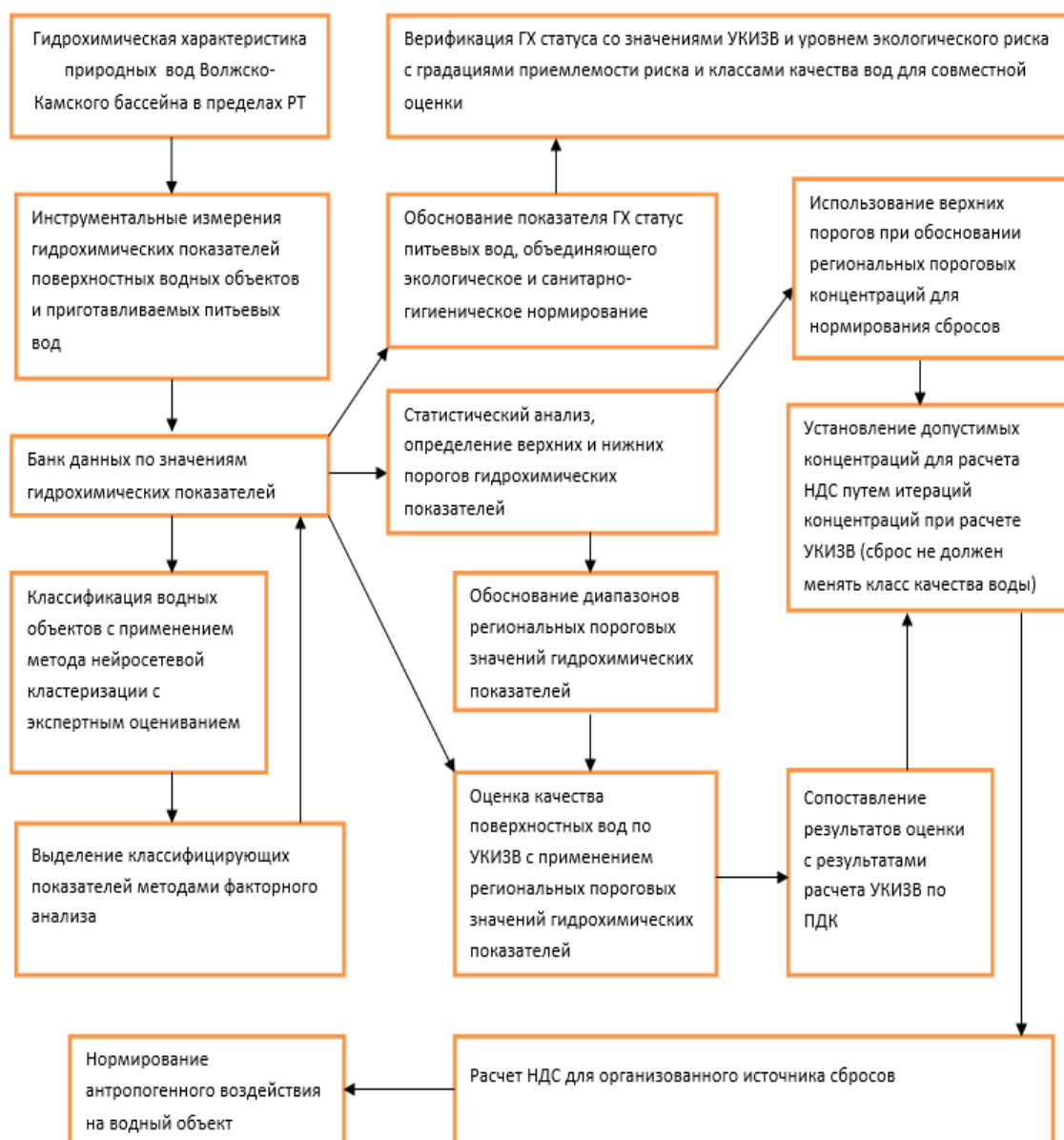


Рисунок 1 –Этапы разработки системы комплексных показателей и нормативов качества и воздействия для природных вод в урбоэкосистеме

Глава 3. Классификация поверхностных вод и определение региональных пороговых значений гидрохимических показателей

В третьей главе, на основе результатов экологического мониторинга водных объектов Республики Татарстан, обоснован подход к классификации поверхностных вод с определением региональных пороговых значений гидрохимических показателей путем многомерной нейросетевой кластеризации с нечеткими элементами и экспертным оцениванием. Было протестировано два подхода: прямая кластеризация без учета сезонности и последовательная кластеризация с учетом сезонности. При этом, имеющиеся наборы измеренных гидрохимических показателей различных водных объектов, относящихся к тому или иному водному бассейну, кластеризуются с использованием алгоритма на основе нейронных сетей Кохонена с последующей двумерной визуализацией SOM-картами. Предлагаемый способ включает три блока, графически представленный на рисунке 2.



Рисунок 2 – Структура дерева последовательной нейросетевой классификации гидрохимических показателей

Первый подход предполагает минимальное количество вычислений с достаточной точностью разделения на классы. Второй вычислительный блок представляет собой дерево последовательных кластеризующих алгоритмов на основе сетей Кохонена, осуществляющих углубленную детализацию группировок. Этот блок включает псевдонечеткое кодирование и проведение поэтапной многоуровневой кластеризации, что увеличивает время и сложность расчетов, но позволяет получить группировки повышенной точности с более тонким разделением на классы. Оценку степени детализации разбиения поверхностных водных объектов на классы дают специалисты – эксперты предметной области. Третий вычислительный блок является вспомогательным и осуществляет кодирование данных типа «дата-время» для адекватного расчета расстояний между кластеризуемыми векторами с учетом сезонности. В результате определяются классы вод с однородными, по мнению экспертов, значениями гидрохимических показателей и с необходимой степенью детализации.

Визуализация SOM-картами и факторный анализ позволяют сделать вывод об основных факторах (минерализация и соли жесткости), характеризующих общую изменчивость гидрохимического состава исследуемых поверхностных вод Волжско-Камского бассейна.

В результате проведенного факторного анализа были рассчитаны факторные нагрузки отдельных гидрохимических показателей: минерализация – 0,975; электропроводность – 0,975; кальций – 0,952; общая жесткость – 0,903; магний – 0,882; сульфаты – 0,857; гидрокарбонаты – 0,820; нитраты – 0,536; хлориды – 0,452; марганец – 0,405; ХПК – 0,342;

нитриты – 0,186; БПК₅ – 0,154; фосфат-ион – 0,132; железо – 0,126; фенол – 0,117; взвешенные вещества – 0,106; прозрачность – 0,088; цинк – 0,069; кислород – 0,052; нефтепродукты – 0,042; никель – 0,037; аммоний ион – 0,013; медь – 0,012.

Таким образом, значения минерализации, в том числе, показатели общей жесткости, содержания кальция, магния, сульфатов и гидрокарбонатов являются первичными критериями, а содержания хлоридов, нитратов и марганца – вторичными или вспомогательными критериями предлагаемой классификации вод. Выделенные критерии послужили основой для характеристики классов поверхностных вод.

Изучаемые поверхностные воды урбоэкосистемы принадлежат к гидрокарбонатным водам кальциевой группы. Отличия между ними заключаются в уровнях жесткости, минерализации, соотношении сульфатов и гидрокарбонатов, а также в содержании марганца, которые приняты в качестве классифицирующих показателей. Шесть установленных классов (I – VI) вод урбоэкосистемы, можно охарактеризовать следующим образом:

класс I: умеренной жесткости, умеренной минерализации, с повышенным содержанием ионов марганца и умеренным содержанием сульфатов;

класс II: умеренной жесткости, умеренной минерализации, с умеренным содержанием сульфатов и ионов марганца;

класс III: умеренной жесткости, слабоминерализованная, с умеренным содержанием сульфатов и ионов марганца;

класс IV: высокой жесткости, высокой минерализации, с повышенным содержанием сульфатов и ионов марганца;

класс V: высокой жесткости, высокой минерализации, с очень высоким содержанием сульфатов и ионов марганца;

класс VI: низкой жесткости, слабоминерализованная, с низким содержанием ионов марганца и сульфатов.

Выделенные классы поверхностных вод отражают, по совокупности показателей, разные гидрохимические условия формирования и функционирования водных объектов в пределах Волжско-Камского бассейна. По каждому классу вод был проведен статистический анализ распределений вариационных рядов показателей, оценены их медианы и квартильные размахи, что позволило выявить статистические диапазоны значений различных показателей. Значения нижнего и верхнего квартиля (25-75% распределения) использованы в качестве пороговых значений соответствующего показателя (таблица 1). Пороговые значения (пороговый размах) характеризует диапазон соответствия значений классифицирующего показателя тому или иному классу вод.

Как показала сравнительная оценка полученных диапазонов, наиболее важными, классифицирующими поверхностные водные объекты, показателями являются жесткость, минерализация, содержание сульфатов и ионов кальция. Содержание гидрокарбонатов, ионов магния и марганца также важны, но играют корректирующую роль – диапазоны пороговых значений разных классов вод у них во многих случаях пересекаются.

Таким образом, квартильные диапазоны являются пороговыми значениями классифицирующих показателей, что позволяет отнести произвольно взятый образец воды поверхностного водного объекта к тому или иному классу.

Отнесение к конкретному классу вод осуществлялось с помощью вероятностного отношения, учитывающего долю показателей образца, соответствующих заданным диапазонам: $P_k = n_k/N$, где n_k – число классифицирующих показателей образца, значения которых соответствуют квартильным диапазонам кластера k , N – общее число оцениваемых классифицирующих показателей.

Таблица 1– Пороговые значения ряда гидрохимических показателей, рассчитанные в пределах выделенных классов вод

Классифицирующие показатели	Класс I		Класс II		Класс III	
	Нижний порог	Верхний порог	Нижний порог	Верхний порог	Нижний порог	Верхний порог
Первичные						
Минерализация, мг/ дм ³	600,0	672,0	503,0	580,0	407,0	480,0
Кальций, мг/ дм ³	104,0	123,0	89,9	100,0	66,4	78,5
Жесткость, градусы	7,0	8,1	6,1	7,1	4,5	6,2
Магний, мг/ дм ³	20,2	28,8	14,3	26,1	13,6	23,9
Сульфаты, мг/ дм ³	97,0	151,0	13,5	108,5	15,1	88,0
Гидрокарбонаты, мг/ дм ³	309,0	363,0	291,0	388,5	184,0	327,0
Вторичные						
Нитраты, мг/ дм ³	1,5	9,6	1,66	4,76	0,7	5,8
Хлориды, мг/ дм ³	10,0	16,2	10,1	15,6	9,1	19,1
Марганец, мг/ дм ³	0,032	0,187	0,022	0,065	0,028	0,065
ХПК, мг/ дм ³	9,9	23,0	10,7	20,7	15,4	22,1
Классифицирующие показатели	Класс IV		Класс V		Класс VI	
	Нижний порог	Верхний порог	Нижний порог	Верхний порог	Нижний порог	Верхний порог
Первичные						
Минерализация, мг/ дм ³	750,0	910,0	1080,0	1410,0	113,5	283,0
Кальций, мг/ дм ³	137,0	172,0	209,0	266,0	18,7	49,0
Жесткость, градусы	9,0	11,5	13,8	17,2	1,2	3,2
Магний, мг/ дм ³	23,6	36,6	28,1	51,0	3,1	9,7
Сульфаты, мг/ дм ³	197,0	325,0	499,0	668,0	7,2	58,2
Гидрокарбонаты, мг/ дм ³	303,0	363,0	279,0	351,0	69,8	137,0
Вторичные						
Нитраты, мг/ дм ³	1,99	8,30	0,40	8,50	0,66	2,36
Хлориды, мг/ дм ³	13,7	19,2	17,9	23,7	5,30	13,4
Марганец, мг/ дм ³	0,030	0,138	0,027	0,215	0,009	0,030
ХПК, мг/ дм ³	8,60	18,5	9,60	24,1	13,8	30,9

Класс воды образца определяется по тому кластеру, значение P_k которого будет наибольшим. Разработана программа расчета для отнесения произвольной пробы воды поверхностного водного объекта к одному из установленных классов вод («Программа многоуровневой нейросетевой классификации гидрохимических данных с нечеткими элементами на основе экспертного оценивания»). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2024616050/ 15.03.2024).

Глава 4. Способ комплексной оценки загрязненности поверхностных вод с использованием удельного комбинаторного индекса загрязненности воды

В четвертой главе изложен модернизированный подход для расчета УКИЗВ с учетом региональных пороговых концентраций, дано обоснование показателя для комплексной оценки гидрохимического состава питьевых вод,готавливаемых из вод поверхностного водоисточника.

Расчет УКИЗВ проводился по обязательному перечню показателей, в соответствии с РД 52.24.643-2002, для каждого выделенного класса вод двумя способами: 1) с использованием для всех показателей в качестве порогов значений предельно допустимых

концентраций для водных объектов рыбохозяйственного назначения (ПДК_{р/х}); 2) с использованием установленных верхних порогов, названных региональными пороговыми концентрациями (РПК), рассчитанных по классифицирующим показателям и ПДК_{р/х} для всех остальных показателей. Анализ полученных результатов свидетельствует о том, что воды Волжско-Камского бассейна, вне зависимости от способа расчета УКИЗВ, относятся к классам «Очень загрязненная, 3б» и «Грязная, 4а». В таблице 2 представлены значения обобщенных индексов классифицирующих показателей, полученные с использованием ПДК_{р/х} и РПК для каждого класса поверхностных вод.

Таблица 2– Обобщенные индексы классифицирующих показателей поверхностных вод, рассчитанные для выделенных классов вод по ПДК_{р/х} и с использованием РПК

Показатели	Класс I		Класс II		Класс III	
	ПДК	РПК	ПДК	РПК	ПДК	РПК
Mn ²⁺	12,3	4,0	10,9	5,9	12	6,4
NO ₃ ⁻	0,0	3,4	0,0	4,2	0,0	3,9
SO ₄ ²⁻	5,6	2,9	4,0	3,3	0,0	2,8
ХПК	3,0	4,0	2,5	3,8	2,3	3,5
Cl ⁻	0,0	3,3	0,0	5,5	0	5,4
Показатели	Класс IV		Класс V		Класс VI	
	ПДК	РПК	ПДК	РПК	ПДК	РПК
Mn ²⁺	12,2	5,5	12,5	4,1	9,2	5,8
NO ₃ ⁻	0,0	3,5	0,0	3,5	0,0	5,1
SO ₄ ²⁻	8,3	3,1	9,7	2,8	0,0	3,4
ХПК	0,0	3,4	2,9	3,8	3,9	3,7
Cl ⁻	0,0	3,1	0,0	3,3	0,0	4,5

В связи с тем, что РПК являются верхними границами квартильных размахов природного содержания тех или иных веществ, то в случаях, когда вклад (обобщенный индекс) того или иного показателя в общую картину загрязненности возрастает при использовании РПК, это указывает на нехарактерное для природного распределения концентраций этих веществ состояние и наоборот. В частности, результаты оценки обобщенных индексов позволяют выделить марганец и сульфаты в качестве веществ двойного генезиса, имеющих в основном природное происхождение. Вклад таких показателей, как нитраты, хлориды и ХПК при использовании для расчета РПК, наоборот, возрастает, что может свидетельствовать о преимущественно антропогенном характере загрязнения. Следует подчеркнуть, что речь в данном случае, идет об оценках таких статистических распределений, которые характеризуют определенный, сложившийся в том или ином водном объекте гидрохимический состав, который в контексте нормирования привноса веществ в поверхностные воды можно считать «природным». И наоборот, «антропогенность» в данном случае является признаком резкого превышения концентраций этого сложившегося на участке состава.

Таким образом, классифицирующие показатели корректируют результаты оценки уровней загрязненности поверхностных вод, отражающие природно-антропогенные условия формирования их состава. Если анализировать значения УКИЗВ, полученные с

использованием РПК, в сравнении с индексами, рассчитанными с использованием только ПДК, то можно отметить, что показатели, завышающие УКИЗВ (содержание ионов марганца и сульфат-ионов) и занижающие его (содержание нитрат-ионов и хлорид-ионов) при использовании в расчете УКИЗВ значений РПК для разных классов вод, имеют сбалансированные веса (обобщенные индексы), что позволяет рассчитать более адекватные значения УКИЗВ, сохраняя общую характеристику классов качества (таблица 3).

Таблица 3 – УКИЗВ, рассчитанные для разных классов вод, по ПДК_{р/х} и с использованием установленных пороговых концентраций

Показатели		Класс качества	УКИЗВ	УКИЗВ с учетом КПЗ
Класс I	ПДК	Грязная 4а класс	4,8	5,3
	РПК	Грязная 4а класс	4,6	Нет КПЗ
Класс II	ПДК	Грязная 4а класс	4,1	4,5
	РПК	Грязная 4а класс	4,5	Нет КПЗ
Класс III	ПДК	Очень загрязненная 3б класс	3,6	3,9
	РПК	Грязная 4а класс	4,1	Нет КПЗ
Класс IV	ПДК	Грязная 4а класс	4,1	4,5
	РПК	Очень загрязненная 3б класс	4,0	Нет КПЗ
Класс V	ПДК	Грязная 4а класс	4,6	5,5
	РПК	Грязная 4а класс	4,1	Нет КПЗ
Класс VI	ПДК	Грязная 4а класс	4,0	4,8
	РПК	Грязная 4а класс	4,6	5,1

Согласно данным, представленным в таблице 3, УКИЗВ, рассчитанные с использованием ПДК_{р/х}, для всех классов вод имеют критические показатели загрязнения (КПЗ), обобщенные индексы которых ≥ 9 , тогда как при использовании РПК таких показателей практически нет. Предлагаемый способ расчета РПК для классифицирующих показателей предоставляет возможность оценивать уровни загрязненности для исследуемых водных объектов Волжско-Камского бассейна с учетом региональных особенностей, и дает возможность использовать предлагаемый способ в условиях динамики состава поверхностных вод.

Использование методологии расчета УКИЗВ, объединяющей в себе вероятностные и пороговые подходы к оценке качества природных вод, позволило предложить комплексный показатель для оценки гидрохимического состава питьевых вод, приготавливаемых из вод поверхностного водоисточника, названный нами гидрохимический статус (ГХ-статус) и предназначенный для обобщения экологических и санитарно-гигиенических подходов к оценке качества питьевых вод, как водного элемента урбоэкосистемы. Использование методологии расчета УКИЗВ позволяет учесть в ГХ-статусе как повторяемость случаев загрязненности, так и среднее значение кратности превышения порогов, а использование в качестве пороговых значений медиан масштабирует оценки с учетом региональных статистических распределений концентраций. Использованы при расчете УКИЗВ следующие гидрохимические показатели и медианы их концентраций в питьевых водах, мг/дм³: алюминий – 0,27; железо – 0,065; магний – 14,9; нитраты – 4,51; сульфаты – 61,3; медь – 0,006; фториды – 0,128; хлориды – 29,7; сухой остаток – 379,1; хлороформ – 0,061 и жесткость общая – 4,17 (градусы). Приведение значений ГХ-статуса к долям 1 осуществлялось разделением рассчитанных значений удельного комбинаторного индекса загрязненности воды ($S_{уд}$) на теоретически максимально возможное его значение, равное 16.

В результате были получены нормализованные значения $S_{уд}$ в диапазоне от 0,194 до 0,394. Такая характеристика оправдана не только при относительных оценках отдельных участков по общей территории, но и при сопоставлении различных проб воды, при обеспечении условия использования одного и того же набора оцениваемых гидрохимических показателей.

Для определения градаций рассчитанных значений ГХ-статуса и соответствующих им качественных характеристик состава питьевых вод, его значения приводились к единой шкале характеристик экологического риска (R).

Приведение к единой шкале характеристик качества возможно с использованием индекса качества. Индекс качества — это мера качества исследуемого водного объекта, выраженная через индикаторы и коррелирующая с мерой риска. Простой индекс качества (χ_j), согласно работе Музалевского и Карлина (2011), определяется следующим образом:

$$\chi_i = \frac{m_{ij}}{n_{ij}}, \#(1)$$

где n_{ij} — общее число признаков, оценивающих качество; m_{ij} — число признаков, не превышающих пороговую концентрацию. Экологический риск определяется в виде вероятностной меры уровня экологической опасности и магнитуды ущерба, которая пропорциональна отклонению от качества, при этом диапазоны риска и индекса качества находятся в одном и том же интервале (0–1) и измеряются в сопоставимых линейных шкалах: $R_j = 1 - \chi_j$.

Рассчитав уровни риска для тех же наборов наблюдений, по которым оценивался ГХ-статус, можно получить регрессионное отношение этих двух показателей (рисунок 3).

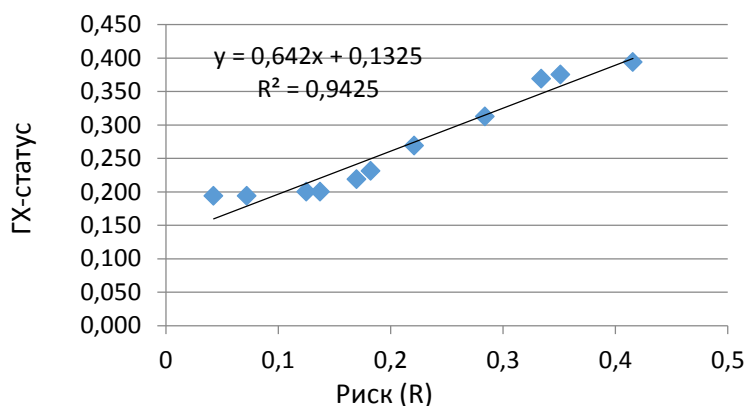


Рисунок 3 – Взаимосвязь показателей риска и ГХ-статуса, рассчитанных по одним и тем же наборам данных

Параллельно на тех же данных традиционным способом были определены классы качества питьевых вод. В таблице 4 представлены рассчитанные значения экологического риска, ГХ-статуса и УКИЗВ, а также соответствующие характеристики риска и классы качества по УКИЗВ. Значения ГХ-статуса для показателей риска 0,6–0,8 рассчитаны по регрессионному уравнению, указанному на рисунке 3.

Допустимые значения уровня экологического риска находятся в интервале 0–0,5, что соответствует значениям ГХ-статуса равным 0,45. При этом следует отметить, что эта граница практически совпадает с началом класса «Загрязненная» по шкале классов качества УКИЗВ.

Таблица 4 – Сопоставление показателей ГХ-статуса, УКИЗВ, экологического риска, их градаций и характеристик качества питьевых вод

ГХ-статус	Риск (R)	УКИЗВ	Характеристика риска	Класс качества по УКИЗВ
0,194	0,042	0,48	Фоновая зона	Условно чистая
0,194	0,072	0,68		
0,200	0,125	0,62	Вполне удовлетворительный	
0,200	0,137	0,63		
0,219	0,169	0,77		
0,231	0,182	0,71		
0,269	0,220	0,80	Удовлетворительный	
0,313	0,284	0,94		
0,369	0,334	1,48	Приемлемый	Слабо загрязненная
0,375	0,351	1,67		
0,394	0,415	1,64	Допустимый	
0,517*	0,600		Зона риска	Загрязненная
0,581	0,700		Опасный риск	
0,646	0,800		Критический риск	

Прим.: *курсивом выделены значения ГХ-статуса, рассчитанные по регрессионной модели

В целом, градации классов качества УКИЗВ являются растянутыми по диапазону качественных характеристик риска, однако, хорошо отражают границы зон приемлемости и неприемлемости риска, что позволяет сопоставлять и совместно оценивать все представленные показатели.

Глава 5. Методика расчета нормативов допустимого сброса сточных вод предприятия с учетом региональных особенностей водных объектов

В главе 5 обоснован метод расчета нормативов допустимого сброса загрязняющих веществ с учетом региональных особенностей водных объектов с апробацией для сточных вод предприятия химической отрасли промышленности. За основу расчёта НДС взята методика, утверждённая Приказом Минприроды России от 29.12.20 №1118. При расчёте допустимой концентрации i -го вещества в сточных водах ($C_{НДСi}$) мы предлагаем использовать верхний порог значений ряда гидрохимических показателей (верхний квартиль) – базовый РПК. Использование РПК позволяет учесть региональные особенности содержания в поверхностных водах веществ двойного генезиса, например, ионов аммония, фенола, сульфатов, хлоридов, фосфатов. Расчет УКИЗВ и класса качества воды произведен по обязательному перечню (Приложение В РД 52.24.643-2002).

Предложено проводить расчёт допустимых концентраций веществ в сточных водах по формуле:

$$C_{НДС} = N \cdot (РПК_i - C_{CP_i}) + C_{CP_i}, \#(2)$$

где $РПК_i$ – региональная пороговая концентрация i -го вещества; C_{CP_i} – фоновое (медианное) значение концентраций (так как распределение концентраций большей части гидрохимических показателей не соответствовало нормальному, использована медиана); N – кратность общего разбавления сточных вод в водном объекте, равная произведению кратности начального разбавления на кратность основного разбавления.

При расчёте $C_{НДС}$ по предлагаемому подходу, значения допустимых концентраций веществ для НДС должны соответствовать уровням, обеспечивающим после сброса сохранение класса качества вод, определенного до их сброса.

Для учета природно-антропогенных особенностей формирования составов поверхностных вод расчет $S_{уд}$ предлагается проводить также с использованием верхних квартильных порогов значений гидрохимических показателей (базовый РПК) (таблица 1). Далее используя пошаговую итерацию, концентрации каждого компонента сбросов увеличиваются на 10% с параллельным расчётом УКИЗВ. Величина 10% получена опытным путём, шаг в 10% от стартовой концентрации оказался наиболее оптимальным. Расчет следует повторять до получения таких концентраций, которые дают переход воды из одного класса качества (по показателю УКИЗВ) в другой класс качества воды. При расчете меняются концентрации только веществ, присутствующих в сбросах. Предлагаемые подходы позволили разработать методику расчета допустимых концентраций в сточных водах. Этапы предлагаемой методики следующие:

1. Нахождение базовых значений РПК в соответствии с предложенным подходом;
2. Определение медианного значения концентраций по многолетним данным гидрохимических наблюдений;
3. Проведение расчёта значения УКИЗВ и определение класса качества воды по обязательному перечню веществ с добавлением к нему показателей, присутствующих в нормируемом сбросе сточных вод, если они отсутствуют в обязательном перечне;
4. Циклическая итерация значений РПК на 10% с пошаговым вычислением величин УКИЗВ. Цикл осуществляется до тех пор, пока получаемый в результате расчёта УКИЗВ класс качества воды сохраняется в пределах исходного. Цикл прекращается при переходе индекса на другой класс качества. Необходимо изменять концентрации только тех веществ, которые содержатся в составе сточных вод;
5. Фиксация полученных концентраций веществ в виде предельных значений $РПК_i$ и использование их вместо ПДК;
6. Расчёт допустимых значений концентраций $C_{ндс}$ на основе $РПК_i$, полученных на предыдущем этапе;
7. Расчёт значения НДС с использованием полученной допустимой концентрации для каждого вещества в составе сточных вод.

Предлагаемая методика была апробирована на сточных водах ОАО «Казанский завод синтетического каучука». Водоотведение стоков первой группы осуществляется в р. Волга. Выбор объекта связан с тем, что этот участок р. Волги расположен в районе сбросов сточных вод разного состава, в результате чего на этом участке сформирован определенный гидрохимический фон. Максимально близко к месту водоотведения расположен пункт контроля качества природных вод р. Волга, 4.7 км ниже г. Казани. При дальнейших расчетах НДС применяли данные о гидрохимическом составе поверхностных вод, полученные на этом пункте. В результате реализованных итераций были получены результаты, представленные в таблице 5.

В данном случае искомое значение $S_{уд}$ равняется 4, что и требовалось получить, так как класс качества воды при $S_{уд} > 4$ переходит от класса «загрязненная 3а» к «грязная 4а», то есть это порог, выше которого концентрации для расчета НДС повышать нельзя. Отметим, что по целому ряду сбрасываемых веществ (АПВ, формальдегид, сульфиды, хлориды, нитраты) превышений $ПДК_{р/х}$ за весь период наблюдения не было отмечено, поэтому значения $S_{об}$ этих веществ равно 0. В этом случае в качестве пороговых предлагаем использовать значения $ПДК_{р/х}$ этих веществ. Далее необходимо рассчитать пороговые значения, как средневзвешенные значения оцениваемых рядов концентраций гидрохимических показателей, полученных после всех итераций на предыдущем этапе.

Таблица 5–Результаты расчета УКИЗВ с использованием итераций

Параметры УКИЗВ	α	β	S_{α}	S_{β}	$S_{об}$
NH_4^+	85,7	1,8	4,0	1,8	7,2
БПК ₅	66,7	2,4	4,0	2,0	8,0
Fe общ.	33,3	1,8	3,2	1,8	5,8
Кислород раствор.	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Mn^{2+}	76,2	3,3	4,0	2,2	8,8
Cu^{2+}	57,1	1,8	4,0	1,8	7,2
Нефтепродукты	4,8	1,5	1,4	1,5	2,1
Ni^{2+}	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
NO_3^-	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
NO_2^-	81,0	2,0	4,0	2,0	8,0
SO_4^{2-}	66,7	1,3	4,0	1,3	5,2
Фенол	57,1	3,3	4,0	2,2	8,8
ХПК	23,8	1,2	2,7	1,2	3,2
Cl^-	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Zn^{2+}	14,3	2,5	2,2	2,1	4,6
PO_4^{3-} (в пересчете на фосфор)	100,0	2,7	4,0	2,1	8,4
АПАВ	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
CH_2O	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
S^{2-}	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
$S_{комб}$					76,9
$S_{уд}$					4,0

В таблице 6 представлены РПК, значения допустимых к отведению со сточными водами концентраций и результаты расчета НДС по предлагаемой методике в сравнении с действующими значениями НДС. Из данных таблицы видно, что обоснованные нами РПК, имеют более жесткое значение по сравнению с ПДК_{р/х} по нефтепродуктам. По веществам биогенного происхождения (нитритам, фосфору, ионам аммония и БПК₅) обоснованные РПК незначительно выше ПДК_{р/х}. Полученные с использованием предлагаемой методики результаты расчета НДС предъявляют более жесткие требования к величине НДС для веществ, преимущественно антропогенного поступления (нефтепродукты). Для сульфатов, сульфидов и хлоридов (гидрохимические показатели двойного генезиса) величина НДС, обоснованная по предлагаемой методике, выше величины НДС, обоснованной по действующей методике, что объясняется природными особенностями водного объекта. Для веществ – биогенов двойного генезиса (фосфаты, ионы аммония, нитриты) величина НДС, определенная по предлагаемой методике, незначительно выше величины НДС, обоснованной с применением действующей методики, что также объясняется природно-антропогенными особенностями водного объекта. Однако, в условиях усиленной эвтрофикации водного объекта – приемника сточных вод, который является источником питьевого водоснабжения, целесообразно устанавливать более жесткие нормативы НДС (т.е.

применять ПДК_{р/х}), при этом, необходимо разрабатывать более обоснованные программы по снижению содержания биогенов в водных объектах, с учетом многообразия источников привноса биогенов в р. Волга. В наших исследованиях отличия величин НДС, обоснованных с применением действующей методики и НДС, обоснованных с применением экспериментальной методики, по веществам, в отношении которых РПК и ПДК совпали, связаны с применением обоснованных нами фоновых концентраций, что так же позволяет учесть природно-антропогенные особенности объектов. Так, НДС хлоридов, сульфида, менее жесткие по сравнению с НДС_{дейст.} НДС_{эксп} для АПАВ, формальдегида более жесткие за счет обоснованного нами фона.

Таблица 6—Значения предельных региональных пороговых концентраций (РПК_i), медианные значения (C_{СРi}) концентраций, НДС_{дейст.} и НДС_{эксп}

Показатели	РПК, мг/дм ³	C _{СРi} , мг/дм ³	НДС _{дейст.} кг/ч	НДС _{эксп.} кг/ч
NH ₄ ⁺	0,55	0,39	0,79	0,89
NO ₃ ⁻	40	1,6	64,2	63,1
NO ₂ ⁻	0,11	0,05	0,14	0,16
PO ₄ ³⁻	0,34	0,26	0,41	0,54
БПК ₅	2,5	1,35	3,2	3,9
Нефтепродукты	0,006	0,003	0,079	0,009
SO ₄ ²⁻	115	55	159,3	182,4
Cl ⁻	300	11	440,2	472,9
АПАВ	0,5	0,005	0,81	0,77
CH ₂ O	0,1	0,001	0,17	0,15
S ²⁻	0,005	0,0001	0,007	0,008

В целом, применение предлагаемой методики обоснования НДС позволит снизить антропогенное воздействие на водный объект за счет применения более жестких нормативов допустимого сброса в отношении нефтепродуктов, АПАВ, формальдегида, предъявлять более обоснованные с точки зрения природно-антропогенных особенностей водного объекта требования к водопользователям, и обосновывать более эффективные водоохранные решения, особенно в части веществ двойного генезиса.

Заключение

1. Разработан способ классификации поверхностных вод (на примере рек Волжско-Камского бассейна в пределах Республики Татарстан) по гидрохимическим показателям методом нейросетевой кластеризации данных с нечеткими элементами на основе экспертного оценивания, отражающая природно-антропогенные особенности формирования химического состава поверхностных вод. Методами нейросетевого и факторного анализа установлены классифицирующие показатели, играющие ведущую роль (минерализация, общая жесткость, ионы кальция, магния, сульфаты, гидрокарбонаты) и вспомогательную роль (хлориды, нитраты, ионы марганца и ХПК) при классификации водных объектов. Установлены диапазоны значений региональных пороговых концентраций, положенные в основу выделения шести классов вод

2. Модернизирован способ расчета УКИЗВ с использованием значений региональных пороговых концентраций для веществ двойного генезиса, позволяющий устранить завышение или занижение его значений, сохраняя общую характеристику классов качества поверхностных вод.

3. Впервые предложен комплексный показатель гидрохимический статус (ГХ-статус) питьевых вод, разработанный для обобщения экологических и санитарно-гигиенических подходов к оценке гидрохимического состава питьевых вод, приготавливаемых из вод поверхностного источника водоснабжения. Показатель взаимосвязан с градациями приемлемости риска и классами качества вод, с определением интервала перехода от приемлемого уровня загрязненности к опасному, что позволяет совместно оценивать все указанные показатели.

4. Разработана методика расчета региональных нормативов допустимых сбросов (НДС) загрязняющих веществ в водные объекты, с условием сохранения класса качества вод поверхностного водоисточника, определенного до их сброса. Апробация методики расчета нормативов НДС для предприятия химической отрасли промышленности ОАО «Казанский завод синтетического каучука», определила более мягкие требования к сбросу некоторых веществ двойного генезиса (сульфаты, хлориды, сульфиды) с учетом природных особенностей водного объекта и более жесткие требования к величине НДС для веществ преимущественно антропогенного поступления (нефтепродукты, АПАВ, формальдегид).

Перспективы разработки темы диссертационного исследования обширны. Это обусловлено необходимостью цифровизации отрасли водопользования, позволяющей оперативно оценивать состояния водных объектов с учетом их региональных особенностей, определять допустимую степень антропогенного воздействия. Предложенный алгоритм классификации может быть применен к другим поверхностным водным объектам в пределах одного речного бассейна. Введение региональных нормативов качества вод водных объектов требует пересмотра критериев введения режима ЧС экологического характера с учетом их природной специфики. Необходимо дальнейшее развитие системы нормирования антропогенного воздействия с учетом динамики содержания загрязняющих веществ и наличия неорганизованных источников воздействия на водные объекты. В перспективе возможно использование полученных результатов исследования для разработки цифровых карт местности, отражающих пространственную неоднородность гидрохимических показателей поверхностных вод. Данные диссертационного исследования могут быть использованы для развития подходов в области оценки экологического риска.

Список работ по материалам диссертации

Статьи в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК Минобрнауки России по специальности 1.5.15. Экология (химические науки)

1. Тунакова, Ю.А. Методология определения региональных пороговых концентраций для расчёта нормативов допустимого сброса жидких производственных отходов в поверхностные воды / Ю.А.Тунакова, С.В. Новикова, **Е.В. Байбакова**, В.С. Валиев // Теоретическая и прикладная экология. – 2021. – №4. – С.28-33. Doi:10/25750/1995-4301-2021-4-028-033 (**K1, WoS, Scopus, Q3**).

2. Тунакова, Ю.А. Развитие методики расчёта нормативов допустимого сброса жидких производственных отходов с учётом региональных особенностей водных объектов / Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, В.С. Валиев, **Е.В. Байбакова** // Теоретическая и прикладная экология. – 2023. – №4. – С.70-77. Doi: 10.25750/1995-4301-2023-4-070- 077 (**K1, WoS, Scopus, Q3**).

3. Тунакова, Ю.А. Учет природно-антропогенных особенностей распределения гидрохимических показателей при расчете удельного комбинаторного индекса загрязненности поверхностных вод / Ю.А. Тунакова, В.С. Валиев, **Е.В. Байбакова** // Российский журнал прикладной экологии. – 2024. – №1. – С. 52-58 (**K3**).

Статьи в научных журналах, входящих в международные базы данных и системы цитирования

4. Tunakova, Y. The Use of Neural Network Modeling Methods to Determine Regional Threshold Values of Hydrochemical Indicators in the Environmental Monitoring System of Waterbodies / Y. Tunakova, S. Novikova, V. Valiev, **E. Baibakova**, K. Novikova // Sensors. – 2023. – 23 (13). 6160. – Pp.2-15. <https://doi.org/10.3390/s23136160> (**WoS, Scopus, Q1**).

Свидетельства

5. Программа многоуровневой нейросетевой классификации гидрохимических данных с нечеткими элементами на основе экспертного оценивания / А. с. № 2024616050. Рос. Федерация / С. В Новикова, Ю. А. Тунакова, В. С. Валиев, **Е. В. Байбакова**; опубл.15.03.2024.

Статьи в других рецензируемых научных изданиях перечня ВАК Минобрнауки России

6. Тунакова Ю.А. Использование метода нейросетевой кластеризации для выделения значимых показателей, характеризующих состояние поверхностных водных объектов в РТ / Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, В.С. Валиев, **Е.В. Байбакова** // Вестник технологического университета. – 2023. – Т.26, №3. – С.72-78. Doi:10.55421/1998-7072_2023_26_3_72.

Статьи в сборниках материалов тезисов Международных и Всероссийских конференций

7. **Байбакова, Е.В.** Сравнительный анализ подходов к регулированию антропогенной нагрузки на водные экосистемы / Е.В. Байбакова, Ю.А. Тунакова, В.С. Валиев // Сборник трудов международной научной конференции (школа молодых ученых) «Химия и инженерная экология - XX». – Казань, 2020. – С. 334-338.

8. **Байбакова, Е.В.** Применение нейронных сетей для обоснования экологических нормативов / Е.В. Байбакова // Сборник трудов 63 Всероссийской научной конференции МФТИ «Прикладная математика и информатика». – Москва, 2020. – С.173-175.

9. **Байбакова, Е.В.** Подходы для разработки региональных нормативов для природных вод на основе современных математических методов многофакторного анализа/ Е.В. Байбакова, Ю.А.Тунакова, В.С. Валиев // Сборник трудов Всероссийской научной конференции с международным участием молодых ученых и специалистов «Инновационные технологии защиты окружающей среды в современном мире». – Казань, 2021. – С.1137-1142.

10. **Байбакова, Е.В.** Сравнительный анализ комбинаторного индекса загрязнения воды, вычисленных по ПДК и фоновым показателям / Е.В. Байбакова, Ю.А. Тунакова, В.С. Валиев // Сборник трудов III международной научно-технической интернет конференции «Защита окружающей среды от экотоксикантов: международный опыт и российская практика». – Уфа, 2021. – С.22-26.

11. Тунакова, Ю.А. Результаты комплексной оценки уровня загрязнения поверхностных вод на территории РТ / Ю.А. Тунакова, **Е.В. Байбакова**, В.С. Валиев // Сборник трудов международной научной конференции «Химия и инженерная экология – XXI». – Казань, 2021. – С.174-177.

12. Хлыщенко, Ю.И. Комплексная оценка загрязненности воды реки Сулица / Ю.И. Хлыщенко, **Е.В. Байбакова**, В.С. Валиев // Сборник трудов Международной молодежной научной конференции «XXV Туполевские чтения (школа молодых ученых)». – Казань, 2021.– С.383-389.

13. Слесарева, К.В., Комплексная оценка загрязненности воды реки Кама/ К.В. Слесарева, **Е.В. Байбакова**, В.С. Валиев // Сборник трудов Международной молодежной научной конференции «XXV Туполевские чтения (школа молодых ученых)». – Казань, 2021. – С.179-183.

14. Осипова, И.В. Комплексная оценка загрязненности воды реки Казанка/ И.В. Осипова, **Е.В. Байбакова**, В.С. Валиев // Сборник трудов Международной молодежной научной конференции «XXV Туполевские чтения (школа молодых ученых)». – Казань, 2021. – С.96-99.
15. Фаткузаманов, А.Р. Комплексная оценка загрязненности участков реки Волга, расположенных ниже г. Казань / А.Р. Фаткузаманов, **Е.В. Байбакова**, В.С. Валиев // Сборник трудов Международной молодежной научной конференции «XXV Туполевские чтения (школа молодых ученых)». – Казань, 2021. – С.234-239.
16. Кашина, С.К. Комплексная оценка загрязненности верхних участков реки Волга / С.К. Кашина, **Е.В. Байбакова**, В.С. Валиев // Сборник трудов Международной молодежной научной конференции «XXV Туполевские чтения (школа молодых ученых)». – Казань, 2021. – С.572-575.
17. Тунакова, Ю.А. Результаты типизации поверхностных вод на территории Республики Татарстан по значениям гидрохимических показателей / Ю.А. Тунакова, В.С. Валиев, **Е.В. Байбакова** // Сборник трудов международной научной конференции Химия и инженерная экология -XXII (школа молодых ученых). –Казань, 2022. – С. 345-349.
18. Тунакова Ю.А. Интегральная оценка состояния поверхностных вод на основе нейросетевой модели кластеризации / Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, В.С. Валиев, **Е.В. Байбакова**, К.Н. Новикова // Сборник трудов международной научной конференции Химия и инженерная экология – XXII (школа молодых ученых). – Казань, 2022. – С.350-354.
19. Тунакова, Ю.А. Подход для расчета региональных нормативов качества и воздействия для рек республики Татарстан / Ю.А. Тунакова, **Е.В. Байбакова**, В.С. Валиев // Материалы национальной научно-практической конференции студентов, аспирантов, молодых ученых и специалистов «Актуальные проблемы экологии и природопользования». – Санкт-Петербург, 2022. – С.99-101.
20. **Байбакова, Е.В.** Факторы, влияющие на качество поверхностных вод в водных объектах, являющихся приемником сточных вод / **Е.В. Байбакова** // Материалы 12-ой Международной научно-практической конференции студентов и аспирантов «Казанские научные чтения студентов и аспирантов». – Казань, 2023 – С.156-157.
21. Тунакова, Ю.А. Учет природно-антропогенных особенностей поверхностных вод для интегральной оценки уровня их загрязненности / Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, В.С. Валиев, **Е.В. Байбакова** // Сборник докладов Всероссийской научной конференции «Безопасность, защита и охрана окружающей природной среды: фундаментальные и прикладные исследования». – Белгород, 2023 – С.64-69.
22. Тунакова, Ю.А. Результаты апробации усовершенствованной методики расчета нормативов допустимого сброса в поверхностные воды загрязняющих веществ двойного генезиса (на примере фосфатов) от организованного источника/ Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, В.С. Валиев, **Е.В. Байбакова** // Сборник докладов Всероссийской научной конференции «Безопасность, защита и охрана окружающей природной среды: фундаментальные и прикладные исследования». – Белгород, 2023 – С.272-276.
23. Тунакова, Ю.А. Результаты апробации подхода для расчета нормативов допустимого сброса загрязняющих веществ преимущественно антропогенного происхождения от организованного источника в поверхностные воды / Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, В.С. Валиев, **Е.В. Байбакова** // Сборник трудов международной научной конференции «Химия и инженерная экология – XXII»: (школа молодых ученых). – Казань, 2023. – С.172-175.