

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ»

Институт проблем экологии и недропользования (обособленное подразделение Государственного научного бюджетного учреждения «Академия наук Республики Татарстан»)

На правах рукописи



НУРМЕХАМИТОВА ВИОЛЕТТА АЛМАЗОВНА

**СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА  
ХИМИЧЕСКОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА  
УРБООЭКОСИСТЕМЫ С ПРИМЕНЕНИЕМ ХЕМОМЕТРИКИ**

1.5.15. Экология

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата химических наук

Научный руководитель:

доктор химических наук, доцент,  
Шагидуллина Раиса Абдулловна

Казань – 2026

## Оглавление

|                                                                                                                        |    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Введение.....                                                                                                          | 5  |
| Глава 1. Обзор литературы.....                                                                                         | 15 |
| 1.1 Влияние уровня загрязненности атмосферного воздуха на состояние сопредельных компонентов урбоэкосистемы .....      | 15 |
| 1.2 Действующая система экологического мониторинга качества атмосферного воздуха.....                                  | 17 |
| 1.3 Характеристика системы экологического мониторинга качества атмосферного воздуха на территории г. Казани .....      | 23 |
| 1.4 Производственный экологический контроль в системе мониторинга качества атмосферного воздуха.....                   | 30 |
| 1.5 Используемые расчетные методы при реализации экологического мониторинга качества атмосферного воздуха .....        | 32 |
| 1.6 Преимущества хеометрических подходов при реализации экологического мониторинга качества атмосферного воздуха ..... | 38 |
| 1.7 Нейросетевые методы и модели для экологического мониторинга качества атмосферного воздуха.....                     | 42 |
| 1.8 Учет залповых выбросов при работе стационарных источников .....                                                    | 46 |
| 1.9 Оценка поступления парниковых газов расчетным путем .....                                                          | 48 |
| 1.10 Хеометрический подход для оценки концентраций парникового газа диоксида углерода.....                             | 52 |
| 1.11 Учет вторичных химических реакций в атмосферном воздухе .....                                                     | 54 |
| 1.12 Заключение по главе 1 .....                                                                                       | 55 |
| Глава 2. Материалы и методы исследования .....                                                                         | 57 |
| 2.1 Характеристика системы автоматизированных станций контроля загрязнения атмосферного воздуха г. Казань .....        | 57 |
| 2.2 Методы оценки показателей качества атмосферного воздуха .....                                                      | 58 |
| 2.3 Методическое и программное обеспечение проведения расчетов рассеивания загрязняющих веществ .....                  | 59 |

|                                                                                                                                                                                                        |     |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 2.4 Хемометрические и статистические методы обработки данных для решения задач экологического мониторинга.....                                                                                         | 60  |
| 2.5 Методы оценки риска здоровью населения .....                                                                                                                                                       | 67  |
| 2.6 Определение показателей залповых выбросов .....                                                                                                                                                    | 72  |
| 2.7 Заключение по главе 2 .....                                                                                                                                                                        | 72  |
| Глава 3. Результаты инструментального мониторинга качества атмосферного воздуха г. Казань .....                                                                                                        | 74  |
| 3.1 Характеристика качества атмосферного воздуха на территории г. Казани в ретроспективе лет по данным автоматизированных станций наблюдений.....                                                      | 74  |
| 3.2 Выявление значимых факторов, формирующих уровни загрязнения приземного слоя атмосферного воздуха на территории исследуемой урбоэкосистемы.....                                                     | 79  |
| 3.3 Заключение по главе 3 .....                                                                                                                                                                        | 85  |
| Глава 4. Методика формирования программы производственного экологического контроля .....                                                                                                               | 87  |
| 4.1 Методические подходы к формированию программы производственного экологического контроля состояния атмосферного воздуха.....                                                                        | 87  |
| 4.2 Результаты применения предложенных методических подходов к формированию программы производственного экологического контроля состояния атмосферного воздуха для предприятия химической отрасли..... | 97  |
| 4.3 Нейросетевая модель для расчета среднесуточных концентраций оксидов азота.....                                                                                                                     | 105 |
| 4.4 Заключение по главе 4 .....                                                                                                                                                                        | 111 |
| Глава 5. Подходы для учета залповых выбросов при работе стационарных источников .....                                                                                                                  | 112 |
| 5.1 Значимость и способы учета залповых выбросов .....                                                                                                                                                 | 112 |
| 5.2 Пример учета залповых выбросов для выбросов предприятия химической отрасли.....                                                                                                                    | 117 |
| 5.3 Моделирование загрязнения атмосферного воздуха в условиях отсутствия данных о режимах работы источников выбросов.....                                                                              | 122 |
| 5.4 Заключение по главе 5 .....                                                                                                                                                                        | 145 |
| Глава 6. Расчет концентраций парникового газа диоксида углерода.....                                                                                                                                   | 147 |

|                                                                                                                         |     |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 6.1 Методическое обоснование способа расчета .....                                                                      | 147 |
| 6.2 Применение предложенного способа расчета концентраций диоксида углерода<br>для предприятия химической отрасли ..... | 149 |
| 6.3 Заключение по главе 6 .....                                                                                         | 155 |
| Заключение .....                                                                                                        | 156 |
| Список сокращений и условных обозначений .....                                                                          | 159 |
| Список литературы .....                                                                                                 | 163 |
| Приложение А .....                                                                                                      | 197 |
| Приложение Б .....                                                                                                      | 198 |
| Приложение В .....                                                                                                      | 199 |
| Приложение Г .....                                                                                                      | 200 |
| Приложение Д .....                                                                                                      | 202 |

## Введение

**Актуальность темы исследования.** Атмосферный воздух является главным фактором формирования экологической ситуации и связующим звеном, через которое загрязняющие вещества мигрируют и воздействуют на все остальные элементы урбоэкосистемы. Урбоэкосистема, формирующаяся на территории г. Казани, характеризуется высокой антропогенной нагрузкой на атмосферный воздух, особенно в тех районах, где сосредоточены основные источники выбросов. Пространственно-временная неоднородность химического состава приземного слоя атмосферного воздуха требует учета природно-климатических и градостроительных условий рассеивания выбросов при организации системного экологического мониторинга качества атмосферного воздуха.

В настоящее время, в действующей системе инструментального экологического мониторинга качества атмосферного воздуха на территории г. Казани существуют значительные пространственно-временные, количественные и качественные ограничения. Инструментальные наблюдения, основанные на сети стационарных станций, дополнены расчетными методами, основным преимуществом которых является их относительно низкая стоимость и высокая скорость получения результатов по сравнению с развертыванием сети стационарных станций наблюдений. Однако применяемые в настоящее время модели рассеивания требуют введения многочисленных эмпирических поправочных коэффициентов для повышения качества моделирования, либо требуют учета большого количества входных параметров, что приводит к существенному увеличению трудоемкости и вычислительной сложности расчетов. Ключевые ограничения действующей системы государственного экологического мониторинга могут быть преодолены за счет использования и интеграции хемометрических методов исследования.

Хемометрические методы исследования позволяют получить достоверную пространственно-временную картину распределения загрязняющих веществ, что особенно важно для решения задач прогнозирования и управления качеством

атмосферного воздуха, а также оптимизировать структуру самих сетей инструментального мониторинга, повышая их репрезентативность. Актуальность хеометрических методик заключается в возможности проведения корректного анализа текущей, ретроспективной и прогнозной информации и обеспечения решения задач риск-ориентированных технологий управления качеством атмосферного воздуха. Внедрение хеометрических методик в практику экологического мониторинга позволит перейти к системе «интеллектуального» мониторинга, способной выдавать рекомендации по управлению воздействием на приземный слой атмосферного воздуха, которая обеспечит экологическую безопасность на территориях, подвергающихся влиянию промышленных объектов. Указ Президента Российской Федерации от 7 мая 2024 г. № 309 «О национальных целях развития Российской Федерации на период до 2030 года и на перспективу до 2036 года» подчеркивает важность достижения экологического благополучия как одной из национальных целей, что свидетельствует о необходимости минимизации антропогенного воздействия на живую природу.

**Степень разработанности темы.** Формирование приземных концентраций примесей в зоне влияния стационарных источников выбросов описано в работах Израэля Ю.А., Безуглой Э.Ю., Гениховича Е.Л., Оникула Р.И., Марчука Г.И., Белолипецкого В.М. и др., но разработанные ими теоретические или полуэмпирические модели являются детерминированными и, как следствие, содержат недостаточное количество значимых параметров и имеют невысокую точность.

В последние десятилетия для повышения точности прогнозов активно применяются нейросетевые и гибридные подходы. Можно отметить значимые работы в этом направлении авторов: Karul C., Soypak S., Cilesiz A.F., Germen E.; Круглов В.В., Борисов В.В., С. Осовский, Zade L.A., Звягин Л.С., Castro J., Емалетдинова Л.Ю. и др. В последние годы появились более сложные модели, разработанные Борисовым Д.В., Кузнецовым И.Н.; Fornasaro S., Astel A., Barbieri P., Licen S.; Kohila C. и др., а также подходы «машинного образования» для построения карт загрязнения территорий диоксидом азота и взвешенными

веществами, разработанные Geltman A., Levy I., Fishbain B. Тем не менее, перечисленные современные работы применяют только классические методы для обработки данных, не предлагают хеометрические способы для обработки мониторинговой информации по качеству атмосферного воздуха. Таким образом, предложенные нами хеометрические подходы восполняют существующие пробелы.

**Целью работы** является создание хеометрических методик для совершенствования экологического мониторинга загрязнения атмосферного воздуха, обеспечивающих минимизацию антропогенного воздействия предприятий химической отрасли промышленности на урбоэкосистемы.

**Задачи, решаемые в работе:**

1. Оценить уровень загрязненности приземного слоя атмосферного воздуха и выделить факторы, приводящие к повышению приземных концентраций компонентов выбросов на территории урбоэкосистемы.

2. Создать методику разработки программы производственного экологического контроля качества атмосферного воздуха, в условиях методических ограничений, для минимизации антропогенного воздействия предприятия химической отрасли на урбоэкосистему.

3. Разработать нейросетевую модель для прогноза среднесуточных концентраций оксидов азота при наиболее неблагоприятных метеорологических условиях.

4. Усовершенствовать нормативную базу путем идентификации и учета залповых выбросов для снижения химического загрязнения атмосферного воздуха территорий (на примере предприятия химической отрасли).

5. Создать методику оперативного прогноза роста концентраций диоксида азота на основе кластеризации данных с дальнейшим применением искусственных нейронных сетей.

6. Разработать способ расчета концентраций парникового газа диоксида углерода с использованием нейросетевого каскадного моделирования.

**Научная новизна** заключается в следующем:

1. На основе ретроспективного анализа данных мониторинга выявлены загрязняющие вещества, приоритетные в настоящее время для контроля на территории г. Казани, и метеорологические условия формирования наиболее высоких уровней загрязнения. Часто фиксируются превышения максимальных разовых предельно допустимых концентраций (ПДК) для оксида азота (до 10,5 ПДК), диоксида азота (до 3,5 ПДК), оксида углерода (до 18,4 ПДК), сероводорода (до 17,6 ПДК), аммиака (до 7,5 ПДК). Превышения среднегодовых ПДК отмечены преимущественно для диоксида азота (до 1,8 ПДК). Доказано, что при формировании приземных концентраций, наряду с режимом работы источников выбросов, значимую роль играют вторичные химические реакции примесей в атмосфере с трансформацией в новые продукты, что обосновывает включение дополнительных предикторов (гамма-фон, озон, коэффициент трансформации) в нейросетевые модели для повышения их адекватности.

2. Впервые разработаны методики оперативной оценки и прогнозирования уровней загрязнения атмосферного воздуха на основе хемометрических подходов (на примере предприятия химической отрасли г. Казани). Предложен метод оперативного прогноза концентраций диоксида азота на основе кластеризации данных совместно с применением искусственных нейронных сетей, учитывающий особенности формирования приземных концентраций при увеличении мощности эмиссии данного вещества. Среднее значение коэффициента детерминации гибридной модели превысило  $R^2 = 0,75$ , что более чем в три раза выше точности базовой модели, использующей только метеорологические параметры. В условиях отсутствия данных о параметрах источников выбросов разработан способ нейросетевого расчета приземных концентраций парникового газа диоксида углерода на основе параметров, характеризующих вторичные химические реакции в атмосфере. Средняя погрешность модели по всему набору данных составила 0,9 %.

3. Впервые сформулировано определение термина «залповые выбросы» и предложены подходы для их учета, что позволит минимизировать антропогенное воздействие на качество атмосферного воздуха урбоэкосистемы. Установлено, что

максимальные значения приземных концентраций диоксида азота, углерода, оксида углерода и сопутствующих суммаций, рассчитанные с учетом пиковых нагрузок во время залповых выбросов предприятий химической отрасли, на 1-2 порядка превышают соответствующие значения при штатном режиме их работы. Это указывает на высокую вероятность превышения значений показателей качества атмосферного воздуха и подтверждает необходимость обязательного учета залповых выбросов в процедурах инвентаризации и нормирования воздействия на окружающую среду.

4. Разработаны теоретические обоснования для формирования программ производственного экологического контроля в области охраны атмосферного воздуха, которые опробованы на примере предприятия химической отрасли г. Казани, отличающиеся от требований действующей нормативной базы применением предложенных хеометрических методик, для повышения точности и информативности прогнозов уровней химического загрязнения атмосферного воздуха.

**Теоретическая и практическая значимость.** Теоретическая значимость работы заключается во вкладе диссертационного исследования в развитие научных основ экологического мониторинга качества атмосферного воздуха путем внедрения хеометрики как методологической основы цифровой модернизации, в том числе, с учетом возможности извлечения из массива данных скрытой информации о протекающих вторичных химических реакциях в атмосферной среде на территории урбоэкосистем и в зонах влияния предприятий химической отрасли.

Практическая значимость работы заключается в следующем:

1. Предложенные хеометрические методики повышают пространственно-временное разрешение действующей системы экологического мониторинга качества атмосферного воздуха и позволяют произвести более точный расчет нормативов допустимых выбросов для стационарных источников, обеспечивающих минимизацию антропогенного воздействия химической отрасли на живую природу. Предложенные методики также уменьшают относительную

погрешность результатов, полученных расчетным путем, с 30 % и более до 17,8 % и менее по сравнению с регламентированными расчетными методиками.

2. Разработанный алгоритм формирования программы производственного экологического контроля, опробованный на примере предприятия химической отрасли, позволяет ее усовершенствовать, выявлять залповые выбросы и прогнозировать концентрации приоритетных для контроля загрязняющих веществ (Свидетельства о регистрации программы для ЭВМ № 2026681973 от 17.07.2026; № 2026681970 от 17.07.2026), в связи с чем рекомендуется для предприятий и других отраслей промышленности, имеющих стационарные источники выбросов загрязняющих веществ в атмосферный воздух.

3. Полученные результаты, переданные в Министерство экологии и природных ресурсов Республики Татарстан, имеют практическую значимость для эффективного проведения государственного экологического мониторинга химического загрязнения атмосферного воздуха и обеспечения экологического благополучия территорий (Справка о передаче результатов диссертационной работы и использовании их в практике для обеспечения экологического благополучия территорий).

4. Материалы диссертации внедрены в учебный процесс Казанского национального исследовательского технического университета им. А.Н.Туполева-КАИ для подготовки бакалавров и магистров по направлению «Техносферная безопасность» при изучении дисциплин «Экологический мониторинг и производственный экологический контроль» и «Управление экологической безопасностью территорий» (Акт о внедрении результатов диссертационной работы в образовательный процесс КНИТУ-КАИ).

5. Результаты, описанные в настоящем исследовании, использованы в отчетах о выполнении государственных заданий на 2019-2026 гг. для государственного научного бюджетного учреждения «Академия наук Республики Татарстан» по теме: «Научно-методическое обеспечение исследования антропогенных факторов формирования качества атмосферного воздуха

промышленных городов Республики Татарстан» (Акт Академии наук Республики Татарстан о внедрении результатов исследований).

### **Методология и методы исследования.**

Методология проведенного исследования осуществления экологического мониторинга химического загрязнения атмосферного воздуха урбоэкосистемы основана на привлечении хеометрических методов анализа многокомпонентной структуры данных химического анализа со значительным повышением их точности, с извлечением скрытых пространственно-временных закономерностей, в том числе касающихся процессов миграции и трансформации загрязняющих веществ в атмосфере. Данные для исследования получены в ходе работы с литературными и статистическими данными, изучения проектных документов предприятия, нормативных и правовых актов в области экологического мониторинга качества атмосферного воздуха и оценки антропогенного воздействия на него, обработки результатов инструментальных измерений автоматизированных станций наблюдений за загрязнением атмосферы.

Хеометрические методы включали: нейронные сети типа многослойный персептрон, нейросетевую кластеризацию и анализ главных компонент. Статистическую обработку данных, проектирование и обучение нейросетевых моделей проводили с применением программного пакета Statistica 10 в комплекте поставки «Automated Neural Networks + DataMiner», аналитической платформы KNIME Analytics platform с интеграцией Keras.

Исследования проводились на кафедре общей химии и экологии Казанского национального исследовательского технического университета им. А.Н. Туполева-КАИ (КНИТУ-КАИ), лаборатории прикладной экологии Института проблем экологии и недропользования Академии наук РТ (ИПЭН АН РТ).

**Объекты исследования:** параметры и химический состав выбросов промышленного объекта химической отрасли, результаты измерений метеорологических параметров и концентраций загрязняющих веществ в приземном слое атмосферного воздуха на автоматизированных станциях наблюдений.

**Предмет исследования:** определение и прогноз изменения приземных концентраций компонентов выбросов, совершенствование процессов разработки программ производственного экологического контроля, оценки изменения содержания загрязняющих веществ при залповых выбросах химических веществ от источников загрязнения атмосферного воздуха.

**Положения, выносимые на защиту.** На защиту выносятся:

1. Методические подходы к формированию программы производственного экологического контроля для предприятия химической отрасли промышленности на основе многомерного нейросетевого кластерного анализа с экспертным оцениванием и теории риска.
2. Нейросетевая модель расчета среднесуточных концентраций оксидов азота для государственного и производственного экологического мониторинга качества атмосферного воздуха.
3. Подходы для учета залповых выбросов при их нормировании на примере предприятия химической отрасли промышленности с детализацией понятия «залповые выбросы».
4. Методика расчета содержания приоритетной для контроля примеси диоксида азота с учетом вторичных химических реакций в атмосферном воздухе на основе совместного применения кластеризации данных, анализа главных компонент и нейросетевого моделирования.
5. Методика расчета содержания концентраций парникового газа диоксида углерода в приземном слое атмосферного воздуха, в условиях отсутствия данных о параметрах источников выбросов на основе многофакторного учета вторичных химических реакций в атмосфере.

**Соответствие диссертации паспорту специальности.** Диссертация соответствует паспорту специальности 1.5.15. Экология (химические науки) согласно: п.2. Комплексная оценка влияния промышленных объектов химической и нефтегазовой отрасли на природные и искусственные экосистемы. Принципы и механизмы системного экологического мониторинга. 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 результатов измерений концентраций компонентов выбросов в приземном слое атмосферного воздуха урбоэкосистемы, полученных с применением актуальных физико-химических методов анализа, рекомендуемых для государственного экологического контроля, методов статистической обработки результатов, лицензионных компьютерных программ для обработки данных, инновационных информационных технологий.

**Апробация результатов работы.** Основные материалы и результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на различных Международных и Всероссийских научных и научно-практических конференциях, в том числе: Международной научной конференции «Экология городской инфраструктуры – 2026» (Санкт-Петербург, 2026); Национальной научно-практической конференции с международным участием «Актуальные вопросы обеспечения комплексной безопасности» (Оренбург, 2026); XX-XXV Международной научной конференции «Химия и инженерная экология» (школа молодых ученых) (Казань, 2021-2025); Международной научно-технической интернет конференции «Защита окружающей среды от экотоксикантов: Международный опыт и Российская практика» (Уфа, 2025); Международной молодежной научной конференции «XXVII Туполевские чтения (школа молодых ученых)» (Казань, 2023); Всероссийской научной конференции «Безопасность, защита и охрана окружающей природной среды: фундаментальные и прикладные исследования» (Белгород, 2023).

**Личный вклад автора.** Автором осуществлялись обработка результатов измерений станций контроля загрязнения атмосферного воздуха, определение статистических характеристик загрязнения, формирование баз данных параметров выбросов промышленных объектов и автотранспорта, проведение расчетов рассеивания загрязняющих веществ в воздухе, проведение численных экспериментов

по проектированию и обучению нейросетевых моделей. Постановка задач, интерпретация результатов исследований, формулирование выводов, подготовка научных публикаций осуществлены совместно с научным руководителем.

Автор приносит благодарность научному руководителю д.х.н. Р.А. Шагидуллиной за научное руководство и помощь в подготовке диссертации к защите, коллегам д.х.н., профессору Ю.А. Тунаковой, д.т.н., профессору С.В. Новиковой, д.т.н., с.н.с. А.Р. Шагидуллину, с.н.с. В.С. Валиеву за помощь в проведении исследований и ценные рекомендации.

**Публикации.** По теме диссертации опубликованы 46 научных работ, из них 9 статей в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК Минобрнауки России, 1 статья в другом рецензируемом научном издании, 34 публикации в сборниках материалов и тезисов Международных и Всероссийских научных конференций, 2 авторских свидетельства на программы для ЭВМ.

**Структура диссертации.** Диссертационная работа изложена на 204 страницах машинописного текста, содержит 39 рисунков и 24 таблицы, состоит из введения, 6 глав, заключения, списка литературы, 5 приложений. Библиографический список включает 253 источника, в т.ч. 72 зарубежных авторов.

## Глава 1. Обзор литературы

### 1.1 Влияние уровня загрязненности атмосферного воздуха на состояние сопредельных компонентов урбоэкосистемы

Урбоэкосистема представляет собой сложную, созданную человеком систему, объединяющую природные компоненты и технические объекты. Функционирование данной системы обеспечивается тесной взаимосвязью ее ключевых подсистем – квазиприродной, ландшафтно-архитектурной, социально-экономической и общественно-производственной. Их взаимосвязь является обязательным условием жизнеспособности урбоэкосистемы в целом, тогда как нарушение или отсутствие одной из них ведет к системной дестабилизации. Исследование и управление качеством компонентов урбоэкосистемы необходимо осуществлять с использованием разработанных для этих целей специальных подходов [1,2].

Атмосферный воздух является ключевым компонентом урбоэкосистемы, связующим звеном, через которое загрязняющие вещества (ЗВ) мигрируют и воздействуют на все остальные элементы урбоэкосистемы. Качество атмосферного воздуха – один из ключевых факторов, определяющих экологическую безопасность территории и здоровье населения. Загрязнение атмосферного воздуха запускает каскад негативных процессов в сопредельных компонентах урбоэкосистемы: почве, водных объектах и растительных сообществах [3]. Поэтому оценка и прогноз уровня загрязнения атмосферного воздуха являются основанием для предупреждения и ликвидации последствий загрязнения окружающей среды в результате техногенного воздействия [4-7].

В настоящее время стоит задача оценки содержания не только ЗВ в приземном слое атмосферного воздуха, но и парниковых газов, особенно диоксида углерода ( $\text{CO}_2$ ), в условиях существующей климатической повестки [8,9]. ЗВ поступают в атмосферу преимущественно от стационарных промышленных источников и автотранспорта [10,11]. Дальнейший перенос в сопредельные среды включает:

– Атмогенное поступление в почву. Осевшие поллютанты аккумулируются в верхнем гумусовом горизонте почвы (0-5, 0-10 см). Почва выступает в роли депонирующей среды, характеризующей долговременное атмогенное поступление в течение всего периода действия источников выбросов [12-19]. Особенно ярко это выражено для тяжелых металлов, которые прочно связываются с органическим веществом и глинистыми минералами, что приводит к их устойчивому накоплению с увеличением территории с высоким уровнем загрязнения [20]. При определенных метеоусловиях загрязненная почва сама становится источником пылевых выбросов, возобновляя цикл загрязнения. С одной стороны, почва, ввиду потери свойств защитного буфера, является защищаемым компонентом урбоэкосистемы, с другой стороны является информативным маркером загрязнения приземного слоя атмосферного воздуха [21,22].

– Загрязнение атмосферного воздуха негативно влияет на качество поверхностных вод, например за счет выпадения кислотных дождей. Поступая на водосборные площади и, непосредственно на акватории водоемов, кислотные дожди приводят к снижению pH воды, мобилизации отдельных депонированных токсикантов из донных отложений, нарушению буферной емкости водных экосистем и гибели чувствительных гидробионтов [23].

– Растительность наиболее чувствительна к прямому воздействию загрязненного воздуха. Газовые примеси вызывают повреждение клеточных мембран и хлоропластов, что проявляется в хлорозах, некрозах, уменьшении площади листовой пластинки, преждевременном листопаде. Тяжелые металлы, накапливаясь в листьях, нарушают ферментативные процессы и фотосинтез. Это приводит к снижению продуктивности, ослаблению растений, повышению их восприимчивости к болезням и вредителям, сокращению продолжительности жизни [24-26]. В свою очередь растительность, особенно лишайники и некоторые виды древесных растений (тополь, сирень), служат чувствительным индикатором уровня атмосферного загрязнения [27].

Загрязнение атмосферного воздуха негативно влияет и на биотические компоненты урбоэкосистемы, включая население, поскольку акт дыхания является

непрерывным, и за сутки человек пропускает через себя около 15-20 тыс. л воздуха. Организм человека чутко реагирует на малейшие изменения в компонентном составе вдыхаемого воздуха и отвечает естественными реакциями на присутствие ЗВ. При этом ЗВ, поступающие ингаляционным путем, часто действуют в десятки раз сильнее, чем при поступлении через желудочно-кишечный тракт [28]. Установлена статистическая связь между загрязнением атмосферного воздуха и общей заболеваемостью населения. Согласно литературным данным, например [29], вклад загрязнения воздуха в частоту и выраженность наиболее распространенных заболеваний (органов дыхания, пищеварения, кожи, аллергических реакций и т.д.). составляет до 30 % от общей суммы факторов, влияющих на здоровье человека. В свою очередь, состояние здоровья жителей урбоэкосистемы является интегральным показателем благополучия всей системы.

## **1.2 Действующая система экологического мониторинга качества атмосферного воздуха**

Экологический мониторинг качества атмосферного воздуха и выбросов в атмосферу как главного фактора формирования экологической ситуации в городе крайне важен, но сложен в реализации ввиду высокой динамичности воздушной среды, зависимости от состава и режимов выбросов, а также метеорологических условий их рассеивания [30-32]. Действующая система экологического мониторинга представляет собой сложный комплекс мер, направленных на систематическое наблюдение, оценку и прогноз состояния атмосферного воздуха. Актуальность проведения систематических наблюдений обусловлена растущей антропогенной нагрузкой на атмосферу, особенно в урбанизированных районах, где сосредоточены основные источники выбросов. Традиционные системы, основанные на сети стационарных постов, сегодня дополняются расчетными технологиями, что позволяет перейти от точечного контроля к комплексной пространственно-временной оценке [33-35].

Основные требования к организации систем наблюдений и обеспечению

качества воздуха установлены в соответствующих нормативных актах, включая ФЗ от 4 мая 1999 г. № 96-ФЗ «Об охране атмосферного воздуха» [36]. Внутренние требования к качеству воздуха в помещениях также регулируются на законодательном уровне, что подчеркивает комплексный подход к проблеме [37].

Оценка состояния загрязнения атмосферного воздуха в городах России базируется на данных наблюдений, получаемых с постов сети Росгидромета, которые делятся на две категории:

- стационарные посты, размещаются в специально оборудованных павильонах для долгосрочных непрерывных измерений;
- передвижные лаборатории – мобильные посты для планового отбора проб в различных районах города.

По состоянию на 2023 г., государственная сеть Росгидромета насчитывала около 1200 стационарных постов наблюдений за загрязнением атмосферного воздуха (ПНЗ) в более чем 250 городах. Однако их пространственная плотность крайне неравномерна: высокая в европейской части страны и критически низкая в Сибири и на Дальнем Востоке, что создает «слепые зоны» в данных [38]. Посты подразделяются на «ручные» (отбор проб 3-4 раза в сутки с последующим лабораторным анализом) и автоматизированные, передающие данные в режиме, близком к реальному времени.

Сильные стороны сети Росгидромета: длительные ряды данных, унифицированная методическая база, охват значительной территории страны и ключевых промышленных центров. Система обеспечивает мониторинг основных ЗВ: взвешенных частиц (PM<sub>10</sub>, PM<sub>2.5</sub>), диоксида серы (SO<sub>2</sub>), оксидов азота (NO<sub>x</sub>), оксида углерода (CO), аммиака (NH<sub>3</sub>) и ряда специфических веществ (фенол, формальдегид, бенз(а)пирен и др.) в зависимости от размещения.

Однако сеть имеет ряд системных ограничений:

1. Неравномерность и недостаточная плотность размещения постов. ПНЗ сконцентрированы в городах, в то время как фоновая и сельская сеть развита слабо. Плотность постов в большинстве городов недостаточна для построения детальных карт загрязнения с учетом городской застройки и розы ветров.

2. Преобладание ручных методов. Доля автоматизированных постов, несмотря на планы по модернизации, остается невысокой. Ручные методы не обеспечивают оперативности и не позволяют фиксировать кратковременные пиковые концентрации, критически важные для оценки воздействия на здоровье.

3. Ограниченный перечень измеряемых веществ. Сеть слабо адаптирована для мониторинга содержания современных приоритетных загрязнителей.

4. Проблемы с доступностью и форматом данных. Росгидромет публикует ежегодники и оперативные данные, но их формат часто неудобен для научного анализа и предоставления широкой общественности.

Что касается территориальных систем, то многие субъекты Российской Федерации (РФ), особенно промышленно развитые (например, Республика Татарстан, Красноярский край, Свердловская, Челябинская, Кемеровская области и т.д.), развивают собственные региональные системы экологического мониторинга [39]. Эти системы часто создаются для контроля за конкретными предприятиями-загрязнителями и могут включать как автоматизированные станции контроля загрязнения атмосферы (АСКЗА), так и передвижные лаборатории [40]. Например, в Республике Татарстан (РТ) с 2007 г. развернута региональная сеть мониторинга, включающая АСКЗА и передвижные лаборатории, измеряющие не только основные, но и специфические загрязнители.

В последнее десятилетие в России, как и во всем мире, получил развитие локальный мониторинг в рамках производственного экологического контроля с использованием недорогих сенсорных датчиков [41]. Важным направлением считается создание «гибридных» систем, где данные государственной системы наблюдения дополняются данными с локальных систем наблюдений [42].

Внедрение систем автоматического контроля в рамках производственного экологического контроля позволяет перейти к непрерывному мониторингу в реальном времени, что повышает оперативность сбора первичных данных, устраняет погрешности, связанные с человеческим фактором, а также увеличивает точность и информативность контроля выбросов [43,44]. На законодательном

уровне, предприятия не обязаны внедрять системы автоматического непрерывного контроля выбросов и состояния воздуха, за исключением объектов I категории. Это приводит к преимущественно периодическому (раз в месяц/год) контролю, который не отражает реальную динамику загрязнения и неэффективен для оперативного управления. Локальный экологический мониторинг предоставляет детальную информацию об уровнях загрязнения, но для полноценной оценки состояния окружающей среды необходимо объединение данных с данными регионального и федеративного уровней [45].

Международное право формирует концептуальную основу для национальных систем мониторинга. Конвенция о трансграничном загрязнении воздуха на большие расстояния и ее отраслевые протоколы (по стойким органическим загрязнителям, тяжелым металлам и др.) устанавливают обязательства сторон по снижению выбросов и организации совместного мониторинга. В рамках конвенции действует Кооперативная программа мониторинга и оценки распространения загрязнителей воздуха на большие расстояния в Европе, которая предоставляет странам-участницам данные о трансграничных потоках ЗВ [46]. Эти данные используются для верификации национальных кадастров выбросов и коррекции природоохранной политики. В РФ положения конвенции реализуются через федеральные целевые программы, а данные мониторинга в приграничных регионах (например, в Мурманской области, Карелии) сопоставляются с данными соседних государств для оценки трансграничного вклада.

Современные глобальные инициативы, такие как программа Всемирной метеорологической организации «Глобальная служба атмосферы», фокусируются на фоновом мониторинге загрязнителей, в эту группу входят такие газы, как озон ( $O_3$ ), CO,  $NO_x$  и летучие органические соединения, для оценки климатических изменений и трансграничного переноса [47].

Международный опыт демонстрирует два основных подхода к построению национальных сетей мониторинга: централизованный (как в ЕС, где сеть мониторинга качества воздуха «AirBase» координируется Европейским агентством по окружающей среде) и децентрализованный (как в США, где основную роль

играют сети Агентства по охране окружающей среды, дополняемые программами штатов и местных властей). Национальная система мониторинга атмосферы и сеть мониторинга состояния воздуха обеспечивают сбор данных для проверки соблюдения национальных стандартов качества воздуха. Ключевое отличие от российской модели – активное привлечение данных от локальных сетей экологического мониторинга, развернутых промышленными предприятиями в рамках разрешительной деятельности, что существенно увеличивает плотность данных.

Методы, признанные референтными, обеспечивают юридически значимые результаты, используемые для привлечения к ответственности, взимания платы за негативное воздействие и проверки соблюдения нормативов. Их применение строго регламентировано национальными и межгосударственными стандартами (ГОСТ).

– Гравиметрический метод для взвешенных частиц (PM2.5, PM10) является безусловным эталоном. Воздух с заданным расходом протягивается через селективное входное устройство (циклон или импактор), который отделяет фракцию частиц по аэродинамическому диаметру. Частицы осаждаются на предварительно взвешенном фильтре из фторопласта или кварцевого волокна. После экспозиции фильтр кондиционируется и взвешивается на микровесах в контролируемых условиях влажности и температуры. Разница масс, отнесенная к объему пропущенного воздуха, дает концентрацию.

– УФ-абсорбционная спектроскопия – эталонный метод для определения содержания  $O_3$ , основанный на измерении поглощения света с длиной волны 260-270 нм [48].

– Метод хемилюминесценции для измерения концентрации диоксида азота ( $NO_2$ ). Основан на измерении света, излучаемого при реакции оксида азота ( $NO$ ) с  $O_3$ , которая приводит к образованию  $NO_2$ .

– Ультрафиолетовая флуоресценция (УФ-флуоресценция) для измерения  $SO_2$  – это высокочувствительный и селективный метод анализа, основанный на способности  $SO_2$ , поглощая УФ-излучение, переходить в возбужденное состояние

и затем испускать свет (флуоресцировать), интенсивность которого пропорциональна его концентрации, что позволяет точно измерять микроколичества  $\text{SO}_2$  в атмосферном воздухе, топливе и других продуктах, как это регламентируется стандартами [49].

– Инфракрасная абсорбционная спектроскопия (ИКАС) широко используется для определения  $\text{CO}$ , так как молекулы угарного газа интенсивно поглощают ИК-излучение на характерных частотах вибраций связи  $\text{C-O}$ , позволяя количественно измерять его концентрацию в газах.

– Автоматизированные газоанализаторы требуют регулярной поверки (раз в год) и ежедневной/еженедельной проверки нуля и калибровки [50]. Дистанционные и интегральные методы дают информацию о средних концентрациях по пути распространения сигнала или о пространственном распределении загрязнений.

– Лидарная система обладает высокой селективностью для дистанционного измерения концентрации  $\text{ЗВ}$  в атмосферном воздухе и большой скоростью получения результатов измерений. Именно это позволяет разрабатывать на основе лидаров системы контроля аварийных выбросов  $\text{ЗВ}$  в атмосферу над промышленными предприятиями. Преимущества: высокая пространственно-временная детализация (до м и с), возможность сканирования. Недостатки: сложность, высокая стоимость, чувствительность к погодным условиям (туман, сильный дождь) [51].

– Спутниковый мониторинг. Датчики на спутниках измеряют солнечное излучение, отраженное и рассеянное земной поверхностью и атмосферой, в различных спектральных диапазонах. Они предоставляют глобальные данные об общем содержании таких газов, как  $\text{NO}_2$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{CO}$  и формальдегид. Их разрешение недостаточно для локального мониторинга, но идеально для отслеживания трансграничных переносов, крупных точечных источников и оценки фоновых уровней для коррекции моделей. Ключевая проблема – невозможность получать данные при сплошной облачности и сложности в определении приземных концентраций, особенно в условиях температурных инверсий.

Массовое появление коммерческих малобюджетных датчиков для мониторинга качества воздуха (Legrand Cabling System – LCS) кардинально меняет парадигму мониторинга, позволяя дополнять мониторинговую информацию. Наиболее распространен оптический метод рассеяния для измерения твердых частиц. Лазерный диод освещает частицу, а фотодиод под определенным углом фиксирует интенсивность рассеянного света. Калибровка против гравиметрического эталона обязательна, так как сигнал зависит от размера, формы, плотности и коэффициента преломления частиц [52]. Используются электрохимические сенсоры для измерения газов, где газ диффундирует через мембрану и вызывает окислительно-восстановительную реакцию на рабочем электроде, генерируя ток, пропорциональный концентрации. Также применяются сенсоры на металлооксидных полупроводниках, сопротивление которых меняется при адсорбции газов. Ультранизкая стоимость, малые габариты, низкое энергопотребление позволяют реализовать гиперлокальный мониторинг (уровень двора), персональную экспозиционную оценку, скрининг для выявления «горячих точек», общественный (гражданский) мониторинг. Однако данные таких сетей характеризуются более низким качеством: сенсоры требуют частой калибровки, чувствительны к условиям эксплуатации (влажность, температура) и могут давать систематические погрешности [53]. Эффективное использование современных методов химического анализа для определения ЗВ в приземном слое атмосферного воздуха невозможно без функционирования комплексной и достоверной системы экологического мониторинга.

### **1.3 Характеристика системы экологического мониторинга качества атмосферного воздуха на территории г. Казани**

Территории со значительной антропогенной нагрузкой на окружающую среду, в особенности на атмосферный воздух, требуют функционирования систем экологического мониторинга со значительным пространственно-временным разрешением. Примером такой урбоэкосистемы является г. Казань, для которого

можно отметить расширение промышленного производства, рост территории, расширение сети транспортных магистралей и многочисленных коммуникаций [54-57].

Согласно отчетам ФГБУ «УГМС РТ» атмосферный воздух г. Казани характеризуется как загрязненный, при этом в динамике последних лет отмечается переход от «повышенного» (2017-2020 гг.) к «высокому» уровню загрязнения (2021-2024 гг.). Основными нормируемыми ЗВ, определяющими неблагоприятную ситуацию, являются формальдегид, сероводород ( $H_2S$ ),  $NH_3$ ,  $NO_2$  и взвешенные частицы ( $PM_{2.5}$  и  $PM_{10}$ ) (таблица 1.1). Особую опасность представляют мелкодисперсные частицы  $PM_{2.5}$ , способные проникать в кровоток и провоцировать серьезные заболевания [58,59].

Таблица 1.1 – Основные ЗВ в атмосферном воздухе г. Казани и источники их поступления (по данным мониторинга) ФГБУ «УГМС РТ»

| ЗВ                     | Характер воздействия                                 | Потенциальные источники в Казани                                               | Типичный период высоких концентраций |
|------------------------|------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------|
| Формальдегид           | канцероген, раздражает слизистые                     | автотранспорт, химическая промышленность                                       | летний период                        |
| $PM_{2.5}$ / $PM_{10}$ | заболевания дыхательной и сердечно-сосудистой систем | автотранспорт, промышленные выбросы, строительство                             | летний период                        |
| Диоксид азота          | токсичен, влияет на дыхательную систему              | автотранспорт, энергетические установки                                        | –                                    |
| Аммиак                 | резкий запах, раздражает слизистые                   | сельскохозяйственные комплексы, очистные сооружения, химическая промышленность | весенне-летний период                |
| Сероводород            | резкий запах, токсичен                               | очистные сооружения, полигоны ТКО                                              | –                                    |

Для перехода к управлению здоровьем применяется методология оценки риска, соответствующая рекомендациям ВОЗ и Р 2.1.10.3968-23 [60]. Результаты мониторинга для г. Казани выявляют высокий уровень загрязнения некоторых веществ в атмосферном воздухе, в том числе формальдегидом. Он формирует как

высокий риск развития неканцерогенных эффектов для здоровья, так и неприемлемый уровень канцерогенного риска [61,62].

Рассеивание ЗВ серьезно осложнено природно-климатическими условиями г. Казани. Для города характерна высокая повторяемость приземных инверсий температуры и слабый ветер, особенно в холодный период г., что формирует повышенный потенциал загрязнения атмосферы (ПЗА). Усугубляет ситуацию градостроительная планировка – плотная высотная застройка, что создает зоны застоя воздуха, где концентрации ЗВ могут на порядок превышать фоновые [63].

Нормативно-правовой основой мониторинга выступает ФЗ от 4 мая 1999 г. № 96-ФЗ «Об охране атмосферного воздуха» [36] и сопутствующие подзаконные акты. Ключевыми нормативами являются предельно допустимые концентрации (ПДК) и производные от них индексы: индекс загрязнения атмосферы (ИЗА), рассчитываемый для долгосрочной оценки, и стандартный индекс (СИ), отражающий максимальные разовые превышения [64]. Важным инструментом регулирования является режим неблагоприятных метеорологических условий (НМУ) [65,66], препятствующих рассеиванию выбросов, в 2025 году в г. Казани было объявлено 39 таких дней.

Система мониторинга в г. Казани представляет собой многоуровневую структуру, объединяющую федеральные, региональные и локальные (промышленные) элементы [59]. Функции федерального мониторинга в г. Казани осуществляет ФГБУ «УГМС РТ». На территории г. Казани развернута сеть из 10 стационарных ПНЗ, расположенных в различных частях города согласно требованиям РД 52.04.186-89 [67]. Отбор проб проводится 4 раза в сутки (в 1:00, 7:00, 13:00, 19:00) ежедневно, кроме выходных. Данные с указанием концентраций, по итогам определения их в аналитической лаборатории, публикуются в открытом доступе. Однако можно отметить, что размещение около 80 % постов вблизи автодорог делает сеть более чувствительной к транспортному загрязнению, не всегда отражая фоновую или промышленную нагрузку в жилых зонах.

Сеть ПНЗ ФГБУ «УГМС РТ» в г. Казани обладает критическим недостатком: фиксированное время отбора проб не совпадает с реальными пиками транспортной

нагрузки. Это приводит к систематической недооценке максимальных разовых концентраций и, как следствие, к занижению оценок риска для здоровья. Кроме того, сеть недостаточно чувствительна для контроля «запаховых» выбросов ( $\text{H}_2\text{S}$ , меркаптаны), имеющих непостоянный характер и локальное распространение, что является частой причиной жалоб населения в северной части города [68].

Параллельно в рамках социально-гигиенического мониторинга Управление Роспотребнадзора по РТ и ФБУЗ «Центр гигиены и эпидемиологии в РТ» проводят собственные исследования в 14 мониторинговых точках, фокусируясь на веществах, приоритетных с точки зрения охраны здоровья населения, и оценке экспозиции в местах массового пребывания людей [62].

Министерство экологии и природных ресурсов РТ (МЭПР РТ) развивает собственную территориальную автоматизированную сеть. По состоянию на 2025 год в республике работало 17 АСКЗА, пять из которых расположены в г. Казани. Эти станции обеспечивают непрерывный поток данных в режиме, близком к реальному времени, который отражается в ГИС «Экологическая карта РТ» [69].

Отбор проб осуществляется непрерывно с осреднением за каждые 20 минут. В 2024 году сеть станций МЭПР РТ выполнила более 4,3 миллиона измерений [59]. Важным направлением развития является интеграция данных с данными локальных систем наблюдений. В рамках соглашений в единую сеть поступает информация с 13 АСКЗА, принадлежащих крупным объектам, таким как ПАО «Нижнекамскнефтехим», АО «ТАНЕКО», АО «ТАИФ-НК», ПАО «Татнефть» и ПАО «Казаньоргсинтез». Для оперативного реагирования на жалобы населения МЭПР РТ используются 6 передвижных автоматизированных экологических лабораторий, 2 из которых используются в г. Казани [70].

Промышленные предприятия обязаны осуществлять производственный экологический контроль (ПЭК), в том числе, на границах своих санитарно-защитных зон. В отличие от государственной сети наблюдений, локальная система экологического мониторинга решает задачи более детального и оперативного контроля, напрямую указывая на источник негативного воздействия конкретного хозяйствующего субъекта.

Данные ПЭК, получаемые с помощью стационарных и передвижных постов, являются важным источником информации. ПАО «Казаньоргсинтез», который осуществляет контроль с помощью стационарной санитарно-промышленной лаборатории и мобильной экологической лаборатории, публикует данные по ряду веществ (фенол, бензол,  $\text{NO}_x$  и  $\text{CO}_2$  и др.) в открытом доступе [71].

Помимо инструментальных замеров, система МЭПР РТ включает расчетный мониторинг (сводные расчеты загрязнения атмосферного воздуха), на основе которых определяется, в том числе, фоновый уровень загрязнения для целей проектирования и нормирования. На основе сводных расчетов можно определить конкретные источники выбросов ЗВ, которые воздействуют на данную территорию, определить зоны с неудовлетворительным качеством атмосферного воздуха, а также оценить отдельно воздействие на атмосферный воздух выбросов от автотранспортных потоков [72,73]. Указанные расчеты позволяют также получить данные для использования при разработке прогнозов развития территории, разработки мероприятий по снижению уровня загрязнения атмосферы города, а также для выработки системы регулирования выбросов в периоды НМУ, что имеет особую значимость в случае функционирования различных производств на общей производственной территории [59].

Основным преимуществом расчетных методов является их относительно низкая стоимость и высокая скорость получения результатов по сравнению с развертыванием сети стационарных постов наблюдений. Это позволяет проводить быструю оценку и оперативно анализировать различные сценарии развития ситуации, например, при проектировании новых промышленных объектов [74].

Модели рассеивания, регламентированные действующими методиками [75], дают возможность рассчитать поля концентраций для всей исследуемой территории. Это позволяет идентифицировать зоны максимального воздействия, которые могут быть пространственно смещены относительно расположения стационарных постов, проводить реконструкцию и ретроспективный анализ условий загрязнения для установления причинно-следственных связей между выбросами и уровнями концентраций в прошлом, проводить прогноз, как

оперативный (1-3 суток) для систем экологического оповещения, так и для долгосрочного моделирования при стратегическом планировании территориального развития и оценке эффективности планируемых природоохранных мер.

Интеграция расчетных методов с геоинформационными системами (ГИС) и данными о здоровье населения переводит мониторинг из плоскости констатации фактов в плоскость оценки риска. Это предоставляет органам власти мощный инструмент для обоснования природоохранных мероприятий и градостроительного планирования [76].

Внедрение расчетных методов обладает значительным экономическим эффектом. Затраты на лицензирование профессионального программного комплекса и создание цифровой модели территории часто сопоставимы с организацией лишь нескольких стационарных постов, при этом модель генерирует данные для неограниченного числа виртуальных точек. Более того, моделирование выступает инструментом оптимизации самих сетей инструментального мониторинга, позволяет повысить репрезентативность сети при сокращении общих затрат.

Точность расчетов напрямую зависит от достоверности исходных данных о выбросах и метеопараметрах, а также от адекватности выбранной модели. Расчетные методы дополняют и расширяют возможности инструментального мониторинга, обеспечивают необходимую полноту, оперативность и прогностическую ценность информации, что является ключевым фактором для эффективного управления качеством атмосферного воздуха.

Основные компоненты системы мониторинга атмосферного воздуха г. Казани представлены в таблице 1.2.

Результаты сводных расчетов загрязнения атмосферы могут использоваться для создания постоянно действующей системы расчетного мониторинга качества атмосферного воздуха, учитывающей изменения в выбросах ЗВ в результате ввода в действие новых хозяйственных объектов, реконструкции действующих производств, изменения схемы транспортных потоков и т.п.; подготовки

предложений по развитию сети стационарных постов наблюдения за загрязнением атмосферного воздуха и расширения перечня веществ, подлежащих контролю за их содержанием в атмосферном воздухе [77-80].

Таблица 1.2 – Основные компоненты системы мониторинга атмосферного воздуха г. Казани

| Уровень системы                    | Ответственный                     | Ключевые методы и мощности                                                                  | Основная функция                                                                       |
|------------------------------------|-----------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------|
| Наблюдательная сеть Росгидромета   | ФГБУ «УГМС РТ» (Росгидромет)      | 10 ПНЗ                                                                                      | формирование государственного фонда данных, оценка долгосрочных трендов, расчет ИЗА    |
| Территориальная система наблюдения | МЭПР РТ                           | 5 АСКЗА и 2 передвижные лаборатории в г. Казани, интеграция данных предприятий              | оперативный контроль, реагирование на жалобы, информирование населения («Экокарта РТ») |
| Санитарно-гигиенический мониторинг | Управление Роспотребнадзора по РТ | 14 мониторинговых точек                                                                     | состояние окружающей среды и факторы среды обитания, влияющие на здоровье              |
| Производственный контроль          | промышленные предприятия          | стационарные и мобильные лаборатории предприятий                                            | контроль загрязнения воздуха в зоне влияния промышленных объектов                      |
| Расчетный мониторинг и надзор      | МЭПР РТ                           | сводные расчеты загрязнения, анализ проектной документации, плановые и внеплановые проверки | определение фона для нормирования и проектирования, выявление и пресечение нарушений   |

Существование параллельных независимых сетей трех ведомств (УГМС РТ, МЭПР РТ, Управление Роспотребнадзора по РТ), использующих разные оборудование и программы наблюдений, приводит к значительным расхождениям в данных по одним и тем же ЗВ и территориям. Отсутствие единой платформы валидации затрудняет формирование единой доказательной базы и снижает эффективность обоснования управленческих решений, особенно в ситуациях сильного загрязнения.

Локальный экологический мониторинг служит основой актуальных сведений для государственных органов природоохранных структур. Помимо данных

диагностики о степени загрязнения атмосферы, он выступает базой как для быстрого управления качеством воздуха, так и для подготовки перспективных мер по его защите.

#### **1.4 Производственный экологический контроль в системе мониторинга качества атмосферного воздуха**

Согласно статье 67 ФЗ от 10.01.2002 № 7-ФЗ «Об охране окружающей среды», производственного экологического контроля ПЭК осуществляется в целях обеспечения выполнения в процессе хозяйственной и иной деятельности мероприятий по охране окружающей среды, рациональному использованию и восстановлению природных ресурсов, а также в целях соблюдения требований в области охраны окружающей среды, установленных законодательством [81]. ПЭК на предприятии позволяет держать на контроле: соблюдение нормативов воздействия на компоненты урбоэкосистемы; ведение учета состава и количества эмиссий; выявление возможности и способов снижения негативных воздействий; выполнение мероприятий по охране окружающей среды, рациональному использованию и восстановлению природных ресурсов; соблюдению правил эксплуатации водо- и газоочистного оборудования; ведение природоохранной документации; выполнение предписаний надзорных органов и т.д. [82].

Проведение эффективного ПЭК является обязательным для предприятий, осуществляющим деятельность на объектах I, II и III категорий. Основная цель ПЭК – получение достоверной информации о состоянии окружающей среды на территории предприятия и в пределах зоны его влияния. Согласно приказу Минприроды России № 581 [83] зона влияния выбросов конкретного ЗВ определяется как территория, ограниченная замкнутой линией, вне которой для любой точки местности в течение всего времени выбросов  $j$ -го ЗВ выполняется условие:

$$q_{пр,j} < 0,05 \text{ ПДК}_j,$$

где:  $q_{прj}$  – значение приземной концентрации  $j$ -го ЗВ в атмосферном воздухе, создаваемой выбросами стационарных источников рассматриваемого объекта, в долях;

ПДК $_j$  – предельно допустимая концентрация  $j$ -го ЗВ в атмосферном воздухе [42].

Проведение ПЭК в области охраны атмосферного воздуха, включает, согласно приказу Минприроды России №109 [84], выполнение контроля за соблюдением нормативов допустимых выбросов ЗВ от стационарных источников в соответствии с подготовленным план-графиком контроля, а также выполнение наблюдений за загрязнением атмосферного воздуха [42].

Методологической основой ПЭК качества атмосферного воздуха является комплекс инструментальных и расчетных методов, регламентированных соответствующими нормативными документами. Инструментальный контроль осуществляется с привлечением аккредитованных лабораторий и предполагает отборы проб воздуха на границе санитарно-защитной зоны и в зоне влияния предприятия с заданной периодичностью. Их проведение регламентировано методическими указаниями по конкретным веществам, например, РД 52.04.186-89 [67]. Этот метод обеспечивает высокую точность, но является точечным во времени и пространстве.

Современным подходом является внедрение автоматизированных систем непрерывного контроля выбросов. Такие системы устанавливаются непосредственно на источниках выбросов, позволяют в режиме реального времени отслеживать концентрации ЗВ и оперативно реагировать на превышения, что значительно повышает эффективность ПЭК.

На сегодняшний день, при переходе к технологическому нормированию на основе наилучших доступных технологий (НДТ) одной из целей ПЭК является установление соответствия объектов негативного воздействия на окружающую среду требованиям НДТ. В России основные принципы выбора наилучших подходов и методов для включения в программы ПЭК определены в Информационно-техническом справочнике (ИТС) по НДТ ИТС 22.1-2021 «Общие

принципы производственного экологического контроля и его метрологического обеспечения» [85]. Согласно данному справочнику, в программах ПЭК должен быть предусмотрен контроль маркерных ЗВ и показателей, характеризующих применяемые технологии, оказывающие негативное воздействие на окружающую среду [86,87].

Структурно программа ПЭК включает следующие обязательные элементы: перечень контролируемых показателей, схему и периодичность контроля, методы измерений и расчетов, перечень ответственных должностных лиц и порядок реагирования на выявленные отклонения. Особое значение имеет назначение ответственных лиц, которые обеспечивают организацию и функционирование всей системы контроля на предприятии [88,89].

Полученные результаты применяются для заполнения форм государственной статистической отчетности (например, формы 2-ТП «воздух»), расчета платы за негативное воздействие на окружающую среду (НВОС), а также для разработки и корректировки природоохранных мероприятий.

Ключевым аспектом является интеграция данных ПЭК в систему государственного экологического мониторинга. Локальный мониторинг в рамках ПЭК предоставляет детальную информацию об источниках загрязнения, однако для комплексной оценки состояния атмосферного воздуха и моделирования рассеивания ЗВ необходимо объединение этих данных с информацией регионального и федерального уровней.

### **1.5 Используемые расчетные методы при реализации экологического мониторинга качества атмосферного воздуха**

Введение расчетных методов в практику экологического мониторинга представляет собой значительный шаг в развитии систем контроля качества атмосферного воздуха [90]. Правовой основой для их применения служит ФЗ «Об охране атмосферного воздуха», который предписывает проведение инвентаризации выбросов, в том числе расчетным методом [91]. Расчет

рассеивания ЗВ позволяет оценивать уровень загрязнения приземного слоя атмосферного воздуха с гораздо большей детализацией, чем данные инструментального мониторинга.

Основоположниками создания методов расчетного экологического мониторинга являются работы Израэля Ю.А., Марчука Г.И., Безуглой Э.Ю., Берлянда М.Е., Гениховича Е.Л., Пененко В.В., и др. Модели рассеивания [83] дают возможность рассчитать поля концентраций для всей исследуемой территории, что позволяет идентифицировать зоны максимального воздействия, которые могут быть пространственно смещены относительно расположения стационарных постов, устанавливать причинно-следственные связи между выбросами ЗВ и уровнями концентраций в прошлом, проводить прогноз, как оперативный (1-3 суток), так и долгосрочный.

Однако используемые расчетные методы имеют существенные ограничения, связанные с используемыми моделями рассеивания. Модели на основе распределения Гаусса – наиболее распространенные для расчета уровня загрязнения атмосферного воздуха благодаря невысоким вычислительным затратам. В основе таких моделей лежит нормальное (Гауссово) распределение ЗВ в воздушной среде, полученное из уравнения турбулентной диффузии путем введения следующих упрощений:

- параметры источника выбросов – стационарные;
- поле скоростей ветра – однородное (одинаковая и постоянная скорость движения воздушного потока);
- коэффициенты диффузии не зависят от координат;
- диффузия в направлении скорости ветра мала по сравнению со средней скоростью переноса вещества.

Модели на основе распределения Гаусса, как правило, разрабатывались в конце XX века за рубежом (например, американские модели CAL3QHC5, ISC36, HIWAY2, California Line Source Model – CALINE4, General Motors– GM, General Finite Line Source Model – GFLSM; финская модель Contaminants in the Air from a road, by the Finnish Meteorological Institute – CAR-FMI [92,93] и т.д.). Почти все эти

модели используются для расчета линейных источников загрязнения, таких как автомобильные дороги, так как любой линейный источник можно представить в виде большого количества точечных элементов, и суммирования концентрации ЗВ, полученной от каждого из них. Их сила заключается в относительной вычислительной простоте и адаптации к большому количеству источников, однако они имеют ограничения при моделировании нестационарных процессов и сложных химических превращений [94].

Модели турбулентной диффузии – к ним относятся трехмерные неоднородной модели, решающие систему уравнений метеорологии, турбулентного переноса и фотохимических реакций. Эти модели позволяют прогнозировать образование вторичных загрязнителей, таких как  $O_3$  и вторичные органические соединения, и используются для оперативного прогноза качества воздуха, оценки трансграничного переноса и моделирования на региональном и городском уровнях [90]. Их применение требует значительных вычислительных ресурсов и высоко детализированных входных данных.

Однако существующие Гауссовы модели или модели турбулентной диффузии зачастую требуют введения многочисленных эмпирических поправочных коэффициентов для обеспечения надлежащего качества моделирования, либо требуют учета большого количества входных параметров, что приводит к существенному увеличению трудоемкости и вычислительной сложности расчетов.

Вводимые в модель эмпирические коэффициенты призваны учесть влияние таких трудно формализуемых и взаимосвязанных факторов, как микроклиматические особенности городской застройки (влияние застройки и рельефа, образование «островов тепла», каньонный эффект), не стационарность и пространственная неоднородность метеопараметров, специфика взаимодействия аэродисперсных потоков с элементами озеленения и др. Однако поправочный подход имеет принципиальные ограничения, так как не способен адекватно описать сложные нелинейные и многофакторные зависимости между источниками эмиссии, условиями переноса и полями концентраций ЗВ.

Расчетные методы представляют собой иерархию математических моделей, учитывающих физико-химические процессы распространения ЗВ. Их систематизация возможна по степени сложности и решаемым задачам, что отражено в таблице 1.3.

Используемые расчетные методы, применяемые для расчетного экологического мониторинга качества атмосферного воздуха, демонстрируют существенные системные ограничения в обработке больших массивов информации, масштабной оценке, а сложность моделирования нелинейных и многофакторных зависимостей приводит к трудностям в получении репрезентативной информации [95].

Таблица 1.3 – Расчетные методы, учитывающие физико-химические процессы распространения ЗВ

| Метод                                                            | Описание методики                                                                                                                                                                                                                                                          | Достоинства                                                          | Недостатки                                                                                       |
|------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1                                                                | 2                                                                                                                                                                                                                                                                          | 3                                                                    | 4                                                                                                |
| Классические статистические модели (регрессионные) [31,96]       | универсальные методы, основывающиеся на знаниях о взаимосвязи отдельных элементов системы, неявно содержащихся в экспериментальных данных, используются как линейные, так и нелинейные модели (например, прогноз концентрации $SO_2$ на основе метеорологического индекса) | позволяют выявлять взаимосвязи в данных                              | часто не имеют физической интерпретации и не способны объяснить природу закономерностей в данных |
| Метод разложения по естественным ортогональным составляющим [97] | применяется для разложения метеополей, метеопараметр представляется в виде суммы среднего значения и ортогональных функций, зависящих от координат, с коэффициентами, зависящими от времени                                                                                | эффективен для анализа пространственно-временных структур метеополей | сложность интерпретации физического смысла ортогональных функций                                 |

Продолжение таблицы 1.3

| 1                                                | 2                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 3                                                                                                                                | 4                                                                                                                                              |
|--------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Авторегрессионные методы [98]                    | методы прогнозирования, представляющие собой зависимость временного ряда измерений одной и той же исследуемой величины от ее значений в предыдущие моменты времени (ретроспекции)                                                                                                                        | позволяют анализировать степень изменения параметров во времени и прогнозировать их на основе прошлых значений                   | не имеют физической интерпретации; требуют анализа временных рядов                                                                             |
| Гауссова модель [99,100]                         | разновидность регрессионных моделей, где для описания распространения примеси от точечного источника используется нормальное (гауссово) распределение, учитывает турбулентные возмущения атмосферы, существуют модификации: модель Пасквилла-Бриггса, Пасквилла-Гиффорда                                 | относительная простота реализации для точечных источников, широко распространена и имеет различные модификации для учета условий | требует допущений об однородности и устойчивости атмосферы                                                                                     |
| Транспортно-диффузионные методы (К-модели) [101] | основываются на уравнении турбулентной диффузии, учитывают перенос примеси ( $q$ ) ветром ( $u_i$ ) и турбулентный обмен ( $K_i$ ), а также трансформацию примеси ( $a$ ), скорость ветра и коэффициент диффузии определяются отдельно для различных ситуаций (ветер/штиль, инверсия, перегретый выброс) | гибкость при прогнозировании неоднородных по времени и пространству потоков, физически обоснованный подход                       | требует больших объемов входных данных, времени и средств для построения, неприменим, если объем выбросов превышает объем турбулентного потока |
| Модель URBAN + TIMES [102,103]                   | двухэтапный метод для урбанизированной местности: сначала рассчитывается поле ветра по методу URBAN, затем значения скорости ветра подставляются в транспортную модель TIMES для решения системы уравнений распространения загрязнений                                                                   | специализирован для сложных условий городской застройки                                                                          | сложность реализации и высокие требования к вычислительным ресурсам                                                                            |

Продолжение таблицы 1.3

| 1                                                          | 2                                                                                                                                                                                                                              | 3                                                                                                                           | 4                                                                                                                                                                       |
|------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Прямые расчетные методы с уточняющими коэффициентами [104] | вычислительные алгоритмы с уточняющими коэффициентами (климатический, рельефа и др.), к ним относятся многие официально утвержденные методики расчета выбросов от автотранспорта и промпредприятий                             | простота реализации и малые вычислительные затраты                                                                          | низкая точность из-за большого количества упрощений и невозможности перенастройки под конкретные условия, введение множества коэффициентов не решает проблему полностью |
| Метод текущих динамик                                      | является усовершенствованной Гауссовой регрессионной моделью                                                                                                                                                                   | более высокая точность по сравнению с прямыми методами.                                                                     | требует больших вычислительных затрат, введение упрощений для их сокращения снижает точность, не работает для краткосрочных прогнозов и экстремальных уровней           |
| Статистические методы прогнозирования [105]                | методы «скользящего окна» для прогнозирования временных рядов на основе их предыдущих значений, наиболее известна модель Бокса-Дженкинса, описывающая автокорреляционные свойства как стационарных, так и нестационарных рядов | позволяют получать будущие значения параметров на основе ретроспективных данных, экономно выражают свойства временных рядов | необходимость сбора большого количества данных, отсутствие физической интерпретации                                                                                     |

Экспериментальные данные, полученные в результате экологического мониторинга, обычно нелинейны и многомерны из-за наличия взаимосвязей между различными переменными. Традиционные методы экологического мониторинга, основанные на инструментальных и расчетных подходах, часто не обеспечивают необходимой оперативности, пространственного охвата и точности, особенно в условиях динамичных городских и промышленных ландшафтов.

Таким образом, можно заключить, что действующая система государственного экологического мониторинга, основанная на развитой сети наблюдений, достигла предела эффективности в рамках традиционных подходов к

обработке данных. Ее ключевые ограничения – неспособность к комплексному анализу многомерной информации – могут быть преодолены за счет внедрения и интеграции хеометрических подходов для решения задач экологического мониторинга качества атмосферного воздуха.

### **1.6 Преимущества хеометрических подходов при реализации экологического мониторинга качества атмосферного воздуха**

Как рассматривалось нами ранее, современная система государственного экологического мониторинга представляет собой сложную, многоуровневую структуру, регламентированную законодательством и предназначенную для наблюдения, оценки и прогноза состояния окружающей среды [81]. Несмотря на системный подход и развитие аналитического приборостроения, действующая система сталкивается с фундаментальными проблемами, ограничивающими ее эффективность, например, сложность идентификации источников загрязнения [106] или обработка больших массивов информации. В этих условиях на первый план выходит хеометрия – междисциплинарная наука, применяющая математические и статистические методы для извлечения максимально полезной информации из химических данных [107].

По определению Золотой книги Международного союза теоретической и прикладной химии [108] хеометрией называется применение математических методов для получения и анализа химических данных, а также планирование химического эксперимента и численное моделирование. Трудоемкие и дорогостоящие лабораторные процедуры делают хеометрию привлекательным подходом для получения химических данных. Так хеометрия, на основе математических моделей и методов, позволяет получать значения концентраций ЗВ и показателей, рассчитываемых на их основе. Анализ данных, полученных в ходе экологического мониторинга, является трудоемкой задачей, поскольку урбоэкосистемы отличаются высокой сложностью и включают в себя многочисленные процессы, возникающие под воздействием природных и

антропогенных факторов. Такие данные обычно состоят из большого количества химических и физических параметров, полученных в основном в разное время, на разных территориях и т.д. [109,110]. Следовательно, это подразумевает высокую вероятность маскировки скрытых взаимосвязей и тенденций в наборах химических данных из-за множества перекрывающихся и конкурирующих переменных. Поскольку одномерные подходы не подходят для эффективного анализа, так как могут быть громоздкими и сложными в обработке подобных массивов данных, использование хеометрии становится в этом отношении первостепенным [111]. Внедрение хеометрических подходов в практику экологического мониторинга представляет собой значительный шаг в его развитии [112]. Так, хеометрические подходы позволят, в частности, получить достоверную пространственно-временную картину распределения ЗВ, что особенно важно для задач прогнозирования и управления качеством воздуха [113].

Использование хеометрии для изучения данных экологического мониторинга позволит выявить взаимосвязь между источниками загрязнения, факторами окружающей среды и их воздействием на окружающую среду, поскольку она может интерпретировать различные аспекты взаимосвязи между переменными [114,115]. Использование хеометрических подходов позволяет оперативно анализировать возможные сценарии изменчивости уровней загрязнения приземного слоя атмосферного воздуха.

Использование методов хеометрии перспективно для корректного анализа текущей, ретроспективной и прогнозной ситуации с требуемой пространственно-временной детализацией, что отвечает задачам риск-ориентированных технологий управления качеством атмосферного воздуха [116]. Использование методов хеометрии для оценки и прогноза уровня риска позволяет получить эффективный инструмент для принятия природоохранных решений [117-119]. Интеграция хеометрических подходов с ГИС данными о здоровье населения позволит в итоге получать мониторинговые данные с территориальной оценкой риска, что предоставляет органам власти мощный инструмент для обоснования воздухоохраных решений [76,120].

Хеометрические подходы позволяют оптимизировать структуру самих сетей инструментального мониторинга, повышая их репрезентативность при сокращении общих затрат. Кроме того, хеометрия может быть интегрирована с технологией экологических датчиков для разработки новых эффективных методов экологического мониторинга. Хеометрические методы, такие как методы многомерной калибровки (Partial Least Squares – PLS), лежат в основе работы многих современных газоанализаторов. Они позволяют по косвенному сигналу (например, оптическому или электрохимическому) с высокой частотой вычислять концентрации основных веществ, что кардинально решает проблему ретроспективности [121,122].

Различные методы в хеометрии обычно классифицируются на основе их подхода к исследованию массивов данных. Однако различные методы, как правило, частично перекрываются в зависимости от подходов к классификации [123,124]. Наиболее часто к перспективным для использования хеометрическим методам в системе экологического мониторинга относятся: многомерные модели, методы моделирования классов, дискриминантный анализ, анализ главных компонент (Principal Component Analysis – PCA), множественная линейная регрессия, иерархический агломеративный кластерный анализ, положительная матричная факторизация и искусственные нейронные сети (ИНС), включая нейросетевую кластеризацию.

Методы распознавания образов и классификации перспективны для выявления внутренней структуры данных без априорных гипотез или для построения предсказательных моделей на основе обучающих наборов.

Иерархический агломеративный кластерный анализ позволяет автоматически группировать пробы или точки отбора по степени сходства их химического состава. На практике это помогает зонировать территорию по типам или уровням загрязнения, выделяя зоны влияния различных источников.

Метод PCA – фундаментальный инструмент для сокращения размерности данных. Он преобразует множество коррелированных исходных переменных (концентраций веществ) в меньшее число новых, некоррелированных переменных

– главных компонент, которые несут основную информацию о вариативности системы [125]. Это позволяет визуализировать многомерные данные, выявлять аномальные значения, а также интерпретировать главные компоненты как индикаторы определенных типов антропогенного воздействия (первая компонента – «автотранспорт», вторая – «промышленные выбросы») [106].

Многомерная линейная регрессия (Multidimensional linear regression – MLR) и ее более сложные аналоги используются для построения количественных моделей, связывающих спектральные или иные косвенные данные с концентрациями основных загрязнителей. Это основа для создания калибровок портативных и дистанционных сенсоров, что критически важно для экологического мониторинга. Например, разработка методов «*in situ Raman*» или ИК-спектроскопии, подкрепленная хемометрическими калибровками, позволяет в реальном времени контролировать процессы в полевых условиях.

Достижения в области ИНС, позволят проводить более полную и адекватную текущую и прогнозную оценку уровней загрязнения атмосферного воздуха. Они дают возможность учитывать скрытую информацию, содержащуюся в многомерных данных [126-130].

Современный экологический мониторинг немыслим без данных дистанционного зондирования Земли (ДЗЗ). Хемометрия выступает связующим звеном между «картинкой» со спутника или БПЛА и конкретными химическими параметрами. PLS позволяют по спектральным данным ДЗЗ прогнозировать концентрации взвешенных веществ. Пространственная интерпретация результатов кластерного или факторного анализа в среде ГИС позволяет строить детальные карты экологического состояния и риска [121].

Хемометрия предоставляет инструмент для превращения растущих массивов разрозненных данных в целостное знание: для идентификации источников загрязнения, построения пространственно-временных моделей, создания основ для оперативного контроля и достоверного долгосрочного прогнозирования. Таким образом, хемометрия выступает не как вспомогательная методика, а как ядро методологической модернизации всей системы государственного экологического

мониторинга, переводя ее на качественно новый уровень, адекватный вызовам антропогенно трансформированной среды.

Для поиска скрытой информации, содержащейся в многомерных мониторинговых данных, наибольшие перспективы имеют ИНС.

### **1.7 Нейросетевые методы и модели для экологического мониторинга качества атмосферного воздуха**

Будучи универсальными аппроксиматорами [131-134], ИНС способны с высокой точностью воспроизводить скрытые функциональные связи, непосредственно извлекая их из эмпирических или симуляционных данных. В последнее время можно отметить рост применения нейросетевых методов для моделирования качества атмосферного воздуха. Первые работы в этом направлении датируются концом девяностых годов-началом нулевых [135]. Рост количества таких исследований на современном этапе связан с накоплением больших массивов данных дистанционного зондирования, развитием сетей мониторинга и повышением вычислительных мощностей. Актуальные исследования сосредоточены на создании гибридных моделей, где прогноз ИНС, обученной на исторических данных, уточняется с помощью физически обоснованных уравнений переноса, а также на решении обратных задач – оценке параметров источников выбросов по данным измерений концентраций. Таким образом, ИНС представляют собой мощный и динамично развивающийся инструмент для преодоления ограничений классических методик, позволяющий перейти к более точному, адаптивному и комплексному моделированию процессов загрязнения атмосферы в условиях сложной и изменчивой городской среды.

Для обработки временных рядов концентраций ЗВ наиболее эффективны рекуррентные сети (recurrent neural networks – RNN), особенно архитектуры типа долгой краткосрочной памяти (Long Short-Term Memory – LSTM), которые позволяют учитывать долгосрочные временные зависимости [136-139]. Для

пространственного моделирования могут применяться сверточные нейронные сети (convolutional neural networks – CNN) [140], также широко используются нейронные сети типа многослойный перцептрон (multilayer perceptrons – MLP).

MLP доказали высокую эффективность при решении задач прогнозирования по набору предикторов [141-146]. Обучение таких сетей производится на исторических данных, включающих концентрации загрязнителей, метеорологические параметры, информацию об источниках выбросов и т.д.

В исследованиях Тунаковой Ю.А., Новиковой С.В. и др. (2021) предложена нейросетевая технология для расчета приземных концентраций компонентов выбросов от полимерных производств. Авторы показали, что использование нейросетей позволяет значительно повысить точность расчетов по сравнению с регламентированными методиками [146].

Дель И.В. и Старченко А.В. разработали модель LSTM для прогнозирования концентрации частиц PM<sub>2.5</sub>. Модель, обученная на данных метеонаблюдений и предыдущих концентраций загрязнителей, демонстрирует среднюю абсолютную ошибку 2,34 мкг/м<sup>3</sup>, что подтверждает эффективность нейросетевого подхода для краткосрочного прогноза качества воздуха [147].

Кулакова Е.С. описывает разработку системы экологического мониторинга атмосферы, интегрированной с ИНС. Система включает SCADA-систему (supervisory control and data acquisition) для сбора данных в реальном времени, нейросетевой модуль для прогнозирования концентраций на различных высотах и интерфейс для оператора. Подчеркивается, что нейросеть способна обрабатывать большие объемы данных и выявлять сложные зависимости, повышая точность и оперативность мониторинга [148].

В работе, выполненной в Воронежском государственном лесотехническом университете, исследуется применение алгоритмов искусственного интеллекта для мониторинга загрязнения воздуха городским автотранспортом. Предлагается концепция комплексной системы экологического контроля, работающей в реальном времени и способной оперативно информировать население о критических изменениях качества воздуха [149].

Рощупкин Э.В. представляет нейросетевую модель прогноза загрязнения атмосферного воздуха на основе многослойного персептрона. Модель построена для прогнозирования концентрации СО с использованием временных рядов данных стационарного поста наблюдения. Автор подробно описывает этапы подготовки данных, обучения сети и тестирования, отмечая возможность получения достаточно точных прогнозов [141].

Таким образом, интеграция ИНС в практику экологического мониторинга обусловлена их уникальной способностью моделировать сложные, нелинейные взаимосвязи между множеством входных параметров. Это делает их незаменимыми для решения следующих прикладных задач:

1. Количественное определение ЗВ. Многослойные персептроны и нейронные сети с радиально – базисными функциями успешно применяются для калибровки и прогнозирования концентраций поллютантов в водах, почвах и воздухе. Например, в работе Маслова А.А. [150] продемонстрировано применение ИНС для определения взвешенных частиц и тяжелых металлов в воздухе и водных объектах из-за превышения допустимого содержания данных ЗВ. Для заданных условий наилучшие результаты получены с помощью трехслойного персептрона с алгоритмом обратного распространения.

2. Классификация и идентификация источников загрязнения. Самоорганизующиеся карты Кохонена и глубокие нейронные сети используются для определения происхождения источника загрязнения. В исследовании Плужникова В.В. [151] построенная карта использовалась для идентификации источников загрязнения при различных метеоусловиях.

Нейронные сети, особенно рекуррентные и сверточные сети, служат действенным инструментом для интерпретации сигналов сенсорных массивов [152]. ИНС, как методы хеометрии, находят конкретное воплощение в решении актуальных задач мониторинга [153,154]. Анализ возможностей и перспектив использования ИНС методов хеометрии для расчетного экологического мониторинга качества атмосферного воздуха приведен в таблице 1.4. Проведенный анализ показывает, что нейросетевые технологии обладают значительным

потенциалом для инновационного улучшения систем мониторинга качества атмосферного воздуха.

Таблица 1.4 – Обзор методов хеометрии

| Метод                                           | Описание                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | Достоинства                                                                                                                                                           | Недостатки                                                                        |
|-------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------|
| ИНС [135,155-157]                               | модели, состоящие из множества связанных нейронов (с весами синапсов, сумматором и функцией активации), наиболее перспективны: многослойный персептрон (для прогнозирования, расчетов) и самоорганизующиеся карты Кохонена (для кластеризации и зонирования)                                                                                                                  | использование экспериментальных данных только на этапе обучения; возможность работы с неточными и неполными данными; адаптация и доучивание                           | необходим значительный объем экспериментальных данных на этапе обучения модели    |
| Нечеткий логический вывод [158-160]             | модель расчета нечетких лингвистических понятий. Описывается тройкой (N,X,A), где N – имя переменной, X – универсальное множество (множество всех возможных значений переменной), A – нечеткое множество - подмножество X, лингвистическая переменная описывается пятеркой (N, T, X, G, P), где N-имя переменной; T - множество значений переменной (базовое терм-множество). | применение для разработки моделей экспертных мнений и оценок специалистов предметной области, возможность гибкой настройки системы, простота физической интерпретации | необходимость использования дополнительных методов для оценки адекватности модели |
| Гибридные структуры (нейро-нечеткие сети) [161] | сочетают свойства нескольких интеллектуальных подходов, например, нечеткие нейронные сети используют нечеткую логику для вывода, а параметры настраиваются алгоритмами обучения нейросетей                                                                                                                                                                                    | сочетают преимущества различных методов (например, наглядность нечеткой логики и обучаемость нейросетей), позволяют работать с неточной и неполной информацией        | недостатки обусловлены отсутствием составляющих структур                          |

Российские исследования демонстрируют успешное применение нейросетей для расчета концентраций от стационарных источников, краткосрочного прогнозирования уровня загрязнения, создания интегрированных мониторинговых систем и решения задач, связанных с автотранспортными выбросами. Дальнейшее развитие связано с интеграцией данных из разнородных источников, внедрением

передовых архитектур глубокого обучения и преодолением методологических пробелов. Реализация этих перспектив позволит создать эффективные, точные и оперативные системы контроля качества воздуха, что является необходимым условием для обеспечения экологической безопасности территорий и населения.

Хеометрия предоставляет инструмент для превращения растущих массивов разрозненных данных в целостное знание, выступая основанием методологической модернизации всей системы государственного экологического мониторинга [162-164]. Внедрение хеометрических методов в практику государственного мониторинга – не просто техническое усовершенствование, а стратегическая необходимость, которое позволит перейти к системе «интеллектуального» мониторинга, способной не только фиксировать, но и анализировать, прогнозировать и выдавать рекомендации по управлению воздействием.

Использование хеометрических методов позволит решать сложные мониторинговые задачи для действующей сети экологического мониторинга качества атмосферного воздуха. К таким задачам относятся обеспечение учета залповых выбросов, расчет концентраций парниковых газов с оценкой интенсивности фотохимических реакций в атмосферном воздухе, методическое обоснование формирования программы производственного экологического мониторинга.

### **1.8 Учет залповых выбросов при работе стационарных источников**

В соответствии с требованиями по нормированию в области охраны атмосферного воздуха, под залповыми выбросами понимаются непродолжительные и обычно во много раз превышающие по мощности средние выбросы [165]. Проведение полного учета залповых выбросов в атмосферный воздух при работе стационарных источников позволит обеспечить эффективность работ, направленных на минимизацию негативного воздействия производственной деятельности на качество окружающей среды в целях обеспечения экологического благополучия территорий [166]. Для объектов химической, нефтехимической и

нефтеперерабатывающей промышленности наличие таких выбросов часто предусматривается технологическим регламентом и обусловлено проведением специфических стадий производственных процессов. К ним можно отнести продувку технологического оборудования, освобождение трубопроводов от газов через свечи рассеивания, пусковые и остановочные работы, сбросы из предохранительных клапанов (таблица 1.5).

Таблица 1.5 – Классификация источников залповых выбросов, характерных для предприятий химического, нефтехимического и нефтеперерабатывающего промышленности комплекса

| Категория источника                                   | Краткое описание                                                                                                               | Характеристика                                                                                                       | Пример                                                                                                                                                 |
|-------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Технологические (регламентные) залповые выбросы       | осуществляются в соответствии с технологическим регламентом; параметры известны заранее; возможность планирования и управления | для этих выбросов характерны предсказуемость, возможность планирования и, следовательно, потенциальная управляемость | продувка аппаратов инертным газом, освобождение оборудования перед ремонтом, сбросы из предохранительных клапанов при регламентном превышении давления |
| Пусковые и остановочные залповые выбросы              | связаны с нестационарными режимами работы (пуск, остановка, переходные процессы)                                               | параметры таких выбросов могут существенно отличаться от стационарного режима                                        | розжиг производственных печей, продувка и подтопка конвертеров, вывод на режим технологических линий                                                   |
| Залповые выбросы при срабатывании систем безопасности | сброс газов через свечи рассеивания, клапаны, факелы при превышении давления в аппаратах                                       | эпизодические выбросы, условно прогнозируемые                                                                        | срабатывание предохранительных клапанов, открытие свечей рассеивания при росте давления выше установленных показателей                                 |

Параметры залповых выбросов существенно отличаются от выбросов при штатном режиме работы оборудования, а различие значений максимальных разовых выбросов при залповых и штатных ситуациях может отличаться на несколько порядков. Однако в рамках существующей системы нормирования учет залповых выбросов зачастую не обеспечивается в полной мере. В целях реализации эффективных мер по охране атмосферного воздуха необходимо выявление при

проведении инвентаризации всех функционирующих на объекте стационарных источников загрязнения, в том числе источников залповых выбросов. Прогнозирование последствий залповых выбросов опасных газов имеет большое значение для обеспечения экологической безопасности на в зоне влияния предприятий химической и нефтегазовой отраслей [167]. Традиционно для проектирования систем рассеивания, таких как свечи, и оценки зон распространения выбросов используются нормативные документы и руководства по безопасности факельных систем. Однако, анализ реальных данных, показывает, что существующие методики не всегда дают адекватную картину пространственно-временного распределения примесей.

### **1.9 Оценка поступления парниковых газов расчетным путем**

Основой эффективной стратегии снижения углеродного следа предприятия является точное отслеживание, распределение и измерение выбросов парниковых газов (ПГ) [168]. Парниковые выбросы предприятий делятся на три группы [169].

Прямые выбросы парниковых газов (Score 1) представляют собой эмиссии, источник которых непосредственно является частью производственного процесса предприятия. Эти выбросы формируются в результате физических или химических процессов, при использовании корпоративного транспорта и в ходе технологических операций [169].

Косвенные выбросы категории Score 2 включают парниковые газы от потребителей энергии, такой как электроэнергия, пар, тепло или охлаждение, вырабатываемой за пределами площадки и потребляемой предприятием. Например, электроэнергия, приобретаемая у коммунальной компании, централизованное отопление, пар, используемый в промышленных процессах, вырабатываются за пределами предприятия, поэтому выбросы парниковых газов при их производстве считаются косвенными [170].

Косвенные выбросы категории Score 3 определяются жизненным циклом товаров и услуг (закупка сырья и комплектующих, доставка, продажа,

использование, утилизация продукции по окончании срока ее службы, утилизация отходов, деловые поездки и т.д.) [171-173].

За рубежом, особенно в ЕС и США, продолжают динамично разрабатываться методы определения углеродного следа и оценки жизненного цикла продукции, создаются калькуляторы выбросов парниковых газов [174], подобные инструменты создаются и в России [175]. Цифровые инструменты позволяют оценить выбросы парниковых газов как от отдельного индивидуума, так и от целого домохозяйства или производства [176].

Эффективное моделирование поступления парниковых газов невозможно без применения стандартизированных и верифицированных методов расчета. В РФ базовым документом, регламентирующим количественную оценку выбросов и поглощений ПГ, является приказ Минприроды России от 27.05.2022 № 371 «Об утверждении методик количественного определения объемов выбросов парниковых газов и поглощений парниковых газов» [177]. Данный документ содержит детализированные отраслевые методики, охватывающие широкий спектр деятельности, и является приоритетным для использования при проведении инвентаризации выбросов в рамках государственного учета.

В настоящее время в открытом доступе отсутствуют программные продукты, позволяющие оценить выбросы парниковых газов в области Score 1, 2 и 3. В 2020 г. подготовлен проект Стратегии долгосрочного развития экономики РФ с низким уровнем выбросов парниковых газов до 2050 г. Данная стратегия основана на двух сценариях развития: инерционном и целевом (интенсивном) [178].

Инерционный сценарий предполагает постепенную модернизацию и внедрение НДТ, в то время как целевой направлен на сокращение выбросов парниковых газов на 60 % к 2050 г. по сравнению с уровнем 2019 г. и достижение углеродной нейтральности не позднее 2060 г. Ключевым инструментом реализации этой стратегии является бенчмаркинг – сравнение удельных выбросов предприятий с целью установления нормативов и стимулирования перехода на более экологичные технологии.

Формируемая в России нормативно-методическая база в области углеродного

регулирования постепенно охватывает все аспекты учета ПГ. Ключевым инструментом для расчета углеродного следа продукции (УСП) до 01.06.2025 г. служил не действующий в настоящее время стандарт ПНСТ 646-2022, который предусматривал использование как абсолютного, так и относительного методов оценки [179].

Абсолютный метод направлен на расчет конкретного значения углеродного следа единицы «зеленой» продукции в т  $\text{CO}_2$ -эквивалента. Он включает в себя учет всех прямых и косвенных выбросов, а также поглощений ПГ на этапах производства и транспортировки. Относительный метод используется для сравнения УСП «зеленой» продукции с традиционным аналогом и демонстрирует величину снижения воздействия на климат. Расчеты в рамках УСП проводятся с учетом трех уровней охвата выбросов.

Для расчета прямых выбросов (Score 1) используются отраслевые методики, утвержденные приказом Минприроды России № 371. Они охватывают широкий спектр деятельности: стационарное сжигание топлива, нефтепереработку, производство цемента, извести, металлургические процессы, обращение с отходами (захоронение, сжигание, биологическая переработка), очистку сточных вод и другие.

Расчет косвенных энергетических выбросов (Score 2) регламентируется отдельной методикой (Приказ Минприроды России № 330 от 2017 г.) и может проводиться двумя методами: региональным и рыночным. Региональный метод использует средние коэффициенты выбросов для энергосистемы региона, в котором расположено предприятие. Рыночный метод применяется, если электроэнергия приобретается по двусторонним договорам, и учитывает конкретные параметры ее генерации. Выбор метода зависит от договорных условий предприятия.

Для расчета транспортных выбросов (часть Score 3) стандарт ПНСТ 646-2022 предлагал упрощенный подход на основе данных о среднем расстоянии перевозок, виде транспорта и расходе топлива. Также существует добровольный стандарт ГОСТ Р 57262-2016 [180], который предусматривает более детальный расчет

выбросов для всех видов транспорта с учетом полного цикла предоставления транспортной услуги. Однако из-за своей сложности и требовательности к данным он применяется реже, в основном транспортными компаниями, для которых эти выбросы являются ключевыми.

Отдельно стоит методика расчета поглощения ПГ, утвержденная Минприроды России. Она является наиболее трудоемкой и требует определения множества вспомогательных параметров для оценки депонирования углерода лесными и сельскохозяйственными угодьями, почвами, водно-болотными угодьями и землями населенных пунктов. Сложность заключается в необходимости учета широкого спектра природно-климатических факторов и видов землепользования, которые существенно варьируются в разных регионах страны.

В отличие от расчета выбросов, где основой являются данные о потреблении топлива или объеме продукции, оценка поглощения требует сбора и обработки обширной информации по каждому конкретному участку земли. Для лесных экосистем ключевыми параметрами являются: породный состав и возраст древостоев, классы бонитета, типы леса и почв, запас растущей древесины, а также объемы естественного отмирания и рубок. Расчет ведется с применением специальных коэффициентов перевода запаса древесины в запасы углерода, которые также дифференцированы по породам и регионам.

Для сельскохозяйственных земель учитывается углерод, аккумулируемый в почве и биомассе многолетних насаждений. Здесь критическое значение имеют тип сельскохозяйственной деятельности (пашня, пастбище, многолетние насаждения), система земледелия, виды выращиваемых культур и применяемые агротехнические практики (например, использование удобрений). Особую сложность представляет динамический характер поглощения, который сильно зависит от погодных условий и меняющихся методов хозяйствования [181].

Методология предполагает использование многоуровневого подхода. На первом, базовом уровне используются обобщенные региональные коэффициенты. На более высоких уровнях применяются детализированные, локализованные

модели и данные дистанционного зондирования Земли, такие как российская методика региональной оценки бюджета углерода лесов (РОБУЛ), которая соответствует международным стандартам и используется для национальной отчетности [182].

Таким образом, современная методологическая база России для моделирования поступления парниковых газов представляет собой многоуровневую систему, сочетающую обязательные нормативные акты (приказы Минприроды России) и добровольные стандарты (ПНСТ, ГОСТ), которые могут быть дополнены передовыми международными наработками для повышения точности и сопоставимости результатов, особенно в таких сложных для учета категориях, как косвенные выбросы и поглощения углерода экосистемами.

Верификация интенсивности поступления и поглощения парниковых газов требует достоверных методов анализа их содержания в приземном слое атмосферного воздуха. Инструментальные измерения концентраций парниковых газов крайне ограничены на территориях урбоэкосистем, что делает необходимым разработку расчетных методов с использованием хеометрических подходов.

### **1.10 Хеометрический подход для оценки концентраций парникового газа диоксида углерода**

В настоящее время именно диоксид  $\text{CO}_2$  является основной причиной изменения климата вследствие постоянного роста объема сжигания ископаемого топлива [183]. При этом в нашей стране измерения концентраций  $\text{CO}_2$  имеют значительные пространственно-временные ограничения. Измерения концентраций  $\text{CO}_2$  на территории РТ проводятся только на трех автоматизированных станциях наблюдений МЭПР РТ. В настоящий момент сведения о выбросах парниковых газов по территории РТ есть в разрезе отраслей промышленности, но не по отдельным предприятиям и источникам выбросов. Рассчитать концентрации  $\text{CO}_2$  по регламентированным расчетным методикам не представляется возможным,

поскольку данные инвентаризации источников выбросов, являющиеся входными параметрами методик расчета рассеивания, отсутствуют [184].

Использование нейросетевых подходов для расчета концентраций примесей в приземном слое атмосферного воздуха позволяет учесть все трудно моделируемые скрытые зависимости между факторами, формирующими уровень загрязнения приземного слоя атмосферного воздуха [185].

Автоматические посты, проводящие инструментальные измерения, фиксируют содержание  $\text{CO}_2$ , в котором присутствует не только углекислый газ, попавший в воздух из стационарных источников выбросов, но и его часть, образовавшаяся при вторичных превращениях  $\text{CO}$ . На этом основании значения концентрации  $\text{CO}$  можно применять как входные параметры для вычисления концентрации  $\text{CO}_2$ . При этом в модели необходимо учитывать процессы превращения веществ в атмосферном воздухе.

В состав отходящих газов, образующихся при сжигании любого вида топлива в реальных условиях, входит ряд ЗВ, среди которых  $\text{NO}_x$ .  $\text{NO}_x$  образуются вследствие окисления атмосферного азота или азотсодержащих топливных примесей. Указанные вещества являются неизменными «спутниками»  $\text{CO}_2$  в реальных промышленных процессах горения, что влечет наличие некоторой взаимосвязи между концентрациями этих газов.

Использование нейросетевых технологий для расчета концентраций примесей в приземном слое атмосферного воздуха позволяет учесть все трудно моделируемые скрытые зависимости между факторами, формирующими уровень загрязнения приземного слоя атмосферного воздуха, что делает их привлекательными в задачах моделирования распространения углекислого газа.

Точность нейросетевых моделей, в свою очередь, определяется адекватным выбором значимых предикторов [186-189]. В частности, уже установлено наличие тесных связей между приземными концентрациями компонентов выбросов, коэффициентами трансформации и концентрациями  $\text{O}_3$ , характеризующими интенсивность вторичных химических реакций в атмосферном воздухе [190-192].

### 1.11 Учет вторичных химических реакций в атмосферном воздухе

В атмосферном воздухе под действием солнечной энергии непрерывно идут различные химические и фотохимические реакции, в результате которых образуются новые вещества. Воздушный бассейн можно сравнить с огромным реактором, непрерывно производящим одни вещества и разлагающим на исходные компоненты другие. Важнейшей особенностью химических процессов, протекающих в атмосферном воздухе, является образование долгоживущих метастабильных атомов и молекул [193,194]. Активация молекул происходит в результате поглощения электромагнитного излучения. Такого рода реакции называются фотохимическими.

Основными типами фотохимических реакций в атмосфере являются:

- фотоионизация ( $\text{NO} + h\nu \rightarrow \text{NO}^+ + e^-$ );
- фотодиссоциация ( $\text{O}_2 + h\nu \rightarrow \text{O}\cdot + \text{O}\cdot$ );
- фотовозбуждение ( $\text{H}(^2\text{s}) + h\nu \rightarrow \text{H}(^2\text{p})$ );
- флуоресценция или люминесценция ( $\text{Na}(^2\text{p}) \rightarrow \text{Na}(^2\text{s}) + h\nu$ );
- радиационная рекомбинация ( $\text{O}^+ + e^- \rightarrow \text{O}\cdot + h\nu$ );
- фотоотлипание ( $\text{O}^- + h\nu \rightarrow \text{O}\cdot + e^-$ );
- радиационное прилипание ( $e^- + \text{O}_3 \rightarrow \text{O}^- + h\nu$ ) и др.

Вторичные химические реакции в атмосферном воздухе в основном идут по радикальному механизму. Постоянно действующим источником радикалов в атмосферном воздухе является внешнее ионизирующее излучение, постоянно присутствующий радиационный фон, колебания которого связаны не только с космогенными факторами, но с и техногенным воздействием [195]. Поэтому для учета интенсивности вторичных химических реакций, в атмосферном воздухе, целесообразно использовать значения гамма-фона, измеряемые на автоматизированных станциях наблюдений за загрязнением атмосферы.

Гамма-фон (естественный или искусственный), представляющий собой поток высокоэнергетических фотонов, вызывает различные химические трансформации, радиационно-химические реакции и структурные изменения

веществ в атмосферном воздухе. В настоящее время известно, что мощность дозы гамма-излучения непостоянна во времени и пространстве, зависит от разных факторов, таких как время суток, сезон г., физико-географических и метеорологических особенностей территории [196,197]. Наблюдаемые изменения гамма-фона во время осадков, отмеченные авторами [198], вероятно, также связаны с возрастанием интенсивности поступления аэрозолей на поверхность земли, содержащих короткоживущие радиогенные изотопы, поскольку отмеченные возрастания гамма-фона носят непродолжительный характер, совпадающий со временем выпадения осадков [199].

Изменение гамма-фона было неоднократно зарегистрировано именно в периоды выпадения осадков [200-202], что подтверждает значимость использования данного предиктора при расчете приземных концентраций примесей. Гамма-излучение, особенно во время грозových разрядов, ионизирует азот и кислород в атмосферном воздухе. Это способствует образованию  $\text{NO}_x$ , которые участвуют в разрушении озонового слоя и формировании вторичного загрязнения, например,  $\text{O}_3$  на уровне земли. Ионы, созданные гамма-излучением, могут выступать в роли центров конденсации, что способствует увеличению количества атмосферных аэрозолей, влияя на прозрачность атмосферы. Повышенный гамма-фон часто указывает на наличие в приземном слое не только радона, но и других техногенных радионуклидов.

### **1.12 Заключение по главе 1**

Атмосферный воздух является ключевым компонентом урбоэкосистемы, загрязнение которого оказывает негативное воздействие на почву, водные объекты, растительность и здоровье населения. Показано, что действующая система экологического мониторинга качества воздуха несмотря на длительные ряды наблюдений, обладает рядом системных ограничений: недостаточная плотность сети, преобладание ручных методов и ограниченный перечень измеряемых веществ. Показано, что в г. Казань параллельно функционирует три независимые

системы мониторинга (ФГБУ «УГМС РТ», МЭПР РТ, Управление Роспотребнадзора по РТ), при этом фиксируются расхождения в данных по одним и тем же ЗВ и территориям.

Выявлено, что традиционные расчетные методы имеют ограничения, связанные с необходимостью введения эмпирических поправочных коэффициентов и неспособностью адекватно описывать нелинейные и многофакторные зависимости между источниками выбросов, условиями переноса и полями концентраций ЗВ. Обосновано, что перспективным направлением устранения ограничений является внедрение хеометрических подходов, в частности, ИНС, которые способны учитывать скрытую информацию, содержащуюся в многомерных данных, а также получать мониторинговую информацию с высокой точностью.

Показано, что развитие действующей государственной системы наблюдений за качеством атмосферного воздуха необходимо за счет локальной системы экологического контроля, осуществляемой промышленными предприятиями в зоне влияния своих источников выбросов – ПЭК. При этом отсутствуют методические документы для реализации ПЭК, в частности для определения таких важных параметров, как периодичность контроля, обоснование точек наблюдений и режима измерений, порядок определения ЗВ, подлежащих контролю. Отдельное внимание уделено проблемам учета залповых выбросов, отсутствию их четкого законодательного определения и, как следствие, их некорректному исключению из процедур нормирования и расчета рассеивания.

Также показана актуальность разработки расчетных методов для определения концентраций парникового газа  $\text{CO}_2$  в условиях отсутствия инструментальных измерений, при этом обоснована необходимость учета вторичных химических реакций в атмосферном воздухе. Таким образом, литературный обзор обосновывает актуальность разработки новых методических подходов, реализованных в последующих главах.

## **Глава 2. Материалы и методы исследования**

### **2.1 Характеристика системы автоматизированных станций контроля загрязнения атмосферного воздуха г. Казань**

В работе использованы результаты измерений пяти АСКЗА, входящих в территориальную систему экологического мониторинга МЭПР РТ. Станции работают в непрерывном автоматическом режиме и обеспечивают регулярное получение оперативной информации о концентрации загрязняющих веществ в отличие от применения ручного пробоотбора.

Техническое обеспечение АСКЗА состоит из павильонов станций, измерительного комплекса (анализаторы, системы отбора проб воздуха, метеорологические датчики), системы обработки и передачи данных (модемы, компьютеры), систем жизнеобеспечения станций (электропитание, отопление и кондиционирование воздуха, охранная сигнализация, освещение) [203]. В г. Казани находится 5 АСКЗА:

АСКЗА-1 – с. Осиново, территория ООО «Тепличный комбинат «Майский»;

АСКЗА-2 – Приволжский район г. Казани – ул. Павлюхина, 75;

АСКЗА-3 – Авиастроительный район г. Казани – ул. Максимова 76;

АСКЗА-4 – Ново-Савиновский район г. Казани – ул. Четаева, 26;

АСКЗА-5 – Кировский район г. Казань – пр. Ильгама Шакирова, 3.

Расположение АСКЗА представлено на рисунке 2.1.

Размещение АСКЗА на территории г. Казани осуществлялось с учетом результатов сводных расчетов рассеивания выбросов, позволяющих выявить зоны наибольшей антропогенной нагрузки [204].

Станции работают в автоматическом режиме: для основных примесей значения разовых концентраций измеряются с осреднением за каждые 20 минут – это 72 значения за сутки работы станции, для специфических примесей реже – от 32 значений за сутки работы в зависимости от настроек станции.

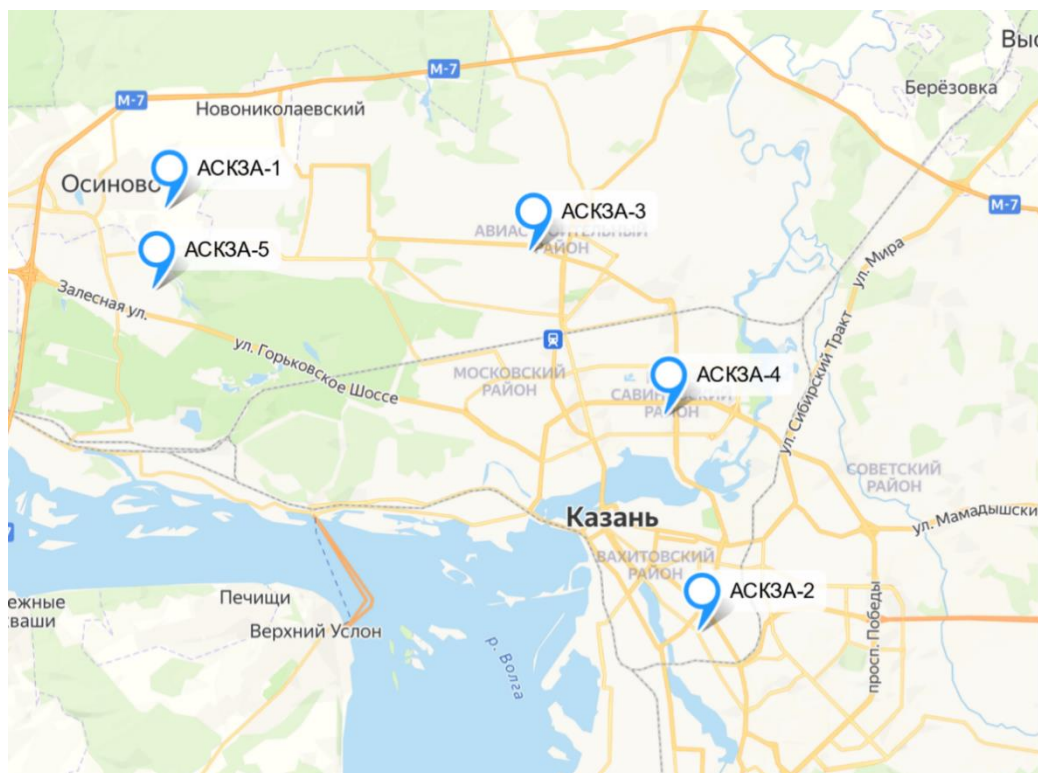


Рисунок 2.1 – Карта расположения АСКЗА в г. Казань

Помимо концентраций загрязняющих веществ, на АСКЗА регистрируются метеорологические параметры: температура воздуха, атмосферное давление, относительная влажность, скорость и направление ветра, интенсивность осадков. Также на станциях измеряется гамма-фон, характеризующий уровень ионизирующего излучения в приземном слое атмосферы.

## 2.2 Методы оценки показателей качества атмосферного воздуха

Для определения степени загрязненности атмосферного воздуха применялись критерии, предусмотренные руководящим документом РД 52.04.667-2005 [64]. СИ определен отношением наибольшей измеренной максимально разовой концентрации примеси к ПДК<sub>м.р.</sub> Наибольшая повторяемость превышений (НП) рассчитывалась как частота превышения ПДК<sub>м.р.</sub> по данным наблюдений за год. ИЗА для отдельной примеси рассчитывали по формуле:

$$\text{ИЗА}_i = (C_{\text{ст}}/\text{ПДК}_{\text{сс}})^{\text{Копасн}},$$

где:  $K_{\text{опасн}}$  – коэффициент, зависящий от класса опасности вещества (для 1-го класса – 1,5; 2-го – 1,3; 3-го – 1,0; 4-го – 0,85).

Комплексный индекс загрязнения атмосферы (КИЗА5) определяли как сумму ИЗА для пяти веществ с наибольшими значениями ИЗА [205].

Для характеристики рассеивающей способности атмосферы использовали метеорологический потенциал загрязнения атмосферы (МПЗА) – это показатель, который показывает, насколько эффективно атмосфера способна рассеивать или, наоборот, накапливать вредные выбросы от предприятий и транспорта, а также усовершенствованный метеорологический потенциал рассеивающей способности атмосферного воздуха (1/УМПА), учитывающий более широкий набор метеорологических факторов [206-209]. Расчеты МПЗА и 1/УМПА выполнен по данным измерений метеостанций в составе АСКЗА МЭПР РТ, недостающие данные дополнялись по данным метеорологических наблюдений метеостанции Казань-опорная [210].

### **2.3 Методическое и программное обеспечение проведения расчетов рассеивания загрязняющих веществ**

Для оценки уровней загрязнения, создаваемых выбросами промышленных предприятий, использовалась программа «Эколог-Город» версии 4.70 (фирма «Интеграл», г. Санкт-Петербург), реализующую «Методы расчетов рассеивания выбросов вредных (загрязняющих) веществ в атмосферном воздухе» (МРР-2017) [211]. МРР-2017 базируются на решении уравнения атмосферной диффузии с обоснованными допущениями и введением полуэмпирических коэффициентов, что делает данные методы расчета рассеивания доступными для решения широкого круга практических задач.

Сравнительный анализ математической модели Гаусса и программного продукта УПРЗА «Эколог», проведенный К.В. Завитаевым и О.В. Ягольницером, показывает, что российская методика адаптирована для практических задач и

учитывает различные факторы, такие как влияние застройки на формирование полей концентраций и особенности рассеивания от низких источников [212].

Программа позволяет выполнять два основных типа расчетов: максимальных разовых концентраций (для оценки кратковременных уровней загрязнения) и долгопериодных средних концентраций (среднегодовых, среднесуточных), а также специфические расчеты с фиксированными метеорологическими условиями. В настоящей работе преимущественно использовался модуль расчета максимальных приземных концентраций.

При выполнении расчетов рассеивания в работе использовались данные источников выбросов из материалов инвентаризации выбросов предприятия химической отрасли, а также результаты собственной инвентаризации выбросов автотранспорта при его движении по автодорогам г. Казань. Расчетная сетка охватывала территорию размером 10000x10000 м. Расчеты выполнены для трех режимов работы предприятия: штатного, с учетом залповых выбросов, с учетом залповых и аварийных выбросов.

#### **2.4 Хемометрические и статистические методы обработки данных для решения задач экологического мониторинга**

В работе использован комплекс хемометрических методов для обработки многомерных данных экологического мониторинга. Хемометрика представляет собой применение математических и статистических методов для получения и анализа химических данных, а также планирование химического эксперимента и численное моделирование.

Основным хемометрическим инструментом в работе являлись ИНС MLP. Они представляют собой вычислительную модель, вдохновленную принципами организации биологических нейронных систем. MLP, благодаря наличию скрытых слоев и нелинейных функций активации, является универсальным аппроксиматором, способным моделировать произвольные непрерывные функции.

MLP состоит из одного входного слоя, одного или нескольких скрытых слоев и выходного слоя. В каждом слое может находиться любое количество нейронов. Сигналы между нейронами передаются по синаптическим связям. Биологический нейрон принимает сигналы через дендриты, обрабатывает их в теле и передает результат через аксон к синапсам. Аналогично, искусственный нейрон формализует этот процесс: входные сигналы ( $x_1, x_2, \dots, x_n$ ) умножаются на весовые коэффициенты ( $w_1, w_2, \dots, w_n$ ), характеризующие «силу» синаптической связи, суммируются с добавлением смещения (bias,  $b$ ), после чего результат преобразуется функцией активации  $f(\cdot)$  для генерации выходного сигнала  $y$  (рисунок 2.2).

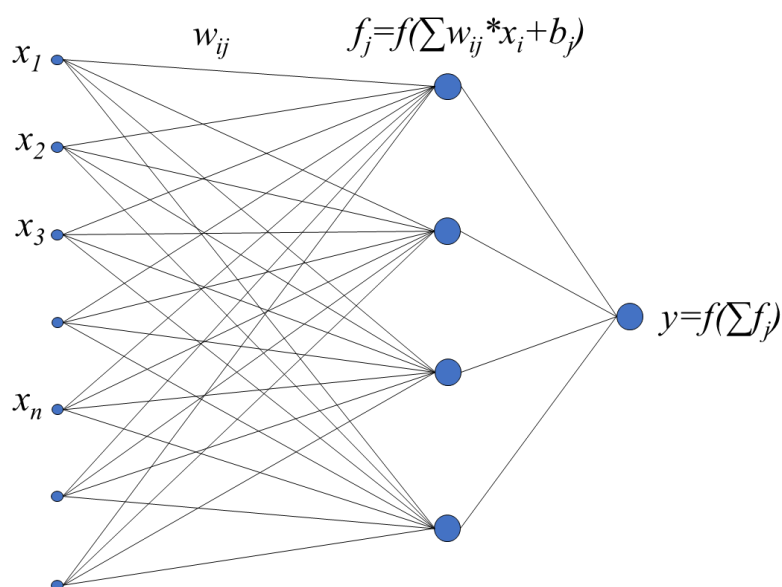


Рисунок 2.2 – Архитектура персептрона с семью входными параметрами, одним скрытым слоем, одним выходным нейроном

Для  $i$ -го нейрона в слое  $k$  входной сигнал функции активации рассчитывается как:

$$z_i^{(k)} = b_i^{(k)} + \sum_j (w_{ij}^{(k)} a_j^{(k-1)}),$$

Выходной сигнал нейрона (активация):

$$a_i^{(k)} = f^{(k)}(z_i^{(k)}),$$

где:  $a_j^{(k-1)}$  – выходные сигналы нейронов предыдущего  $(k-1)$ -го слоя;

$w_{ij}^{(k)}$  – вес связи от  $j$ -го нейрона слоя  $k-1$  к  $i$ -му нейрону слоя  $k$ ;

$b_i^{(k)}$  – смещение  $i$ -го нейрона слоя  $k$ ;

$f^{(k)}(\cdot)$  – функция активации для слоя  $k$ .

MLP характеризуется послойной организацией с полносвязной структурой (каждый нейрон слоя  $k$  соединен со всеми нейронами слоя  $k+1$ ) и включает три принципиальных типа слоев:

1. Входной слой – не выполняет вычислений, служит для приема и распределения входных признаков. Количество нейронов равно размерности входного вектора данных.

2. Скрытые слои (один или более) – осуществляют преобразование признаков. Именно наличие этих слоев позволяет сети выявлять сложные нелинейные зависимости. Каждый скрытый слой выполняет две операции: линейное преобразование (взвешенная сумма входов) и нелинейное преобразование (применение функции активации).

3. Выходной слой – формирует итоговый результат сети. Количество нейронов выходного слоя определяется задачей.

Функции активации – критически важный элемент, обеспечивающий нелинейные свойства сети.

Наиболее часто используются следующие типы функций активации:

1. Сигмоида (логистическая функция):  $\sigma(z) = 1/(1 + e^{-z})$ :

– Диапазон:  $(0, 1)$ ;

– Проблемы: «затухание градиентов» при обучении, несимметричный выход.

2. Гиперболический тангенс:  $\tanh(z) = (e^z - e^{-z})/(e^z + e^{-z})$ :

– Диапазон:  $(-1, 1)$ ;

– Устраняет проблему несимметричности сигмоиды.

3. Softmax (для выходного слоя при классификации):

–  $\sigma(z)_i = e^{z_i} / \sum_j e^{z_j}$ ;

– Преобразует выходы в вероятностное распределение.

Процесс вычисления выхода сети для заданного входного вектора осуществляется последовательным применением операций слоев:

1. Инициализация:  $a^{(0)} = x$  (входной вектор).

2. Для каждого слоя  $k = 1..L$ :

– Вычисление взвешенной суммы:  $z^{(k)} = W^{(k)}a^{(k-1)} + b^{(k)}$ ,  $W^{(k)}$  - вектор весов размерности  $(n_k \times 1)$ ,  $n_k$  – количество нейронов в слое  $k$ ;

– Применение активации:  $a^{(k)} = f^{(k)}(z^{(k)})$ .

3. Выход сети:  $\hat{y} = a^{(L)}$ .

Обучение MLP заключается в оптимизации свободных параметров сети - весовых коэффициентов и смещений  $\{W^{(k)}, b^{(k)}\}$  для минимизации функции потерь  $L(\hat{y}, y)$ , где  $\hat{y}$  – рассчитанное нейронной сетью значение выхода,  $y$  – истинное значение, представленное нейронной сети для обучения.

Алгоритм обратного распространения ошибки [213] – эффективный метод обучения нейронной сети, в котором коррекция (увеличение или уменьшение) весовых коэффициентов  $\delta^{(k)}$  рассчитывается путем вычисления градиентов функции потерь по всем параметрам сети:

1. Прямой проход: вычисление выхода  $\hat{y}$  и значения функции потерь  $L$ ;
2. Обратный проход: вычисление градиентов  $\partial L / \partial w$  для каждого параметра;
3. Обновление весовых коэффициентов для следующей итерации.

Архитектура MLP может отличаться количеством слоев и нейронов в каждом слое. Количество входов и выходов всегда продиктовано поставленной задачей. Количество скрытых слоев и нейронов в них чаще всего подбирается исходя из необходимой скорости и качества обучения. Малое количество нейронов может приводить к невозможности получения искомого качественного отображения вход-выход. Чрезмерное увеличение количества скрытых слоев и нейронов в них может способствовать переобучению нейронной сети, а также приводит к снижению скорости обучения, т.е. увеличению количества итераций, требуемых для достижения необходимого качества обучения. Следует также отметить, что чем больше свободных параметров содержится в нейронной сети, тем более обширные данные требуются для ее обучения.

Проектирование архитектуры требует решения компромисса: увеличение

количества скрытых слоев и нейронов повышает емкость модели, но также риск переобучения и вычислительные затраты.

Для проектирования и обучения нейросетевых моделей использованы указанные ниже программные средства.

KNIME Analytics Platform – аналитическая платформа с интеграцией библиотеки Keras для построения MLP-моделей прогноза среднесуточных концентраций  $\text{NO}_x$ . Платформа позволяет выполнять предобработку данных (нормализацию, фильтрацию), визуализацию результатов и статистическую оценку качества моделей.

Статистическую обработку данных, проектирование и обучение нейросетевых моделей для расчета концентраций  $\text{NO}_2$  и  $\text{CO}_2$  проводился с применением программного пакета Statistica 10 в комплекте поставки «Automated Neural Networks + DataMiner».

Кластеризация относится к классу хеометрических методов многомерного анализа данных и применяется для выявления внутренней структуры данных, группировки объектов по степени сходства их характеристик без использования априорной информации о принадлежности к классам. В работе использованы два метода кластеризации:

1. Метод k-средних (k-means) – применен для кластеризации наблюдений по метеорологическим параметрам и гамма-фону при моделировании залповых выбросов, а также для кластеризации контрольных точек санитарно-защитной зоны при формировании программы ПЭК.

Принцип работы алгоритма заключается в разбиении множества наблюдений на заранее заданное число кластеров  $k$ . На начальном этапе случайным образом выбираются центры кластеров. Далее для каждого наблюдения вычисляется расстояние до центров кластеров, после чего объект относится к тому кластеру, центр которого расположен ближе всего. После распределения всех наблюдений центры кластеров пересчитываются как средние значения признаков объектов, вошедших в соответствующий кластер. Процедура повторяется итерационно до стабилизации положения центров кластеров.

Математически алгоритм минимизирует суммарную внутрикластерную дисперсию:

$$J = \sum_{i=1}^k \sum_{x \in C_i} \|x - \mu_i\|^2,$$

где:  $k$  – число кластеров;

$C_i$  – множество объектов  $i$ -го кластера;

$\mu_i$  – центр кластера;

$\|x - \mu_i\|$  – расстояние между объектом и центром кластера.

В результате работы алгоритма формируются группы наблюдений, внутри которых объекты максимально похожи друг на друга по набору признаков.

2. Самоорганизующиеся карты Кохонена (SOM) – использованы для нейросетевой кластеризации и визуализации многомерных данных при формировании программы ПЭК. SOM представляют собой тип искусственных нейронных сетей, обучающихся без учителя и позволяющих отображать многомерные данные на двумерную карту с сохранением топологических свойств. Расчеты реализованы в пакете Statistica 10.

Применение кластерных методов в рамках хеометрического подхода позволяет:

- выявлять скрытую структуру в многомерных данных экологического мониторинга;
- автоматически группировать точки наблюдения по схожести уровней загрязнения;
- выделять зоны с различными типами и уровнями антропогенного воздействия;
- сокращать размерность задачи управления качеством воздуха путем применения типовых решений для однородных кластеров.

РСА, как хеометрический подход, использован для снижения размерности данных и визуализации многомерных наблюдений, а также для анализа

разделимости кластеров, полученных методом k-средних. Метод PCA позволяет преобразовать исходное пространство признаков в новое пространство меньшей размерности, сохраняя при этом максимальный объем информации о структуре данных. Основная идея метода заключается в поиске новых осей координат (главных компонент), вдоль которых наблюдается наибольший разброс данных. Если выбрать две главные компоненты, то это позволит изобразить многомерные признаки на двумерной плоскости, и затем провести их анализ и физическую интерпретацию.

Две главные компоненты представляют собой линейные комбинации исходных признаков вида:

$$\begin{aligned} Z_1 &= a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n, \\ Z_2 &= b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_nx_n, \end{aligned}$$

где:  $x_1, x_2, \dots, x_n$  – исходные признаки;

$Z_1, Z_2$  – главные компоненты;

$a_i, b_i$  – коэффициенты преобразования.

После стандартизации признаков исходный набор данных преобразовывается в пространство двух главных компонент:

$$X \rightarrow (Z_1, Z_2),$$

где:  $Z_1$  – первая главная компонента;

$Z_2$  – вторая главная компонента.

Визуализация результатов PCA выполнена в среде Statistica 10 с использованием встроенных инструментов графического анализа. Первая главная компонента отражает наиболее значимую комбинацию исходных признаков, объясняющую максимальную долю общей дисперсии данных. Вторая главная компонента ортогональна первой и описывает максимально возможную оставшуюся вариативность. В результате преобразования исходное пространство

признаков было спроецировано на плоскость, что позволило визуально оценить наличие группировки наблюдений и разделимость выделенных кластеров.

## 2.5 Методы оценки риска здоровью населения

Для оценки опасности загрязнения атмосферного воздуха использованы подходы, основанные на методологии оценки риска здоровью населения, соответствующей рекомендациям ВОЗ и Р 2.1.10.3968-23 [60].

Расчет отношения фактических концентраций к их референтным значениям позволяют определить коэффициент опасности (HQ):

$$HQ = C/RfC,$$

где:  $C$  – фактическая концентрация, мг/м<sup>3</sup>;

$RfC$  – референтная (безопасная) концентрация при хроническом ингаляционном воздействии, мг/м<sup>3</sup>.

При этом предполагается, что если рассчитанный HQ конкретного вещества не превышает единицы, то и вероятность развития у человека вредных эффектов при ежедневном поступлении вещества в заданной концентрации (дозе) незначительна и такое воздействие характеризуется как допустимое.

Для оценки опасности ряда веществ, при условии их одномоментного поступления одним и тем же путем, используют индекс опасности, определяемый суммированием коэффициентов опасности отдельных примесей:

$$HI = \sum HQ_i,$$

где:  $HQ_i$  – коэффициенты опасности для отдельных компонентов смеси воздействующих веществ.

В связи с этим обстоятельством, целесообразно совмещать расчет HQ в конкретных точках отбора проб воздуха с вероятностью обнаружения высоких

концентраций примесей в той или иной точке. Такой показатель мы называем вероятностным коэффициентом опасности (pHQ), и он является произведением доли «опасной» концентрации на вероятность ее обнаружения в заданной точке:

$$pHQ_i = HQ_i \times R_k,$$

где:  $HQ_i$  – коэффициент опасности  $i$ -го вещества;

$R$  – вероятность того, что в кластере  $k$ , к которому относится данная точка,

$HQ_i$  этого вещества, будет больше 1.

Вероятностный критерий опасности основан на показателе  $HQ$ , используемом при расчете риска здоровью, в том числе и при аэрогенном воздействии в ходе поступления ЗВ с вдыхаемым воздухом, однако обладает значительно более высокой информативностью, так как объединяет собой два основных подхода для установления порогов воздействия:

- статистический, который оценивает вариации, динамику и распределение концентраций ЗВ;
- биологический, который исходит из возможности неблагоприятного эффекта на биологические объекты (организмы, ткани, системы) тех или иных концентраций ЗВ.

Универсальность подхода состоит в том, что для абсолютно любого показателя, характеризующего воздействие на целевой объект, можно рассчитать его относительную интенсивность используя вариационные характеристики распределения значений этого показателя в ряду его наблюдений, позволяющие определить вариационный порог – медиану, квартильный размах и т.д., то есть такое статистически оправданное значение, которое обозначает меру изменчивости этого показателя. Критерием опасности является вероятность превышения этого порога. При этом, как уже отмечалось ранее, для оценки концентраций примесей можно использовать значения  $HQ$ , порогом для расчета которого являются референтные значения.

Данный подход соответствует требованиям оценки риска, поскольку позволяет оценивать опасность как характеристику нарастания вероятности неблагоприятного исхода.

При расчете вероятностного критерия опасности оценивается соотношение апостериорной и априорной вероятностей, учитывающих вероятность рискового события (вероятность превышения порога) в конкретной области пространства, относительно информации о том, насколько часто это событие происходило во всех областях пространства.

Алгоритм определения такой вероятности выглядит следующим образом:

$D$  – событие, состоящее в том, что мы рассматриваем полную совокупность кортежей экспериментально измеренных показателей по всей территории. По условию задачи  $R(D) = 1$ ;

$D_i$  – событие, состоящее в том, что мы рассматриваем совокупность кортежей экспериментально измеренных показателей внутри заданной зоны  $i$  ( $i = \overline{1 \dots n}$ );

$S$  – событие, состоящее в том, что при рассмотрении обнаружено превышение допустимого порогового значения хотя бы по одному показателю хотя бы в одном кортеже данных.

Вероятность события  $S$  можно рассчитать, как полную вероятность по формуле:

$$R(S) = \sum_{i=1}^n p(D_i)p(S|D_i).$$

Будем считать, что мы исследуем полную совокупность данных, то есть  $P(D) = 1$ . Тогда события  $D_i$  образуют полную группу:

$$\sum_{i=1}^n p(D_i) = R(D) = 1.$$

Для расчета апостериорной вероятности обнаружения превышения порога при рассмотрении конкретной зоны  $i$  можно применить формулу Байеса:

$$R(D_i|S) = \frac{p(D_i)p(S|D_i)}{p(S)}.$$

Отсюда получаем:

$$R(D_i|S) = \frac{p(D_i)p(S|D_i)}{\sum_{i=1}^n p(D_i)p(S|D_i)} = \frac{p(D_i)p(S|D_i)}{\sum_{i=1}^n p(S|D_i)},$$

где:  $p(S|D_i)$  – априорная вероятность того, что если превышение произошло, то это случилось в зоне  $D_i$ .

Рассчитаем вероятность  $p(D_i)$  при помощи формулы определения вероятности как отношение условных мощностей множеств  $D_i$  и всего рассматриваемого набора  $D$ :

$$p(D_i) = \frac{n_i}{N}.$$

Здесь в качестве  $n_i$  может выступать количество кортежей данных в зоне  $D_i$ , а  $N$  – общее количество кортежей измеренных данных. Либо в качестве  $n_i$  можно принимать площадь территории области  $D_i$ , тогда  $N$  – вся площадь исследуемого района и т.п.

В результате, мы можем рассчитать вероятности превышения концентраций примесей их пороговых концентраций в пределах разных зон, а в качестве обобщающего показателя мы предлагаем использовать вероятность превышения порога хотя бы по одному из оцениваемых параметров. Для обобщения вероятностей, в зависимости от конкретной задачи, можно использовать как теорему умножения вероятностей для независимых событий, так и теорему сложения вероятностей для совместных событий.

Показатель вероятностного критерия опасности хорошо вписывается в предлагаемый алгоритм формирования программы ПЭК, так как можно задавать желательные, приемлемые и неприемлемые его градации.

Важным достоинством этого показателя является его устойчивость к различию числа наблюдений случаев превышения референтных величин ( $HQ > 1$ ), что делает его более гибким и объективным при сравнительных оценках коэффициента опасности, рассчитанного для разных участков исследования, что является важнейшей задачей при управлении риском. Значения  $rHQ$  агрегируют информацию о доле «опасной» концентрации и частоте превышения референтных значений, являясь показателем, наиболее полно отражающим риск неблагоприятного воздействия ЗВ на здоровье населения. Теоретически, его значения можно ограничить пределами от 0 до 1, указывающими в первом случае на полное отсутствие опасности (например, в случаях не обнаружения примеси в пробе или отсутствия хотя бы одного превышения за весь период наблюдения), а во втором случае, на однозначно неблагоприятный эффект (например, в случае превышения референтных значений во всех пробах). То есть, своеобразным порогом низкой и высокой опасности можно считать значение  $rHQ = 0,5$ . На практике, бывает полезным использование безразмерных коэффициентов, не ограниченных верхним пределом. В этом случае, предоставляется дополнительная информация о кратности негативного воздействия, что бывает необходимо при ранжировании опасностей. Кроме того, можно рассчитать обобщенные значения  $rHQ_{об}$ , которые являются вероятностью того, что случайно взятый образец будет относиться к данной точке и хотя бы по одной из рассмотренных примесей будет наблюдаться превышение референтных значений. По значениям  $rHQ$  ранжируются примеси и выстраиваются по приоритетности контроля в рамках программы ПЭК.

Таким образом, вероятностный критерий опасности учитывает вероятности превышения примесями их пороговых концентраций в пределах разных зон. Показатель хорошо вписывается в программу ПЭК, так как можно задавать желательные, приемлемые и неприемлемые его градации, соответствует требованиям оценки риска, поскольку позволяет оценивать опасность, как характеристику нарастания вероятности неблагоприятного исхода.

## 2.6 Определение показателей залповых выбросов

Для идентификации залповых выбросов в работе использован пороговый критерий, основанный на сопоставлении расчетных концентраций, полученных по данным инвентаризации выбросов и ПДК. Поскольку погрешность инструментальных методов измерения концентраций загрязняющих веществ в атмосферном воздухе составляет 20-30 %, любые отклонения в этом диапазоне могут быть обусловлены погрешностью измерений, а не реальным увеличением эмиссии. Поэтому для достоверной идентификации факта залпового выброса установлен нижний порог значимого превышения расчетной концентрации на уровне 30 %. Реальные залповые выбросы, как показано в работе, дают превышения на порядки, что многократно перекрывает установленный порог.

## 2.7 Заключение по главе 2

В главе представлена характеристика объектов, методического и программного обеспечения, использованного для проведения экспериментальных и расчетных исследований. Дано описание системы АСКЗА по г. Казань, включая их расположение, режим и перечень контролируемых ЗВ.

Охарактеризовано методическое и программное обеспечение для проведения расчетов рассеивания ЗВ. Основополагающим нормативным документом определены МРР-2017, реализованные в программном комплексе УПРЗА «Эколог-Город» (фирма «Интеграл»). Показано, что сводные расчеты загрязнения атмосферы, выполняемые в УПРЗА «Эколог-Город», являются основой для определения фоновых концентраций, выявления зон максимального воздействия и разработки мероприятий по снижению выбросов.

Подробно изложены принципы построения и обучения ИНС для решения задач экологического мониторинга. Описана архитектура MLP, функции активации. Обоснован выбор MLP как универсального аппроксиматора, способного моделировать нелинейные зависимости между концентрациями ЗВ,

метеорологическими параметрами и другими факторами.

Дополнительно представлены методы кластеризации, PCA, программного обеспечения и визуализации результатов. Охарактеризованы методы оценки риска здоровью населения и методы идентификации залповых выбросов.

Таким образом, глава 2 создает методическую и инструментальную базу для последующего анализа данных мониторинга, разработки методики формирования программы ПЭК, учета залповых выбросов и расчета концентраций парникового газа CO<sub>2</sub>. Все использованные методы соответствуют современным требованиям, обеспечивают достоверность и воспроизводимость полученных результатов.

### **Глава 3. Результаты инструментального мониторинга качества атмосферного воздуха г. Казань**

#### **3.1 Характеристика качества атмосферного воздуха на территории г. Казани в ретроспективе лет по данным автоматизированных станций наблюдений**

Оценка качества атмосферного воздуха в динамике лет представляет собой важнейшую задачу для определения приоритетных загрязнителей и выявления тенденций изменения экологической ситуации [214-216].

Проведен анализ результатов измерений пяти АСКЗА МЭПР РТ, расположенных в г. Казани. Выбор временного интервала (2016-2024 гг.) позволяет выявить устойчивые тенденции в изменении качества атмосферного воздуха за последние девять лет.

Анализ проводился для перечня примесей из 13 наименований, измерения которых проводятся на каждой из пяти станций: азота оксид ( $\text{NO}$ ), азота диоксид ( $\text{NO}_2$ ), аммиак ( $\text{NH}_3$ ), бензол ( $\text{C}_6\text{H}_6$ ), сероводород ( $\text{H}_2\text{S}$ ), м-,п-ксилол ( $\text{C}_8\text{H}_{10}$ ), о-ксилол ( $\text{C}_8\text{H}_{10}$ ), серы диоксид ( $\text{SO}_2$ ), стирол ( $\text{C}_8\text{H}_8$ ), толуол ( $\text{C}_7\text{H}_8$ ), углерода оксид ( $\text{CO}$ ), фенол ( $\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$ ), этилбензол ( $\text{C}_8\text{H}_{10}$ ).

Для оценки динамики уровней загрязнения атмосферы определялись следующие величины: максимальная разовая концентрация, среднегодовая концентрация, на основе которых впоследствии оценивались СИ, НП, ИЗА, КИЗА5 [64].

Для определения условий рассеивания применялись метеорологические потенциалы: МПЗА [217] и УМПА [218]. Далее вместо последнего показателя использован  $1/\text{УМПА}$ .

Полученные по результатам обработки данных измерений всех станций контроля загрязнения максимальные значения максимальных разовых концентраций и усредненные по всем станциям значения среднегодовых концентраций представлены в таблицах 3.1 и 3.2, соответственно.

Таблица 3.1 – Максимальные по станциям значения максимальных разовых концентраций ЗВ, мг/м<sup>3</sup>

| Год      | NO  | NO <sub>2</sub> | NH <sub>3</sub> | C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> | H <sub>2</sub> S | C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> (м-,п-) | C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> (о-) | SO <sub>2</sub> | C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> | C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> | CO | C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OH | C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> |
|----------|-----|-----------------|-----------------|-------------------------------|------------------|----------------------------------------|-------------------------------------|-----------------|-------------------------------|-------------------------------|----|----------------------------------|--------------------------------|
| ПДК м.р. | 0,4 | 0,2             | 0,2             | 0,3                           | 0,008            | 0,2                                    | 0,3                                 | 0,5             | 0,04                          | 0,6                           | 5  | 0,01                             | 0,02                           |
| 2016     | 1,7 | 0,6             | 1,5             | 0,5                           | 0,035            | 0,1                                    | 0,4                                 | 0,1             | 0,03                          | 0,5                           | 92 | н/д                              | 0,01                           |
| 2017     | 1,0 | 0,5             | 0,8             | 0,1                           | 0,033            | 0,1                                    | 0,1                                 | 0,1             | 0,02                          | 0,3                           | 43 | 0,02                             | 0,03                           |
| 2018     | 4,2 | 0,6             | 0,7             | 0,2                           | 0,038            | 0,1                                    | 0,0                                 | 0,0             | 0,01                          | 0,3                           | 55 | 0,05                             | 0,01                           |
| 2019     | 1,9 | 0,3             | 0,9             | 0,2                           | 0,026            | 0,2                                    | 0,1                                 | 0,2             | 0,02                          | 0,3                           | 81 | 0,03                             | 0,07                           |
| 2020     | 1,0 | 0,5             | 1,0             | 1,6                           | 0,030            | 0,3                                    | 0,2                                 | 0,2             | 0,07                          | 1,7                           | 48 | 0,01                             | 0,02                           |
| 2021     | 2,1 | 0,7             | 0,2             | 0,1                           | 0,046            | 0,0                                    | 0,1                                 | 0,6             | 0,07                          | 0,3                           | 52 | 0,00                             | 0,02                           |
| 2022     | 0,8 | 0,4             | 0,3             | 0,1                           | 0,040            | 0,0                                    | 0,3                                 | 0,4             | 0,10                          | 0,1                           | 11 | 0,01                             | 0,07                           |
| 2023     | 0,8 | 0,3             | 0,2             | 0,4                           | 0,047            | 0,1                                    | 0,1                                 | 0,2             | 0,04                          | 0,2                           | 27 | 0,00                             | 0,02                           |
| 2024     | 0,5 | 0,3             | 0,2             | 0,4                           | 0,141            | 0,3                                    | 0,1                                 | 0,3             | 0,04                          | 0,3                           | 8  | 0,00                             | 0,03                           |

Таблица 3.2 – Усредненные по станциям значения среднегодовых концентраций ЗВ, мг/м<sup>3</sup>

| Год             | NO   | NO <sub>2</sub> | NH <sub>3</sub> | C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> | H <sub>2</sub> S | C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> (м-,п-) | C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> (о-) | SO <sub>2</sub> | C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> | C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> | CO  | C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OH | C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> |
|-----------------|------|-----------------|-----------------|-------------------------------|------------------|----------------------------------------|-------------------------------------|-----------------|-------------------------------|-------------------------------|-----|----------------------------------|--------------------------------|
| ПДК с.г. (с.с.) | 0,06 | 0,04            | 0,04            | 0,005                         | 0,002            | 0,1                                    | -                                   | 0,05            | 0,002                         | 0,4                           | 3,0 | 0,003                            | 0,04                           |
| 2016            | 0,02 | 0,04            | 0,01            | 0,001                         | 0,001            | 0,0                                    | 0,0                                 | 0,02            | 0,001                         | 0,0                           | 0,8 | н/д                              | 0,00                           |
| 2017            | 0,04 | 0,03            | 0,00            | 0,001                         | 0,001            | 0,0                                    | 0,0                                 | 0,01            | 0,000                         | 0,0                           | 0,4 | 0,000                            | 0,00                           |
| 2018            | 0,02 | 0,07            | 0,01            | 0,000                         | 0,001            | 0,0                                    | 0,0                                 | 0,00            | 0,000                         | 0,0                           | 0,4 | 0,000                            | 0,00                           |
| 2019            | 0,01 | 0,03            | 0,01            | 0,001                         | 0,001            | 0,0                                    | 0,0                                 | 0,00            | 0,000                         | 0,0                           | 0,5 | 0,000                            | 0,00                           |
| 2020            | 0,02 | 0,03            | 0,01            | 0,001                         | 0,001            | 0,0                                    | 0,0                                 | 0,01            | 0,000                         | 0,0                           | 0,4 | 0,000                            | 0,00                           |
| 2021            | 0,02 | 0,04            | 0,00            | 0,001                         | 0,001            | 0,0                                    | 0,0                                 | 0,00            | 0,000                         | 0,0                           | 0,4 | 0,000                            | 0,00                           |
| 2022            | 0,02 | 0,05            | 0,00            | 0,000                         | 0,000            | 0,0                                    | 0,0                                 | 0,00            | 0,000                         | 0,0                           | 0,3 | 0,000                            | 0,00                           |
| 2023            | 0,02 | 0,06            | 0,00            | 0,002                         | 0,000            | 0,0                                    | 0,0                                 | 0,01            | 0,000                         | 0,0                           | 0,3 | 0,000                            | 0,00                           |
| 2024            | 0,03 | 0,04            | 0,00            | 0,003                         | 0,001            | 0,0                                    | 0,0                                 | 0,01            | 0,000                         | 0,0                           | 0,3 | 0,000                            | 0,00                           |

Согласно результатам обработки данных измерений, превышения максимальных разовых предельно допустимых концентраций (ПДКм.р.) на станциях контроля загрязнения чаще всего фиксируются для основных примесей (NO, NO<sub>2</sub> и CO) и ряда специфических (H<sub>2</sub>S и NH<sub>3</sub>). Редко фиксируются превышения ПДКм.р. SO<sub>2</sub>, бензола, ксилолов, стирола, толуола, фенола и этилбензола.

По среднегодовым концентрациям превышения предельно допустимых концентраций (ПДКс.г.) фиксировались значительно реже. В основном такие

случаи наблюдались для  $\text{NO}_2$ . Реже, дважды для каждой из примесей, превышения были зафиксированы для  $\text{NO}$ ,  $\text{H}_2\text{S}$  и бензола.

С учетом нахождения в атмосферном воздухе одновременно целого ряда примесей, которые могут характеризоваться различной пространственной и временной изменчивостью, для диагностики общего уровня загрязнения воздуха используются статистические показатели СИ, НП, ИЗА (КИЗА5).

Значения индексов, полученных по данным наблюдений на всех станциях, представлены в таблице 3.3.

Таблица 3.3 – СИ, НП, ИЗА, полученные по данным наблюдений на всех станциях

| Год   | NO    | NO <sub>2</sub> | NH <sub>3</sub> | C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> | H <sub>2</sub> S | C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> (м-,п-) | C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> (о-) | SO <sub>2</sub> | C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> | C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> | CO    | C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OH | C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> |
|-------|-------|-----------------|-----------------|-------------------------------|------------------|----------------------------------------|-------------------------------------|-----------------|-------------------------------|-------------------------------|-------|----------------------------------|--------------------------------|
| СИ    |       |                 |                 |                               |                  |                                        |                                     |                 |                               |                               |       |                                  |                                |
| 2016  | 4,34  | 3,02            | 7,50            | 1,63                          | 4,34             | 0,59                                   | 1,40                                | 0,25            | 0,68                          | 0,91                          | 18,30 | н/д                              | 0,35                           |
| 2017  | 2,53  | 2,54            | 4,17            | 0,44                          | 4,06             | 0,34                                   | 0,27                                | 0,14            | 0,38                          | 0,56                          | 8,66  | 1,50                             | 1,50                           |
| 2018  | 10,55 | 2,95            | 3,65            | 0,57                          | 4,71             | 0,26                                   | 0,06                                | 0,08            | 0,35                          | 0,53                          | 11,06 | 4,80                             | 0,70                           |
| 2019  | 4,80  | 1,68            | 4,48            | 0,53                          | 3,23             | 0,98                                   | 0,31                                | 0,35            | 0,58                          | 0,45                          | 16,22 | 2,90                             | 3,30                           |
| 2020  | 2,46  | 2,48            | 5,00            | 5,29                          | 3,79             | 1,33                                   | 0,58                                | 0,37            | 1,83                          | 2,81                          | 9,66  | 0,60                             | 0,95                           |
| 2021  | 5,25  | 3,56            | 1,02            | 0,38                          | 5,78             | 0,18                                   | 0,38                                | 1,25            | 1,73                          | 0,58                          | 10,40 | 0,10                             | 1,00                           |
| 2022  | 2,07  | 1,82            | 1,37            | 0,44                          | 4,98             | 0,03                                   | 0,90                                | 0,84            | 2,60                          | 0,10                          | 2,20  | 1,30                             | 3,30                           |
| 2023  | 2,09  | 1,73            | 0,91            | 1,19                          | 5,89             | 0,43                                   | 0,21                                | 0,37            | 1,00                          | 0,40                          | 5,30  | 0,30                             | 1,20                           |
| 2024  | 1,35  | 1,63            | 1,18            | 1,29                          | 17,66            | 1,32                                   | 0,24                                | 0,63            | 1,10                          | 0,47                          | 1,54  | 0,10                             | 1,30                           |
| НП, % |       |                 |                 |                               |                  |                                        |                                     |                 |                               |                               |       |                                  |                                |
| 2016  | 0,09  | 1,17            | 0,13            | 0,01                          | 0,50             | 0,00                                   | 0,01                                | 0,00            | 0,00                          | 0,00                          | 2,15  | н/д                              | 0,00                           |
| 2017  | 1,33  | 0,09            | 0,17            | 0,00                          | 0,90             | 0,00                                   | 0,00                                | 0,00            | 0,00                          | 0,00                          | 0,23  | 0,05                             | 0,05                           |
| 2018  | 1,03  | 8,86            | 0,45            | 0,00                          | 0,98             | 0,00                                   | 0,00                                | 0,00            | 0,00                          | 0,00                          | 1,17  | 0,01                             | 0,00                           |
| 2019  | 0,06  | 1,01            | 1,51            | 0,00                          | 0,74             | 0,00                                   | 0,00                                | 0,00            | 0,00                          | 0,00                          | 2,05  | 0,40                             | 0,12                           |
| 2020  | 0,36  | 1,43            | 1,31            | 0,01                          | 1,07             | 0,01                                   | 0,00                                | 0,00            | 0,01                          | 0,01                          | 2,74  | 0,00                             | 0,00                           |
| 2021  | 0,15  | 0,50            | 0,01            | 0,00                          | 0,63             | 0,00                                   | 0,00                                | 0,14            | 0,04                          | 0,00                          | 2,16  | 0,00                             | 0,00                           |
| 2022  | 0,52  | 0,71            | 0,02            | 0,00                          | 0,05             | 0,00                                   | 0,00                                | 0,00            | 0,01                          | 0,00                          | 0,04  | 0,01                             | 0,02                           |
| 2023  | 1,29  | 1,07            | 0,00            | 0,03                          | 1,84             | 0,00                                   | 0,00                                | 0,00            | 0,00                          | 0,00                          | 0,57  | 0,00                             | 0,01                           |
| 2024  | 0,32  | 0,17            | 0,01            | 0,09                          | 3,85             | 0,23                                   | 0,00                                | 0,00            | 0,08                          | 0,00                          | 0,05  | 0,00                             | 0,11                           |
| ИЗА   |       |                 |                 |                               |                  |                                        |                                     |                 |                               |                               |       |                                  |                                |
| 2016  | 0,25  | 0,92            | 0,19            | 0,12                          | 0,18             | 0,01                                   | –                                   | 0,34            | 0,19                          | 0,00                          | 0,32  | н/д                              | 0,00                           |
| 2017  | 0,60  | 0,68            | 0,11            | 0,08                          | 0,49             | 0,00                                   | –                                   | 0,22            | 0,02                          | 0,00                          | 0,17  | 0,01                             | 0,00                           |
| 2018  | 0,39  | 1,66            | 0,20            | 0,04                          | 0,50             | 0,00                                   | –                                   | 0,10            | 0,00                          | 0,00                          | 0,16  | 0,00                             | 0,00                           |
| 2019  | 0,25  | 0,72            | 0,29            | 0,12                          | 0,53             | 0,01                                   | –                                   | 0,07            | 0,01                          | 0,00                          | 0,21  | 0,01                             | 0,01                           |
| 2020  | 0,26  | 0,64            | 0,33            | 0,12                          | 0,40             | 0,00                                   | –                                   | 0,15            | 0,01                          | 0,00                          | 0,19  | 0,00                             | 0,00                           |
| 2021  | 0,31  | 1,10            | 0,14            | 0,06                          | 0,38             | 0,00                                   | –                                   | 0,09            | 0,02                          | 0,01                          | 0,19  | 0,00                             | 0,00                           |
| 2022  | 0,34  | 1,21            | 0,10            | 0,03                          | 0,11             | 0,00                                   | –                                   | 0,05            | 0,02                          | 0,00                          | 0,13  | 0,00                             | 0,00                           |
| 2023  | 0,38  | 1,38            | 0,10            | 0,35                          | 0,14             | 0,00                                   | –                                   | 0,13            | 0,06                          | 0,01                          | 0,15  | 0,00                             | 0,00                           |
| 2024  | 0,45  | 0,93            | 0,09            | 0,58                          | 0,25             | 0,01                                   | –                                   | 0,11            | 0,07                          | 0,00                          | 0,14  | 0,00                             | 0,00                           |

Согласно принятой в РД 52.04.667–2005 [64] градации, уровень загрязнения воздуха считается повышенным при КИЗА5 от 5 до 6, СИ менее 5 и НП менее 20 %; высоким – при КИЗА5 от 7 до 13, СИ от 5 до 10, НП от 20 % до 50 %; очень высоким – при КИЗА5 не менее 14, СИ более 10, НП более 50 %. Если КИЗА5, СИ и НП попадают в разные градации, то степень загрязнения атмосферы оценивается по КИЗА5.

Значения СИ и НП указывают, насколько характерны факты локальных превышений ПДКм.р. Как можно видеть, полученные значения СИ часто находятся в градациях повышенного, высокого и очень высокого загрязнения. Значения НП достигают градации повышенного загрязнения. Другими словами, локальные разовые концентрации отдельных примесей иногда могут достигать высоких и очень высоких значений, но повторяемость таких случаев по городу чаще находится в градациях низких или, реже, повышенных значений.

Значения ИЗА характеризуют уже средние (хронические) уровни загрязнения. Превышающие единицу значения этого показателя за весь срок наблюдений фиксировались только для  $\text{NO}_2$ .

Для определения КИЗА5 ЗВ были выстроены в ранжированный ряд по результатам расчета ИЗА для различных примесей на каждом посту. В итоге был получен следующий ряд из пяти веществ по городу в порядке убывания их значимости:  $\text{NO}_2 > \text{NO} > \text{H}_2\text{S} > \text{CO} > \text{NH}_3$ .

Обобщенные значения СИ и НП, а также полученные КИЗА5 представлены в таблице 3.4.

Таблица 3.4 – Обобщенные значения СИ, НП, КИЗА5

| Год   | 2016  | 2017 | 2018  | 2019  | 2020 | 2021 | 2022 | 2023 | 2024  |
|-------|-------|------|-------|-------|------|------|------|------|-------|
| СИ    | 18,30 | 8,66 | 11,06 | 16,22 | 9,66 | 10,4 | 4,98 | 5,89 | 17,66 |
| НП    | 2,15  | 1,33 | 8,86  | 2,05  | 2,74 | 2,16 | 0,71 | 1,84 | 3,85  |
| КИЗА5 | 1,86  | 2,04 | 2,91  | 2,00  | 1,83 | 2,13 | 1,89 | 2,16 | 1,86  |

Значения индексов СИ, НП и КИЗА5 находятся в различной градации. Соответственно, итоговая степень загрязнения атмосферы оценивается по КИЗА5 как низкая (РД 52.04.667–2005).

При рассмотрении всего временного ряда 2016-2024 гг. отмечен небольшой тренд на снижение КИЗА5 при его линейном построении. Это вызвано влиянием повышения его значения в 2018 г., в свою очередь, вероятно, обусловленного ухудшением метеорологических условий для рассеивания атмосферных примесей в этот период [219]. В период с 2020 по 2024 гг. наблюдается сохранение КИЗА5 приблизительно на одном уровне в пределах низкой степени загрязнения. Как было указано выше, вместе с параметрами выбросов на состояние атмосферного воздуха важнейшее влияние оказывает комплекс метеорологических факторов, способствующих рассеиванию или накоплению вредных веществ в приземном слое атмосферного воздуха.

Рассмотрим результаты расчетов среднегодовых потенциалов загрязнения воздуха (МПЗА, 1/УМПА) и их взаимосвязь с уровнями загрязнения. Для расчетов локальных потенциалов использовались результаты измерений метеорологических условий метеостанциями в составе АСКЗА МЭПР РТ. Недостающие данные дополнялись из архива метеорологических наблюдений метеостанции Казань-опорная [220]. Данная метеостанция располагается в черте города, но на открытой подготовленной площадке, отвечающей требованиям к соответствующим наблюдениям.

Результат расчета МПЗА, 1/УМПА, усредненных по АСКЗА, представлен в таблице 3.5.

Таблица 3.5 – Значения МПЗА, 1/УМПА

| Год    | 2016 | 2017 | 2018 | 2019 | 2020 | 2021 | 2022 | 2023 | 2024 |
|--------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| МПЗА   | 6,51 | 2,75 | 4,4  | 2,7  | 2,99 | 4,02 | 4,33 | 6,38 | 4,52 |
| 1/УМПА | 0,21 | 0,16 | 0,25 | 0,15 | 0,14 | 0,22 | 0,19 | 0,2  | 0,2  |

На рисунке 3.1 значения потенциалов МПЗА, 1/УМПА сопоставлены с полученными значениями КИЗА5. Каждый показатель был нормирован своим максимальным значением.

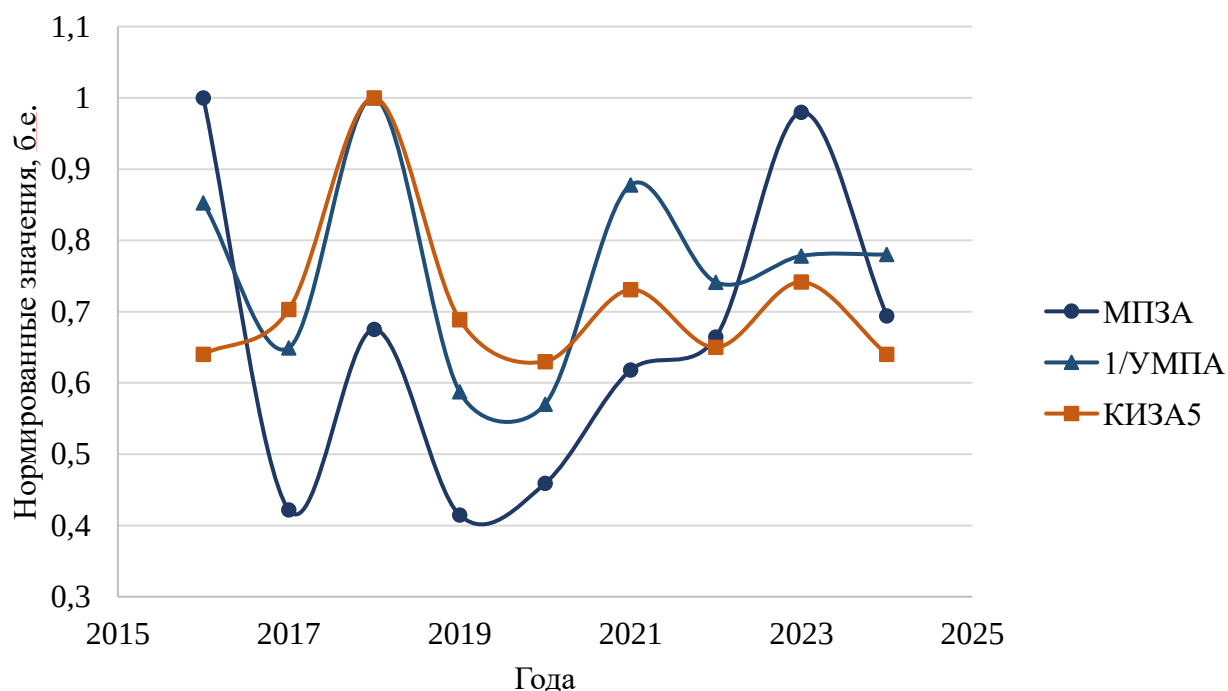


Рисунок 3.1 – Нормированные значения МПЗА, 1/УМПА и КИЗА5

Можно допустить наличие определенной взаимосвязи метеорологических потенциалов и показателя среднего загрязнения атмосферного воздуха. При этом полученные значения коэффициента корреляции Пирсона для пар «МПЗА – КИЗА5» и «1/УМПА – КИЗА5» различны и составляют 0,05 (очень слабая связь) и 0,66 (средняя связь,  $p \leq 0,1$ ).

### 3.2 Выявление значимых факторов, формирующих уровни загрязнения приземного слоя атмосферного воздуха на территории исследуемой урбоэкосистемы

Г. Казань, являясь крупным промышленным центром с населением более одного миллиона человек, характеризуется высокой транспортной нагрузкой и наличием масштабных производств химической, машиностроительной и прочих

отраслей промышленности, а также теплоэнергетики, что определяет сложный спектр факторов, формирующих уровни загрязнения атмосферного воздуха [219,221].

На территории г. Казани насчитывается более 10 тыс. стационарных источников загрязнения атмосферного воздуха, суммарный выброс которых составляет порядка 70 тыс. т в год. Среди стационарных источников ведущими загрязнителями являются такие предприятия, как ОАО «Казаньоргсинтез», Казанские ТЭЦ-1, 2, ООО «Казанский завод силикатных стеновых материалов», ПАО «Казанский вертолетный завод» и АО «Нэфис Косметикс». Основными веществами, имеющими наибольший удельный вес в выбросах стационарных источников, выступают углеводороды, CO, SO<sub>2</sub> и NO<sub>x</sub> [222].

Статистические показатели для стационарных источников загрязнения атмосферного воздуха сформированной сводной базы данных приведены в таблицах 3.6 и 3.7.

Таблица 3.6 – Распределение стационарных источников выбросов по типам (с учетом зимних и залповых источников)

|                                      |                |
|--------------------------------------|----------------|
| Количество предприятий               | 277            |
| Количество источников, шт, %         | 10146 (100 %)  |
| Источники с орг. выбросом, кол-во, % | 6976 (68,76 %) |
| Источники с неорг. выбросом, кол-, % | 3170 (31,24 %) |

Таблица 3.7 – Распределение стационарных источников выбросов по высоте

| Высота   | Количество, %  |
|----------|----------------|
| 0-10 м   | 6482 (63,89 %) |
| 11-20 м  | 2590 (25,53 %) |
| 21-30 м  | 775 (7,64 %)   |
| 31-50 м  | 259 (2,55 %)   |
| 51-100 м | 29 (0,29 %)    |
| >100 м   | 11 (0,11 %)    |

Вместе с тем, исследования последних лет свидетельствуют о возрастающей роли автотранспорта в формировании уровней загрязнения атмосферного воздуха.

Автотранспорт выступает основным источником загрязнения воздушного бассейна городов, что подтверждается исследованиями, проведенными на территории РТ [223].

Как показали исследования в структуре транспортного потока г. Казань преобладают легковые автомобили – 91,91 % от общего числа автотранспортных средств. Доля пассажирского крупногабаритного автотранспорта (автобусы массой более 3,5 т) составляет 1,48 % от общего числа транспорта на территории города. Доля грузового автотранспорта в целом по городу составляет 4,17 %. Доля автофургонов и микроавтобусов до 3,5 т по городу составляет 2,44 %. Общая структура транспортных потоков г. Казань на основе сводной базы данных приведена на рисунке 3.2.



Рисунок 3.2 – Общая структура транспортных потоков г. Казань

Наиболее интенсивное движение автотранспорта осуществляется по основным автодорогам города: пр. Победы, пр. Универсиады, пр. Ф. Амирхана, пр. Х. Ямашева, ул. Декабристов, ул. Н. Ершова, Оренбургский тракт, ул. Н. Назарбаева, ул. Чистопольская и др.

Для объективной характеристики уровней загрязнения необходимо учитывать не только результаты измерений концентраций примесей, но и метеорологические параметры, определяющие условия их рассеивания или накопления в приземном слое атмосферы [224].

Территория г. Казани характеризуется значительной неоднородностью уровней загрязнения атмосферного воздуха, что обусловлено как особенностями расположения источников выбросов, так и ландшафтно-географическими условиями. Город располагается на левом берегу р. Волга при впадении в нее р. Казанка, которая делит город на западную (правобережье) и восточную (левобережье) части. Рельеф территории города определяется высотными отметками 45-230 м над уровнем моря, средняя высота составляет 104 м. При этом почти 60 % территории находится на высотной отметке 50-70 м. Значительная часть промышленных объектов и крупных автодорог находятся на пониженной территории города, что способствует накоплению ЗВ в приземном слое.

Особое значение для формирования высоких уровней загрязнения приземного слоя атмосферы имеет температурная стратификация, в частности наличие инверсий. Наибольшую опасность в городских условиях представляет сочетание приземных инверсий с низкой скоростью ветра. Наиболее высокие концентрации ЗВ создаются при 0-2 м/с для наземных, низких и средних источников, 4-7 м/с для высоких. Частота встречаемости источников согласно градации высоты представлена на рисунке 3.3.

При этом значительная часть ЗВ за счет разности температур скапливается в приземном слое на пониженных участках рельефа местности, в зоне дыхания человека. Согласно климатической характеристике, рассчитанной за период 1993-2022 гг., среднемноголетняя повторяемость приземной инверсии на территории г. Казани составляет 39 % и повторяемость штиля – 36 %.

На фоне снижения объемов выбросов от источников загрязнения возрастает роль метеорологических условий, определяющих рассеивающую способность атмосферы. Однако представленные выше данные характеризуют преимущественно средний уровень загрязнения и среднегодовые условия рассеивания примесей в целом по территории города. На отдельных участках ключевыми становятся локальные факторы: наличие доминирующих источников выбросов, оказывающих влияние на данную территорию, а также особенности застройки, определяющие, в том числе, ветровой режим [225-227].

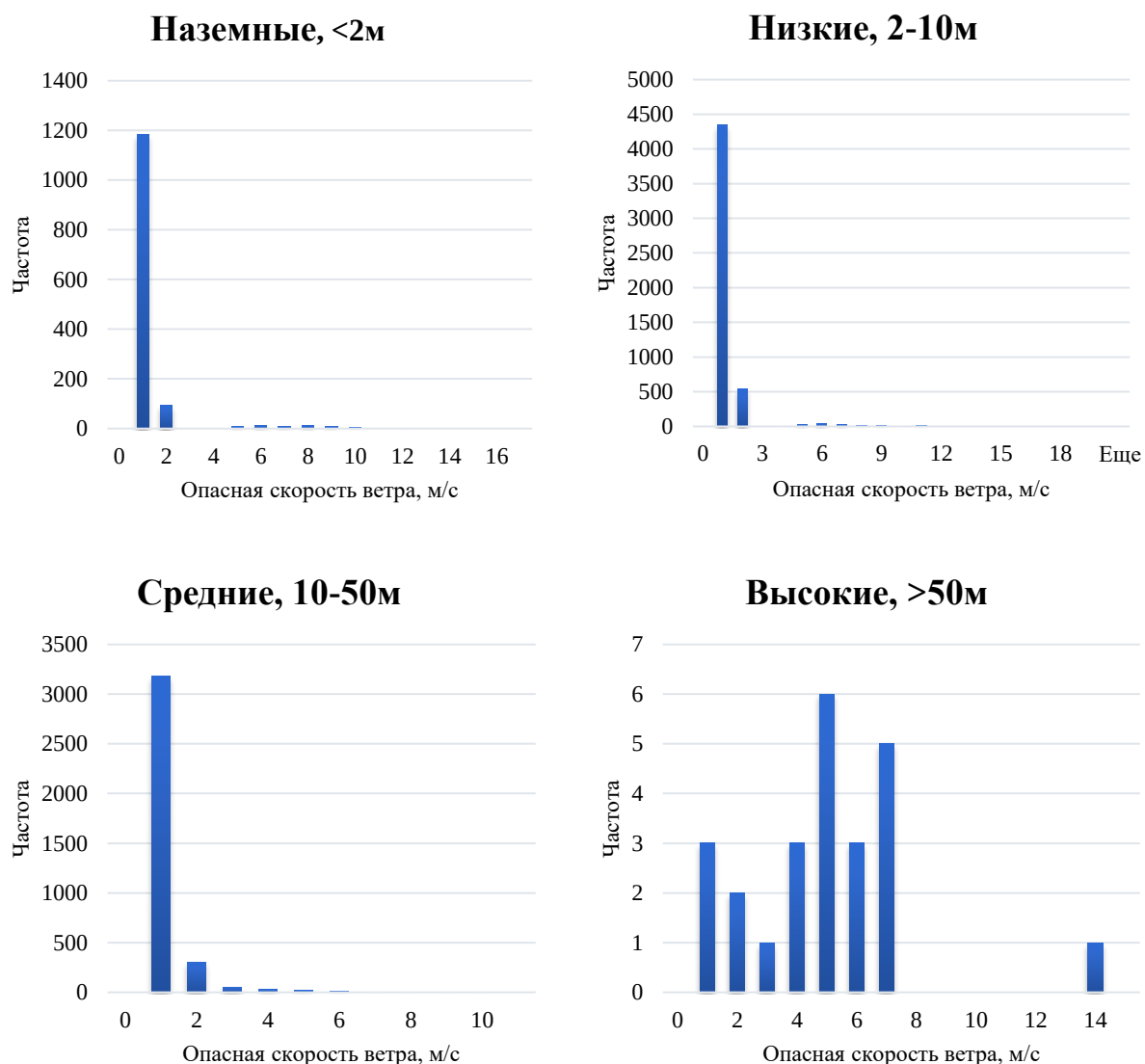


Рисунок 3.3 – Частота встречаемости источников загрязнения при опасной скорости ветра

Рассмотрим влияние локальных условий на рассеивание примесей в зоне расположения АСКЗА на примере  $\text{NO}_x$  и  $\text{CO}$  – наиболее распространенных ЗВ присутствующих в выбросах промышленных и коммунальных предприятий и транспорта.

Круговые диаграммы, отражающие зависимость фиксируемых значений концентраций значимых загрязнителей  $\text{NO}_x$  и  $\text{CO}$  от направления ветра на АСКЗА-1-5, представлены на рисунке 3.4. Для исключения влияния кратковременных залповых выбросов близких к станции источников, вместо максимальной

концентрации в качестве параметра выбраны средние значения концентраций при каждом направлении ветра.

В ряде случаев форма диаграмм отличается от круговой, что свидетельствует о наличии доминирующих источников в соответствующем направлении.

В целом наличие ветра способствует рассеиванию ЗВ в воздухе. С возрастанием скорости ветра процессы рассеивания происходят интенсивней, что сказывается на снижении приземных концентраций загрязнителей (рисунок 3.5).

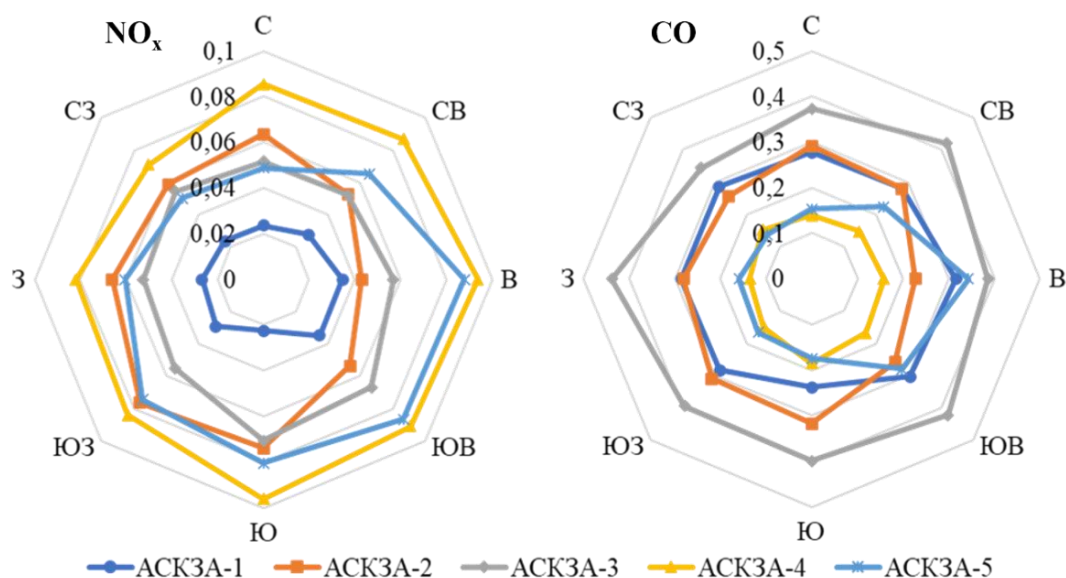


Рисунок 3.4 – Лепестковые диаграммы средних значений концентраций  $\text{NO}_x$  и  $\text{CO}$  в зависимости от направления ветра,  $\text{мг/м}^3$

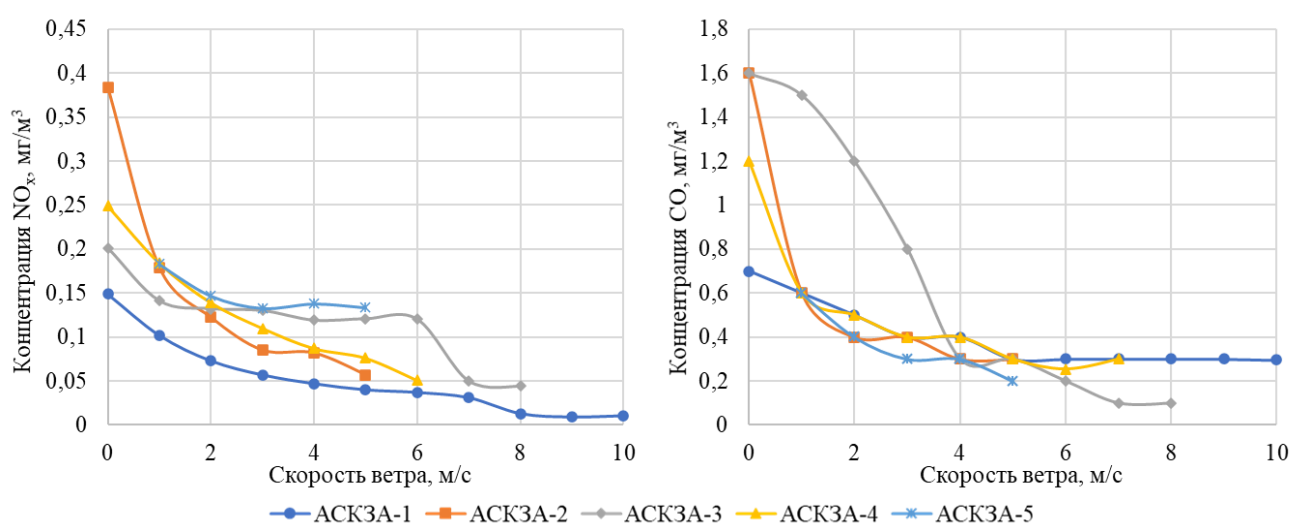


Рисунок 3.5 – Зависимость значения 95-го перцентиля концентраций  $\text{NO}_x$  и  $\text{CO}$  от скорости ветра

Анализ функционирования источников загрязнения показывает, что вследствие специфического режима их эксплуатации, выражающегося, к примеру, в периодическом изменении интенсивности транспортного движения на протяжении суток, наблюдаются соответствующие колебания концентрации вредных примесей. Типичный график динамики усредненных показателей содержания  $\text{NO}_x$  и  $\text{CO}$ , построенный по данным АСКЗА-3, приведен на рисунке 3.6.

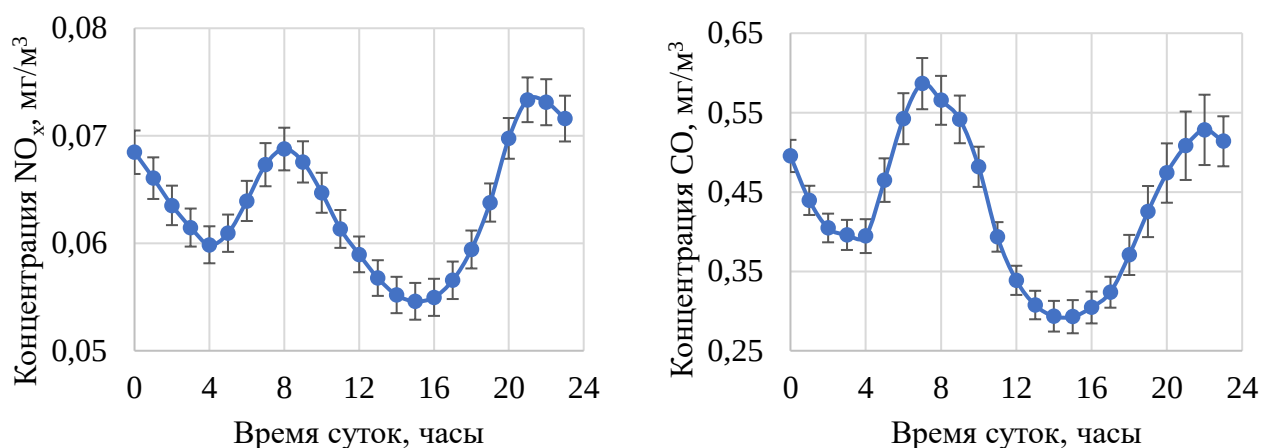


Рисунок 3.6 – Средние значения концентраций  $\text{NO}_x$  и  $\text{CO}$  в зависимости от времени суток

Таким образом, уровни загрязнения воздуха определяются одновременно целым рядом факторов, важнейшими среди которых являются потенциал атмосферного воздуха к самоочищению, ветровой режим территории, локальные условия рассеивания, размещение и режим работы источников загрязнения воздуха [228,229].

### 3.3 Заключение по главе 3

По результатам обработки данных пяти АСКЗА г. Казань за период 2016-2024 гг. установлено, что превышения максимальных разовых ПДК наиболее часто фиксируются для  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{S}$  и  $\text{NH}_3$ . Превышения среднегодовых ПДК отмечены преимущественно для  $\text{NO}_2$ . КИЗА5 за рассматриваемый период

соответствует низкому уровню загрязнения, однако СИ достигает значений, характерных для высокого и очень высокого загрязнения и значения НП достигают градации повышенного загрязнения, что свидетельствует о наличии локальных и кратковременных пиковых выбросов.

Выявлено, что ключевыми факторами, формирующими уровень загрязнения, являются: мощность и режим работы источников выбросов, метеорологические условия, а также особенности рельефа и застройки. Установлено, что наиболее высокие концентрации ЗВ создаются при скорости ветра 0-2 м/с для низких источников и 4-7 м/с для высоких. Диаграммы зависимостей концентраций  $\text{NO}_x$  и СО от направления ветра показывают доминирующие направления переноса примесей для каждой АСКЗА.

Выявлена синхронность пиков загрязнения на разных станциях, что указывает на наличие общих факторов, однако анализ показал, что только метеорологические параметры недостаточно полно объясняют изменчивость концентраций, что обосновывает необходимость учета дополнительных предикторов при построении прогнозных моделей.

## **Глава 4. Методика формирования программы производственного экологического контроля**

### **4.1 Методические подходы к формированию программы производственного экологического контроля состояния атмосферного воздуха**

Как рассматривалось нами ранее, необходимо развитие действующей государственной системы наблюдений за качеством атмосферного воздуха за счет локальной системы экологического контроля, осуществляемой промышленными предприятиями в зоне влияния своих источников выбросов в рамках ПЭК.

Для предприятий, ведущим деятельность на объектах I, II и III категорий, является обязательным проведение ПЭК. Проведение такого контроля в области охраны атмосферного воздуха, являющегося, согласно ФЗ № 7-ФЗ «Об охране окружающей среды» [81], жизненно важным компонентом окружающей среды, включает, согласно приказу Минприроды России № 109 [84], выполнение контроля за соблюдением нормативов допустимых выбросов ЗВ от стационарных источников выбросов в соответствии с подготовленным план-графиком контроля стационарных источников выбросов, а также выполнение наблюдений за загрязнением атмосферного воздуха в соответствии с подготовленным план-графиком проведения наблюдений.

Во введенном в действие с 1 марта 2017 г. Национальном стандарте РФ ГОСТ Р ИСО 14001-2016 «Системы экологического менеджмента. Требования и руководство по применению» [230] указано на необходимость при формировании программы ПЭК:

- определения параметров, подлежащих мониторингу и измерениям;
- определения методов, применяемых при проведении измерений, анализа и оценки полученных результатов, а также методов обеспечения достоверности данных;
- определения критериев оценки результативности и соответствующих показателей;

– установление пространственно-временных параметров измерений.

В отношении организации выполнения наблюдений за загрязнением атмосферного воздуха в приказе Минприроды России № 109 [84] указано, что План-график наблюдений должен содержать: географические координаты пунктов наблюдений с указанием номера каждого пункта; перечень контролируемых на каждом пункте ЗВ; методы определения концентраций ЗВ в атмосферном воздухе; периодичность отбора проб атмосферного воздуха. Какие-либо пояснения по порядку определения: необходимого количества пунктов наблюдений и их координат, перечня контролируемых ЗВ, периодичности отбора проб атмосферного воздуха в указанном приказе отсутствуют. Также в приказе Минприроды России № 109 [84] отсутствует указание на важный аспект: необходимость отбора проб при определенных метеорологических условиях, при которых выбросы от соответствующего производственного объекта оказывают на пункт наблюдений наибольшее влияние.

Отсутствие в приказе Минприроды России № 109 [84] четкого алгоритма определения таких важных параметров, как периодичность контроля с необходимостью учета предусмотренных Федеральным законом (ФЗ) «Об охране окружающей среды» особо важных для охраны атмосферного воздуха периодов функционирования источников загрязнения атмосферы в измененном режиме работы технологического оборудования с длительностью более 3-х месяцев или перевода его на новый постоянный режим работы и завершения капитального ремонта или реконструкции установки, а также отсутствие алгоритма обоснованного выбора точек наблюдений за загрязнением атмосферного воздуха и режима соответствующих измерений в зоне влияния контролируемого объекта безусловно приводит к неисполнению задач, стоящих перед ПЭК, касающихся эффективного обеспечения экологической безопасности, характеризуемой состоянием защищенности природной среды и жизненно важных интересов человека от возможного негативного воздействия хозяйственной деятельности, чрезвычайных ситуаций природного и техногенного характера, их последствий для достижения таких национальных целей, как «экологическое благополучие»,

«комфортная и безопасная среда для жизни», «сохранение населения, укрепление здоровья и повышение благополучия людей».

При подготовке План-графика контроля в него должны быть включены все стационарные ИЗА, выброс от которых по результатам рассеивания превышает 0,1 ПДКм.р. ЗВ на границе земельного участка объекта

На сегодняшний день крайне важным и необходимым для решения задач, стоящих перед ПЭК, а также для применения единого по всей территории РФ обоснованного подхода при формировании Программы ПЭК, является внесение дополнений и уточнений в положения нормативного правового акта по вопросам проведения ПЭК, т.е. в приказ Минприроды России № 109 [84].

В отношении положений, регламентирующих порядок организации наблюдений за загрязнением атмосферного воздуха, для их включения в нормативный правовой акт по вопросам ПЭК, утверждаемый Минприроды России, предлагается следующее.

Несмотря на положения ФЗ № 7-ФЗ «Об охране окружающей среды» содержание подраздела «Производственный контроль в области охраны атмосферного воздуха» приказа Минприроды России № 109 не имеет каких-либо специфичных различий, связанных с учетом категорий объектов, оказывающих негативное воздействие на окружающую среду. Также в приказе не учтено, что, согласно ФЗ № 7-ФЗ программа ПЭК для объектов I категории дополнительно содержит программу создания системы автоматического контроля источников выбросов.

С учетом вышеперечисленных проблем природопользователи, имеющие на балансе объекты I, II и III категорий, систематически направляют в Минприроды России, являющееся федеральным органом исполнительной власти, осуществляющим функции по выработке государственной политики и нормативно-правовому регулированию в сфере изучения, использования, воспроизводства и охраны природных ресурсов, соответствующие запросы. К сожалению, разъяснения, предоставляемые Минприроды России (письма Минприроды от 29 апреля 2020 г., от 2 ноября 2020 г., от 15 июня 2022 г., от 12

сентября 2022г., от 3 октября 2022 г., от 8 ноября 2022 г., от 9 июля 2024 г. и др.) по итогам рассмотрения таких запросов, не содержат какой-либо информации, дополняющей те положения, которые содержатся приказа Минприроды России № 109. При этом важно отметить, что завершаются письма Минприроды России, как правило, следующей информацией «письма Минприроды России и его структурных подразделений, в которых разъясняются вопросы применения нормативных актов, не содержат правовых норм, не направлены на установление, изменение или отмену правовых норм, а содержащиеся в них разъяснения не могут рассматриваться в качестве общеобязательных государственных предписаний постоянного или временного характера», либо «по конкретным вопросам проведения ПЭК на объекте хозяйственной деятельности целесообразно обращаться в уполномоченный на осуществление государственного экологического надзора орган государственной власти, осуществляющий прием отчета об организации и о результатах осуществления ПЭК на данном объекте». Таким образом, на сегодняшний день крайне важным и необходимым для решения задач, стоящих перед производственным экологическим контролем, касающихся обеспечения эффективной экологической безопасности, а также для применения единого по всей территории РФ обоснованного подхода при формировании Программы ПЭК, является внесение дополнений и уточнений в положения нормативного правового акта по вопросам проведения ПЭК, т.е. в приказ Минприроды России № 109 [84].

В отношении алгоритма для обоснованного определения периодичности проведения контроля за соблюдением нормативов допустимых выбросов ЗВ от стационарных источников выбросов можно предложить следующее. В Методическом пособии по расчету, нормированию и контролю выбросов ЗВ в атмосферный воздух, подготовленном ОАО «НИИ Атмосфера» в 2012 г. предложено при организации контроля за соблюдением нормативов выбросов определять категории источников выбросов в разрезе каждого ЗВ, т.е. категории, устанавливаемой для сочетания «источник – ЗВ» для каждого k-го ИЗА и каждого, выбрасываемого им, j-го ЗВ.

Исходя из определенной категории сочетания «источник – ЗВ», предложено устанавливать следующую периодичность контроля за соблюдением нормативов допустимых выбросов (временно-разрешенных выбросов):

- I категория: IA – 1 раз в месяц; IB – 1 раз в квартал;
- II категория: IIА – 1 раз в квартал; IIБ – 2 раза в год;
- III категория: IIIА – 2 раза в год; IIIБ – 1 раз в год;
- IV категория – 1 раз в 5 лет.

Учитывая, что определение периодичности проведения контроля выбросов ЗВ от стационарных источников загрязнения атмосферы выполняется исходя из величины выброса ЗВ, его токсичности для живых организмов, а также исходя из параметров ИЗА, предложенный подход представляется достаточно обоснованным. Также, исходя из положений ФЗ № 7-ФЗ, 2002, в нормативном правовом акте, определяющем требования к проведению ПЭК в области охраны атмосферного воздуха, должна быть предусмотрена обязательность проведения контроля выбросов от ИЗА в случаях работы технологического оборудования в измененном режиме более 3-х месяцев или перевода его на новый постоянный режим работы и завершения капитального ремонта или реконструкции установок.

Согласно пункту 4 Положения о государственном мониторинге состояния и загрязнения окружающей среды, утвержденного постановлением Правительства РФ № 477 [231], пункты и системы наблюдений за состоянием окружающей среды в районах расположения объектов, которые оказывают негативное воздействие на окружающую среду и владельцы которых в соответствии с ФЗ осуществляют мониторинг состояния и загрязнения окружающей среды в зоне воздействия этих объектов (локальные системы наблюдений), учитываются при формировании государственной системы наблюдений, включающей в себя государственную наблюдательную сеть, формирование и функционирование которой обеспечивается Росгидрометом, а также территориальные системы наблюдений за состоянием окружающей среды, формирование и обеспечение функционирования которых осуществляется исполнительными органами субъектов РФ. Схема формирования государственной системы наблюдений отражена на рисунке 4.1.



Рисунок 4.1 – Схема формирования государственной системы наблюдения за состоянием окружающей среды

Таким образом, эффективные наблюдения за загрязнением атмосферного воздуха в зоне воздействия объектов, оказывающих негативное воздействие на окружающую среду, являются крайне важными и необходимыми не только для эффективного обеспечения экологической безопасности в зоне влияния объектов, но и для формирования государственной системы наблюдений.

Нормативным правовым актом РФ, определяющим требования к организации наблюдений за загрязнением атмосферного воздуха, в том числе в рамках локальных систем наблюдений, является приказ Минприроды России № 524 [232], утвердивший Требования к проведению наблюдений за состоянием окружающей среды, ее загрязнением.

Согласно пункту 164 Требований № 524 [232], перечень измеряемых ЗВ для программы на пунктах наблюдений устанавливается и уточняется на основе сведений о составе и характере выбросов в соответствии с данными инвентаризации источников выбросов, результатами расчетов рассеивания ЗВ от объектов.

Исходя из положений Требований № 524 [232], в рамках наблюдений на загрязнении атмосферного воздуха, касающихся функционирования локальных систем наблюдений, предусматриваются значительные объемы работ: на каждом пункте наблюдений выполнение не менее 300 измерений по не менее, чем 5-ти ЗВ, с проведением сопутствующих метеорологических наблюдений и выполнением таких измерений не менее 3-х раз в день, а также организация учащенных наблюдений за загрязнением атмосферного воздуха по специальной программе, включая ночной срок наблюдений, при проведении мероприятий по регулированию выбросов ЗВ в периоды НМУ. Одновременно важно отметить, что в Требованиях № 524 [232] не отражены положения, имеющие стратегическое значение при организации наблюдений, а именно не определен порядок определения необходимого количества пунктов наблюдений. Содержащееся в данных требованиях указание на то, что пункты локальных систем наблюдений за загрязнением атмосферного воздуха размещаются в пределах зоны влияния объекта, т.е. в пределах зоны, на территории которой приземные концентрации ЗВ превышают 0,05 ПДК, означает, что зона размещения пунктов должна охватывать значительную по площади территорию, как это следует из положений приказа Минприроды России № 581 «Об утверждении методики разработки (расчета) и установления нормативов допустимых выбросов ЗВ в атмосферный воздух» [83].

Вышеперечисленные положения Требований № 524 [232], касающиеся организации наблюдений, необходимо включить в приказ Минприроды России № 109 [84], являющийся базовым нормативным правовым актом, определяющим порядок проведения ПЭК в области охраны атмосферного воздуха, с одновременным дополнением данного приказа положениями, регламентирующими порядок определения необходимого количества пунктов наблюдений и выбора мест их установки. Согласно ФЗ «Об охране окружающей среды» [81] требования к содержанию программы ПЭК определяются Минприроды России с учетом категорий объектов, оказывающих негативное воздействие на окружающую среду. С учетом этого, целесообразно предусмотреть в приказе Минприроды России № 109 [84] следующие количества пунктов

наблюдений за загрязнением атмосферного воздуха для объектов различных категорий: для объектов III категории – не менее 1-го пункта; для объектов II категории – не менее 4-х пунктов; для объектов I категории – не менее 8-ми пунктов наблюдений, размещаемых в зоне влияния объектов с учетом сторон света и преобладающего направления ветра. Выбор зоны установки пунктов наблюдений должен проводиться с учетом наибольших приземных концентраций, полученных по результатам расчета рассеивания выбросов ЗВ в атмосферном воздухе от источников объекта на основе актуальных сведений инвентаризации выбросов.

Пунктом 164 Требований № 524 [232] определено только, что перечень измеряемых ЗВ на пунктах наблюдений устанавливается и уточняется на основе сведений о составе и характере выбросов в соответствии с данными инвентаризации источников выбросов, результатами расчетов рассеивания ЗВ от объектов.

Наилучшей практикой при организации программы ПЭК считается риск-ориентированный подход, при котором особое внимание уделяется мониторингу параметров, выход которых за границы установленных значений может произойти с высокой вероятностью и/или грозит тяжелыми последствиями.

Вероятность неблагоприятного события, как и вероятность причинения вреда может быть условно разделена на три группы: «высокая», «средняя», «низкая». Основным фактором риска при этом является возможный экологический вред от эмиссий ЗВ, связанный с их опасностью и скоростью распространения, а также риск превышения установленных нормативов эмиссий. Анализ неопределенностей при оценке разработанных моделей включал специальные метрики и подходы, основанные на оценке чувствительности, вероятностном анализе, а также на статистических оценках квантилей распределения и доверительных интервалов, соответствующие рекомендациям Р 2.1.10.3968-23. 2.1.10. «Руководство по оценке риска здоровью населения при воздействии химических веществ, загрязняющих среду обитания» [60].

Примеры факторов риска, которые целесообразно рассматривать при определении и формировании программы ПЭК:

- мощность выбросов предприятия, от величины которой может зависеть воздействие на окружающую среду;
- класс опасности и количество опасных веществ, находящихся в производственном процессе и в эмиссиях;
- возможный экологический вред от эмиссий ЗВ, связанный с их опасностью и скоростью распространения;
- географические особенности расположения предприятия;
- риск превышения установленных нормативов эмиссий.

Учитывая существующие нормативные правовые документы, рекомендации справочника НДТ и расчетные подходы к получению и обработке данных предлагается приведенный ниже алгоритм.

В качестве исходной информации используются материалы инвентаризации выбросов, формируемые промышленными предприятиями для расчетов рассеивания и определения величин предельно допустимых выбросов (ПДВ), которые используются для создания компьютерных баз данных (БД) в специализированных программах для расчетов рассеивания. Структура баз данных соответствует структуре и форматам БД УПРЗА «Эколог».

На карте-схеме отображаются промышленные площадки, границы санитарно-защитных зон, селитебные территории и прочие объекты, важные с точки зрения организации мониторинга. Основным условием является атрибутивная дифференциация этих объектов (или разнесение объектов разного типа в разные объектные слои). Выполняются расчеты рассеивания с последующим отображением результатов и получением карт загрязнения территории. Расчетная сетка должна охватывать всю изучаемую территорию (город, район, участок и пр.).

Плотность сетки расчетных точек (шаг расчетов по оси X и оси Y) определяется в соответствии с положениями «Методов расчетов рассеивания выбросов вредных (загрязняющих) веществ в атмосферном воздухе» (утверждены приказом Минприроды России от 6 июня 2017 г. № 273) [74]. Расчетную сетку наносят на векторную карту территории. В формируемой базе данных каждая точка расчетной сетки характеризуется совокупностью концентраций N ингредиентов. База данных

представляет собой матрицу, построенную на базе выходных файлов результатов расчета.

Таким образом, расчет концентраций компонентов выбросов программой УПРЗА «Эколог» реализуется с учетом мощности выбросов, токсичности примесей, местоположения источников выбросов, факторов распространения эмиссий (параметры источников выбросов и метеорологические параметры рассеивания).

На следующем этапе проводится нейросетевая адаптация рассчитанных концентраций с целью повышения адекватности результатов расчетов.

Для оценки приемлемости полученных расчетных значений концентраций необходимо сравнить их с пороговыми значениями. Пороговые концентрации в приземном слое атмосферного воздуха должны определяться с учетом приоритетов ингаляционных опасностей, которым может подвергаться население. Как правило, в качестве таких пороговых величин используются специально разработанные нормативы (максимальные допустимые уровни, ПДК и т.д.). Особый интерес, в рамках исследований последствий загрязнения окружающей среды на здоровье населения, представляют так называемые референтные величины [60], базирующиеся на концепции минимально допустимой концентрации (дозы), безопасной для здоровья населения в целом на популяционном уровне в течение продолжительного времени. Поэтому в данном исследовании в качестве пороговых, при оценке хронического ингаляционного воздействия, принимаются референтные концентрации.

Основными, наиболее теоретически обоснованными подходами оценки уровня загрязнения атмосферного воздуха, широко используемыми при оценке риска здоровью населения в результате загрязнения окружающей среды, являются расчеты отношений измеренных значений тех или иных факторов риска (например, концентраций ЗВ) к их пороговым значениям, то есть таким величинам, при которых неблагоприятное воздействие фактора отсутствует, либо пренебрежимо мало.

#### **4.2 Результаты применения предложенных методических подходов к формированию программы производственного экологического контроля состояния атмосферного воздуха для предприятия химической отрасли**

Апробация предлагаемого алгоритма формирования программы ПЭК проводилась для крупнейшего предприятия химической отрасли промышленности РТ. Современное химическое производство является высокотехнологичным, но его функционирование сопровождается значительным негативным воздействием на атмосферный воздух. Особенно критичными являются многостадийные процессы глубокой переработки углеводородного сырья, синтеза полимеров, каучуков и базовых органических соединений. В 30 контрольных точках санитарно-защитной зоны (СЗЗ) основной промышленной площадки предприятия на основе данных инвентаризации стационарных источников и выбросов ЗВ в атмосферный воздух были определены содержания 12 основных ЗВ: диАлюминий триоксид ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ),  $\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NH}_3$ , кремния диоксид ( $\text{SiO}_2$ ),  $\text{SO}_2$ ,  $\text{C}_6\text{H}_6$ ,  $\text{C}_8\text{H}_8$ , хлорметан ( $\text{CH}_3\text{Cl}$ ), ацетальдегид ( $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$ ), уксусная кислота ( $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$ ), углеводороды предельные  $\text{C}_{12}$ - $\text{C}_{19}$  ( $\text{C}_{12}\text{H}_{26}$ - $\text{C}_{19}\text{H}_{40}$ ).

Данные разбивались на два кластера, в которые были определены 60 % и 40 % контрольных точек по рассчитанным концентрациям, соответственно. В кластер 0 вошли 12 точек по границе СЗЗ (40 % всех точек), в кластер 1 вошли 18 точек по границе СЗЗ (60 % всех точек).

В соответствии с технологией каскадной нейросетевой кластеризации, были оценены полученные кластеры на предмет их однородности. Общая картина распределения по кластерам рассчитанных для каждого отдельного вещества  $\text{H}_\text{Q}$ , показана на рисунке 4.2 (вертикальная темная кривая разделяет топологическое расположение кластеров на зону кластера 0 – справа, и зону кластера 1 – слева).

В кластере 0 отмечаются превышения безопасных концентраций ( $\text{H}_\text{Q} > 1$ ) по следующему перечню веществ: фенол – от 1,5 до 4 раз;  $\text{NO}_2$  – от 3 до 3,8 раза; бензол – от 1,9 до 3,7 раза; уксусная кислота – пограничное значение от нормы до 1,1 раза.

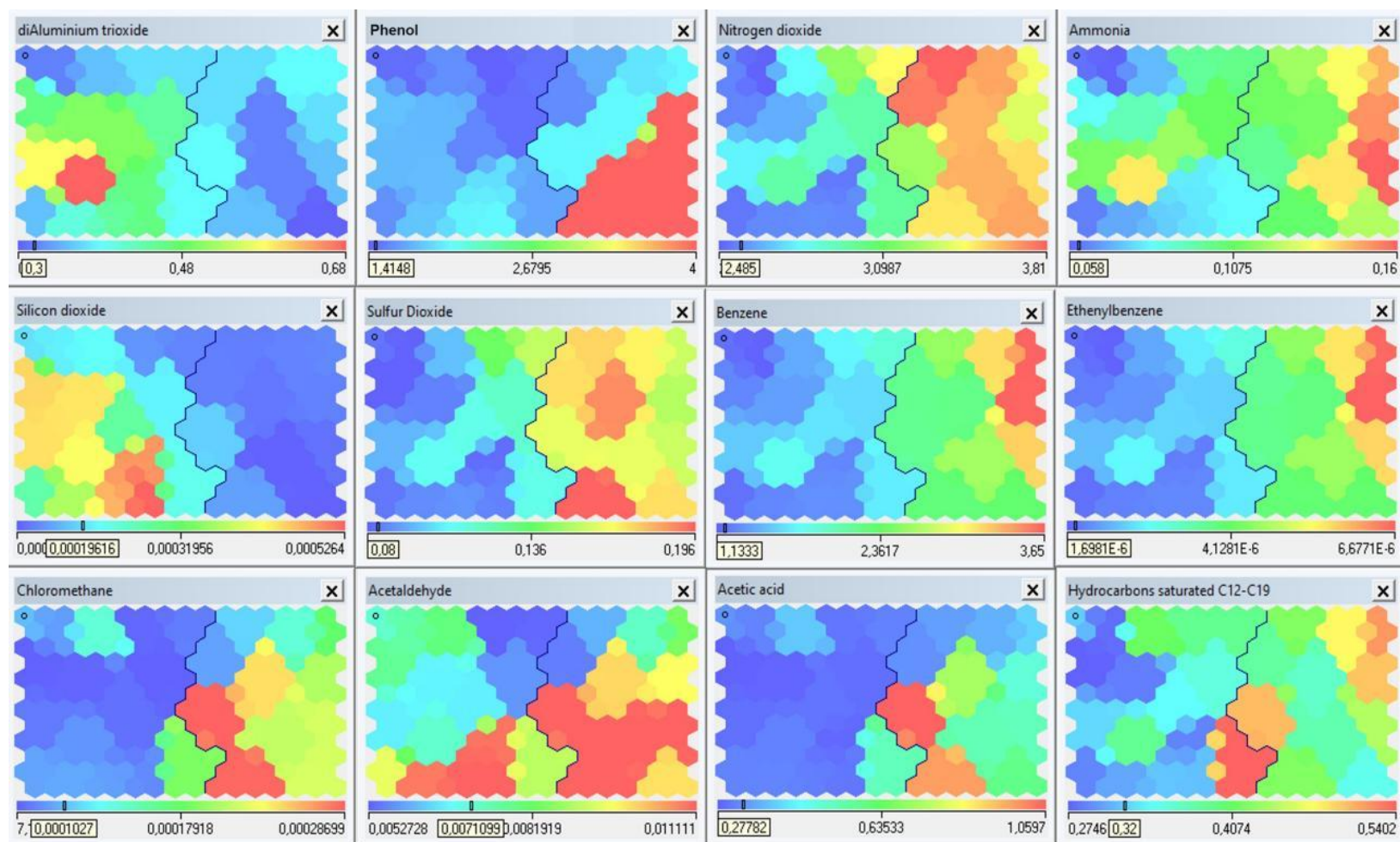


Рисунок 4.2 – SOM-карты распределения уровней HQ ЗВ по кластерам

В кластере 1 обнаруживаются превышения безопасных концентраций ( $HQ > 1$ ) по следующему перечню веществ: фенол – от 1,4 до 2 раз;  $NO_2$  – от 2,3 до 2,9 раза; бензол – от 1,1 до 1,8 раза.

Оба кластера демонстрируют примерно одинаковые средние значения коэффициента вариации на уровне 23 % (рисунок 4.3), что соответствует значительной изменчивости данных внутри групп.

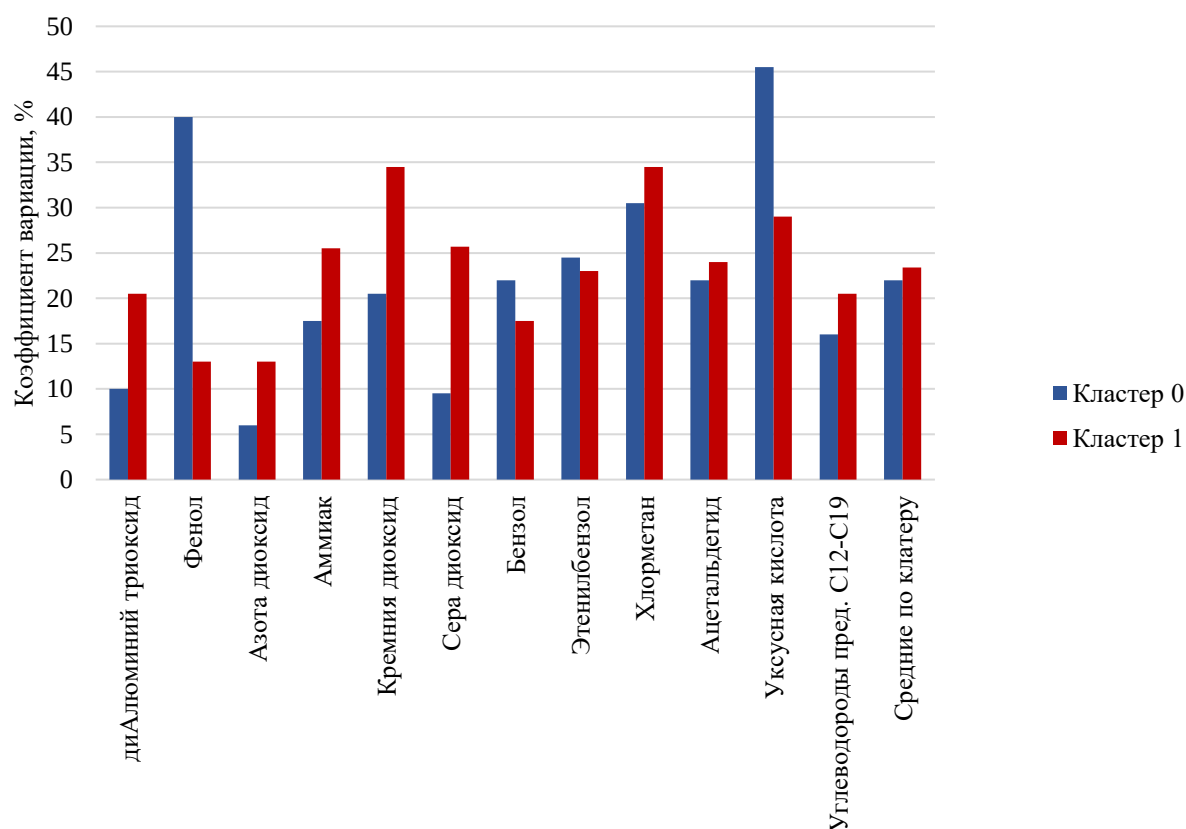


Рисунок 4.3 – Вариабельность значений  $HQ$  в выделенных группах

Наблюдения, представляющие кластер 0, демонстрируют повышенные и высокие значения  $HQ$ , что говорит о повышенном риске здоровью населения в данных точках, главным образом за счет фенола,  $NO_2$  и бензола.

В то же время, был сделан вывод о необходимости проведения дополнительной кластеризации точек, образующих как кластер 0, так и кластер 1 (рисунок 4.4-4.5). При этом группировку целесообразно производить только по четырем ЗВ, по которым обнаружены превышения  $HQ$ : фенол,  $NO_2$ , бензол и

уксусная кислота для кластера 0; фенол,  $\text{NO}_2$  и бензол для кластера 1.

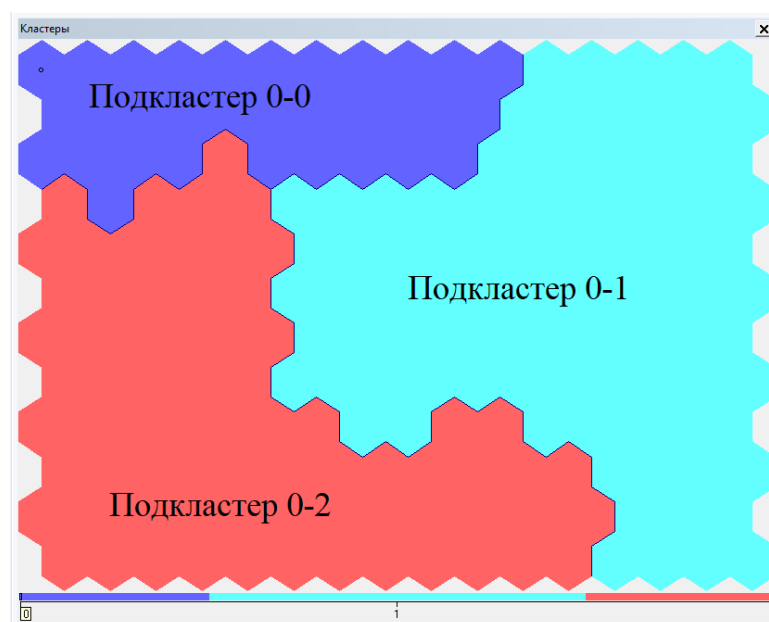


Рисунок 4.4 – Расположение подкластеров Кластера 0 на SOM-карте

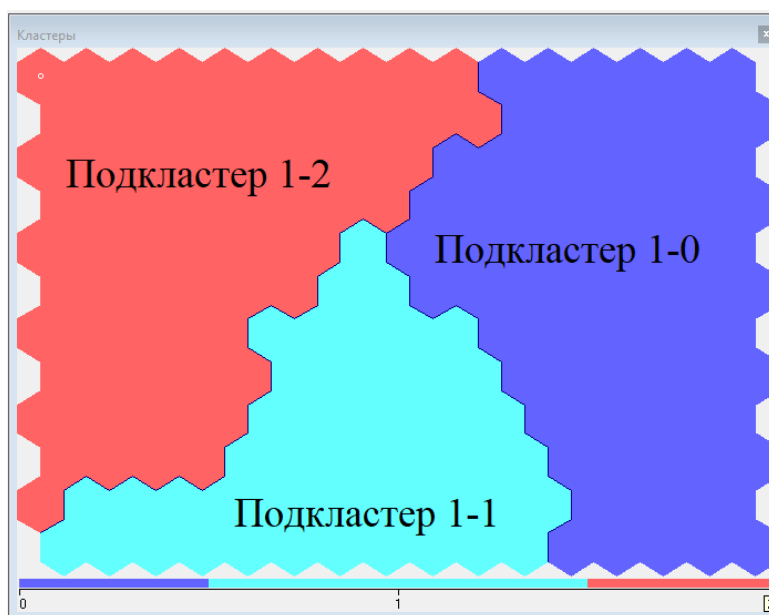


Рисунок 4.5 – Расположение подкластеров Кластера 1 на SOM-карте

Каждый кластер (кластер 0 и кластер 1) разбивался на три подкластера (0–0, 0–1, 0–2 и 1–0, 1–1, 1–2, соответственно). Подкластер 0–0 демонстрирует максимальные значения уровня опасности HQ по веществу «уксусная кислота», по остальным трем ЗВ (фенол,  $\text{NO}_2$  и бензол) значения HQ наоборот ниже, чем в двух

других подкластерах. Подкластер 0–1 содержит контрольные точки с максимальным уровнем опасности по фенолу, по остальным трем ЗВ значения HQ колеблются от повышенных до средних. Подкластер 0–2 содержит контрольные точки с максимальным уровнем опасности в отношении  $\text{NO}_2$  и бензола (максимальные значения HQ по трем подкластерам). В отношении уксусной кислоты  $\text{HQ} < 1$  и не выходит за границы допустимых значений.

Таким образом, хотя кластер 0 в целом является наиболее опасным, однако внутри кластера подкластер 0–0 подвержен наименьшему риску относительно точек подкластеров 0–1 и 0–2 (рисунок 4.6).

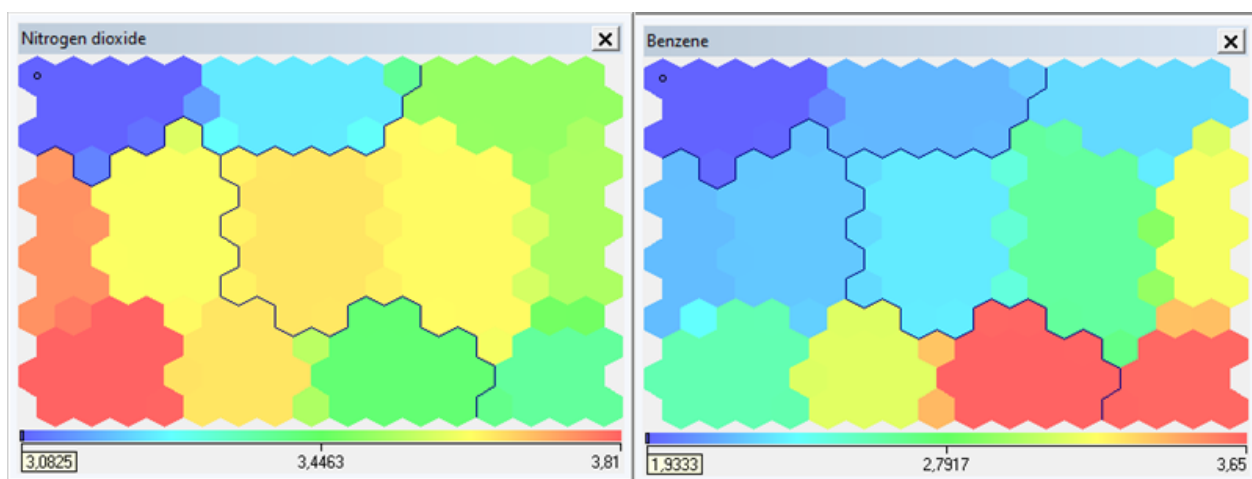


Рисунок 4.6 – SOM-карты распределений уровней опасности для ЗВ с  $\text{HQ} > 1$  по подкластерам Кластера 0

Из трех выделенных групп кластера 1, подкластер 1–1 имеет относительно низкие показатели HQ. Подкластер 1–2 содержит контрольные точки с максимальными значениями опасности фенолу, и средние по  $\text{NO}_2$  и бензолу. Подкластер 1–0 является самым неблагоприятным, так как содержит точки с максимальными значениями HQ по сочетанию сразу двух веществ –  $\text{NO}_2$  и бензола. Плотность подкластеров кластера 1 выше, чем для подкластеров кластера 0, но для особо опасных ЗВ со значениями  $\text{HQ} > 1$  не превосходит 10 % (рисунок 4.7).

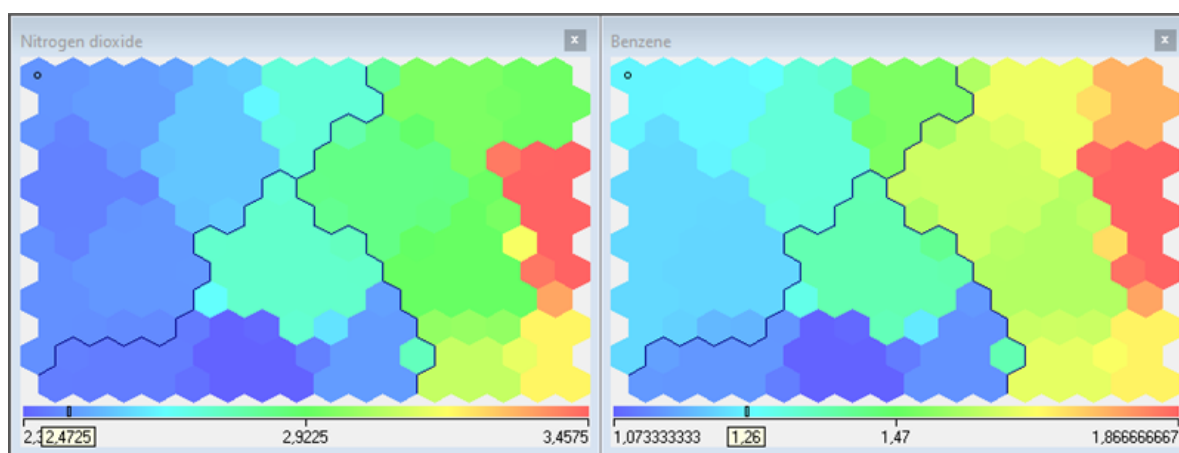


Рисунок 4.7 – SOM-карты распределений уровней опасности для ЗВ с  $HQ > 1$  по подкластерам Кластера 1

Контрольные точки внутри каждой группы имеют примерно одинаковый уровень опасности по рассматриваемым ЗВ, и, следовательно, к точкам внутри каждой группы могут быть применены типовые мероприятия ПЭК. Сводные данные по предложению для формирования программы ПЭК по сокращенному перечню точек санитарно-защитной зоны предприятия химической отрасли представлены в таблице 4.1.

Таблица 4.1 – Предложения по формированию программы ПЭК

| Контрольные точки | Уровень опасности | Перечень рекомендованных к контролю ЗВ | Рекомендованная периодичность контроля                   |
|-------------------|-------------------|----------------------------------------|----------------------------------------------------------|
| 1                 | 2                 | 3                                      | 4                                                        |
| 1                 | пониженный        | азота диоксид                          | низкая (2 раза в год)                                    |
|                   |                   | фенол                                  | низкая (2 раза в год)                                    |
| 2                 | пониженный        | азота диоксид                          | низкая (2 раза в год)                                    |
|                   |                   | фенол                                  | низкая (2 раза в год)                                    |
| 3                 | средний           | фенол                                  | средняя (ежеквартально)                                  |
|                   |                   | азота диоксид                          | средняя (ежеквартально)                                  |
|                   |                   | бензол                                 | средняя (ежеквартально)                                  |
| 4                 | низкий            | уксусная кислота                       | разово (1 раз в год)                                     |
| 5                 | низкий            | уксусная кислота                       | разово (1 раз в год)                                     |
| 6                 | очень высокий     | фенол                                  | непрерывно (с использованием автоматизированных средств) |
|                   |                   | азота диоксид                          | высокая (ежемесячно)                                     |
|                   |                   | бензол                                 | высокая (ежемесячно)                                     |

Продолжение таблицы 4.1

| 1  | 2             | 3             | 4                                                        |
|----|---------------|---------------|----------------------------------------------------------|
| 7  | высокий       | азота диоксид | непрерывно (с использованием автоматизированных средств) |
|    |               | бензол        | непрерывно (с использованием автоматизированных средств) |
| 8  | очень высокий | фенол         | непрерывно (с использованием автоматизированных средств) |
|    |               | азота диоксид | высокая (ежемесячно)                                     |
|    |               | бензол        | высокая (ежемесячно)                                     |
| 9  | очень высокий | фенол         | непрерывно (с использованием автоматизированных средств) |
|    |               | азота диоксид | высокая (ежемесячно)                                     |
|    |               | бензол        | высокая (ежемесячно)                                     |
| 10 | очень высокий | фенол         | непрерывно (с использованием автоматизированных средств) |
|    |               | азота диоксид | высокая (ежемесячно)                                     |
|    |               | бензол        | высокая (ежемесячно)                                     |
| 11 | очень высокий | Фенол         | непрерывно (с использованием автоматизированных средств) |
|    |               | азота диоксид | высокая (ежемесячно)                                     |
|    |               | бензол        | высокая (ежемесячно)                                     |
| 12 | очень высокий | азота диоксид | непрерывно (с использованием автоматизированных средств) |
|    |               | бензол        | непрерывно (с использованием автоматизированных средств) |
| 13 | очень высокий | азота диоксид | непрерывно (с использованием автоматизированных средств) |
|    |               | бензол        | непрерывно (с использованием автоматизированных средств) |
| 14 | очень высокий | азота диоксид | непрерывно (с использованием автоматизированных средств) |
|    |               | бензол        | непрерывно (с использованием автоматизированных средств) |
| 15 | очень высокий | азота диоксид | непрерывно (с использованием автоматизированных средств) |
|    |               | бензол        | непрерывно (с использованием автоматизированных средств) |
| 16 | средний       | фенол         | средняя (ежеквартально)                                  |
|    |               | азота диоксид | средняя (ежеквартально)                                  |
|    |               | бензол        | средняя (ежеквартально)                                  |
| 17 | средний       | фенол         | средняя (ежеквартально)                                  |
|    |               | азота диоксид | средняя (ежеквартально)                                  |
|    |               | бензол        | средняя (ежеквартально)                                  |
| 18 | средний       | фенол         | средняя (ежеквартально)                                  |
|    |               | азота диоксид | средняя (ежеквартально)                                  |
|    |               | бензол        | средняя (ежеквартально)                                  |
| 19 | средний       | фенол         | средняя (ежеквартально)                                  |
|    |               | азота диоксид | средняя (ежеквартально)                                  |
|    |               | бензол        | средняя (ежеквартально)                                  |

Продолжение таблицы 4.1

| 1  | 2       | 3             | 4                       |
|----|---------|---------------|-------------------------|
| 20 | средний | фенол         | средняя (ежеквартально) |
|    |         | азота диоксид | средняя (ежеквартально) |
|    |         | бензол        | средняя (ежеквартально) |
| 21 | средний | фенол         | средняя (ежеквартально) |
|    |         | азота диоксид | средняя (ежеквартально) |
|    |         | бензол        | средняя (ежеквартально) |
| 22 | высокий | фенол         | высокая (ежемесячно)    |
|    |         | азота диоксид | высокая (ежемесячно)    |
|    |         | бензол        | высокая (ежемесячно)    |
| 23 | высокий | фенол         | высокая (ежемесячно)    |
|    |         | азота диоксид | высокая (ежемесячно)    |
|    |         | бензол        | высокая (ежемесячно)    |
| 24 | высокий | фенол         | высокая (ежемесячно)    |
|    |         | азота диоксид | высокая (ежемесячно)    |
|    |         | бензол        | высокая (ежемесячно)    |
| 25 | высокий | фенол         | высокая (ежемесячно)    |
|    |         | азота диоксид | высокая (ежемесячно)    |
|    |         | бензол        | высокая (ежемесячно)    |
| 26 | высокий | фенол         | высокая (ежемесячно)    |
|    |         | азота диоксид | высокая (ежемесячно)    |
|    |         | бензол        | высокая (ежемесячно)    |
| 27 | высокий | фенол         | высокая (ежемесячно)    |
|    |         | азота диоксид | высокая (ежемесячно)    |
|    |         | бензол        | высокая (ежемесячно)    |
| 28 | высокий | фенол         | высокая (ежемесячно)    |
|    |         | азота диоксид | высокая (ежемесячно)    |
|    |         | бензол        | высокая (ежемесячно)    |
| 29 | низкий  | азота диоксид | низкая (2 раза в год)   |
|    |         | фенол         | низкая (2 раза в год)   |
| 30 | низкий  | азота диоксид | низкая (2 раза в год)   |
|    |         | фенол         | низкая (2 раза в год)   |

Полученные результаты позволяют отметить, что приоритетными ЗВ во всех кластерах является один и тот же набор примесей: фенол, NO<sub>2</sub> и бензол. Для этих соединений отмечена наиболее высокая вероятность обнаружения максимальных концентраций. Следует также отметить, что предлагаемый алгоритм расчета относительных коэффициентов опасности указывает на то, что показатели HQ, рассчитанные для этих веществ, охватывают большую часть всех возможных превышений референтных значений, в связи с чем можно сделать однозначный вывод о составе перечня приоритетных примесей, в который предлагается включить фенол, NO<sub>2</sub> и бензол.

### **4.3 Нейросетевая модель для расчета среднесуточных концентраций оксидов азота**

Уровень загрязнения атмосферного воздуха в каждый момент времени зависит от большой совокупности факторов. Наиболее важными, несомненно, являются параметры выбросов ЗВ из антропогенных источников совместно с метеорологическими условиями, определяющими процессы рассеивания или накопления вредных веществ в атмосферном воздухе.

При решении ряда практических задач, в том числе, при разработке программ наблюдений за загрязнением атмосферного воздуха в рамках работы государственной территориальной системы наблюдений или производственного экологического контроля, интерес представляет возможность прогнозирования роста или снижения концентраций ЗВ в приземном слое атмосферного воздуха с учетом информации об ожидаемых метеорологических условиях [233].

Рассмотрим график изменения среднесуточных концентраций  $\text{NO}_x$ , как наиболее значимого индикатора загрязнения атмосферного воздуха города, представленного на рисунке 4.8. Временной интервал наблюдений выбран случайным образом. Как можно видеть на рисунке, при очевидном несовпадении средних значений концентраций  $\text{NO}_x$  на различных станциях, пики загрязнений (рост или снижение среднесуточных концентраций) в большинстве случаев наблюдаются синхронно на всех станциях одновременно.

Численно определить степень взаимосвязи этих данных можно при помощи корреляционной матрицы для значений среднесуточной концентрации  $\text{NO}_x$ , составленной для того же периода времени (таблица 4.2). Каждое из полученных значений, за исключением одной пары АСКЗА-1/АСКЗА-4, указывает на наличие статистически сильной связи между значениями среднесуточных концентраций на различных станциях.

Указанное наблюдение позволяет нам предположить наличие общих факторов, которыми обусловлено изменение среднесуточного уровня загрязнения

в различных точках города. Наиболее очевидными среди таких факторов являются метеорологические условия. Таким образом, интерес представляет разработка нейросетевой модели для прогноза изменения среднесуточных концентраций  $\text{NO}_x$  с учетом доступных для анализа факторов [234, 235].

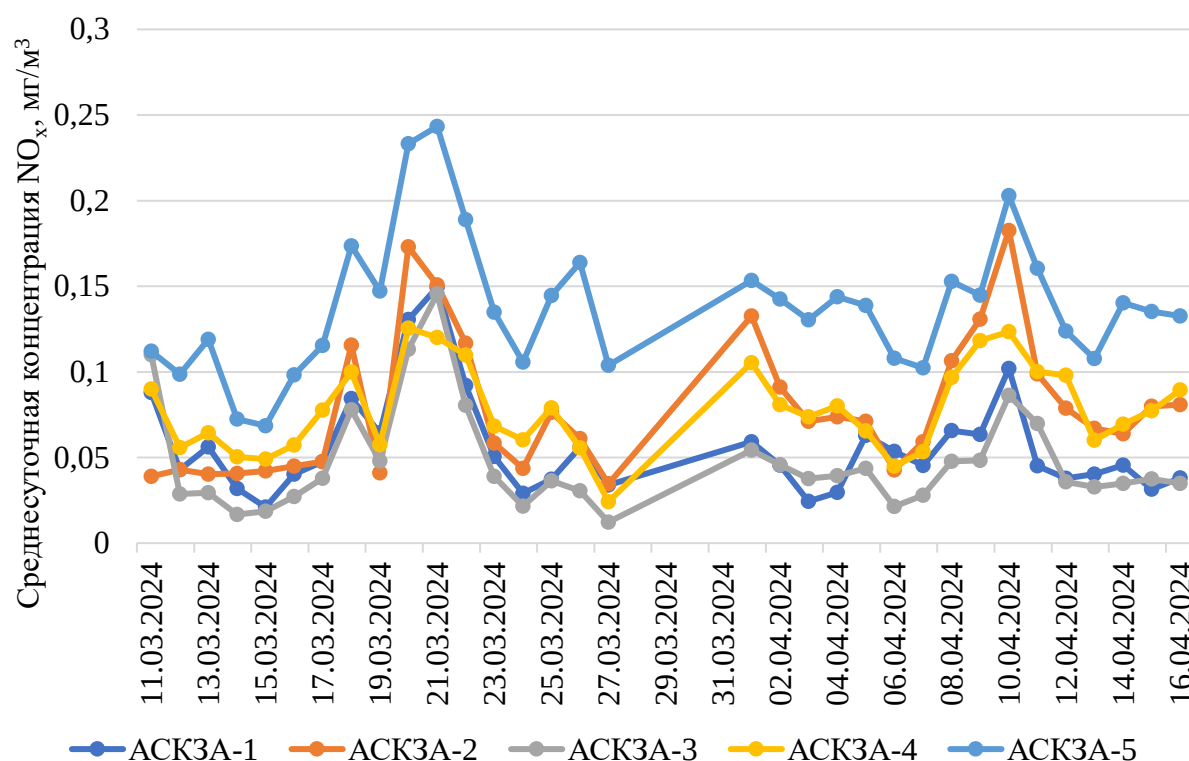


Рисунок 4.8 – График изменения суммарной среднесуточной концентрации  $\text{NO}_x$  по данным АСКЗА в марте-апреле 2024 г.

Таблица 4.2 – Корреляционная матрица для значений суммарной среднесуточной концентрации  $\text{NO}_x$  по данным АСКЗА в марте-апреле 2024 г.

|         | АСКЗА-1 | АСКЗА-2 | АСКЗА-3 | АСКЗА-4 | АСКЗА-5 |
|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| АСКЗА-1 | 1       | -       | -       | -       | -       |
| АСКЗА-2 | 0,70    | 1       | -       | -       | -       |
| АСКЗА-3 | 0,91    | 0,70    | 1       | -       | -       |
| АСКЗА-4 | 0,67    | 0,89    | 0,78    | 1       | -       |
| АСКЗА-5 | 0,82    | 0,85    | 0,81    | 0,78    | 1       |

Разработка и обучение нейросетевой модели производились на основе данных измерений АСКЗА г. Казани за 3-х летний период 2022-2024 гг.

Для подготовки данных для обучения нейронной сети произведена обработка

результатов измерений, в процессе которой вычислялись среднесуточные значения суммарных концентраций  $\text{NO}_x$ , а также метеорологических условий (направление и скорость ветра, количество осадков, относительная влажность, атмосферное давление, температура) по результатам измерений каждой из станций. Далее полученные значения усреднялись по всем станциям с выводом среднегородских значений концентраций и метеорологических факторов.

Для увеличения репрезентативности данных из рассмотрения были исключены сроки (дни), при которых отсутствовали необходимые данные по какой-либо из станций, за исключением АСКЗА-5, работа которой была запущена в 2023 г. Полученный массив данных насчитывал 638 строк.

Для учета наблюдаемого различия интенсивности движения транспорта в рабочие и выходные дни, массив обучающих данных дополнен столбцом, отражающим данные производственного календаря (1 – выходной день, 0 – рабочий день). Для учета сезонных изменений рассеивающей способности атмосферного воздуха, массив обучающих данных дополнен столбцом, соответствующим смене сезонов (1 – зима, 2 – весна, 3 – лето, 4 – осень).

Далее каждая строка была дополнена результатами измерений концентрации  $\text{NO}_x$  и метеорологических факторов за двое предыдущих суток. Суммарное количество столбцов в полученном наборе данных составило 25 (1 – информационный столбец (дата), 24 – данные, участвующие в обучении).

Проектировалась нейросетевая модель – MLP. На основе изучения литературных данных выбрана архитектура с одним скрытым слоем и гиперболическими тангенсами в качестве активационных функций нейронов [236].

Для проектирования и обучения использовалась аналитическая платформа KNIME Analytics platform с интеграцией Keras.

По результатам предварительного тестирования наиболее простой архитектуры нейронной сети на полученном наборе обучающих данных конкретизированы следующие параметры обучения:

- нормализация  $\min/\max$  с минимумом -1 и максимумом +1;
- функция потерь – среднеквадратическая ошибка;

– алгоритм обучения – RMSprop (Root Mean Square Propagation).

В качестве меры точности полученных моделей выбраны коэффициент детерминации  $R^2$  / скорректированный с учетом количества входов модели коэффициент детерминации  $R^2_{adj}$ , средняя абсолютная ошибка (Mean Absolute Error – MAE), средняя относительная ошибка (Mean Percentage Error – MPE).

$$R^2 = 1 - \frac{SS_{res}}{SS_{tot}} = 1 - \frac{\sum (p_i - r_i)^2}{\sum (r_i - \frac{\sum r_i}{n})^2},$$

$$R^2_{adj} = 1 - (1 - R^2)(n - 1)/(n - p - 1),$$

$$MAE = \frac{\sum |p_i - r_i|}{n},$$

$$MPE = \frac{1}{n} \sum \frac{|p_i - r_i|}{|r_i|},$$

где:  $p_i$  – ответы нейронной сети;

$r_i$  – значения концентраций  $\text{NO}_x$ , представленные для обучения;

$n$  – общий размер обучающей выборки;

$p$  – количество параметров обучения.

При проектировании нейросетевой модели из первоначального массива 10 % были отделены для дальнейшего финального тестирования моделей после их обучения. В обучении эти данные не участвовали. Оставшиеся данные использовались в соотношении 90 % для обучения нейронной сети, 10 % – для валидации.

Результаты обучения нейросетевых моделей для расчета среднесуточной концентрации  $\text{NO}_x$  по мере усложнения архитектуры представлены в таблице 4.3.

Как можно видеть из представленной таблицы, первоначальная архитектура, использующая в качестве входных данных лишь текущие метеорологические условия, при невысоких значениях среднего абсолютного и относительного отклонений обладает недостаточной предсказательной точностью за счет низких значений коэффициентов детерминации. Дополнение входного набора данными производственного календаря совместно с сезонностью приводит к незначительному улучшению качества модели.

Таблица 4.3 – Результаты обучения нейросетевых моделей для расчета среднесуточной концентрации  $\text{NO}_x$

| Набор входных данных;<br>количество нейронов во входном слое/количество нейронов<br>скрытого слоя/количество выходных нейронов;<br>количество эпох обучения                                                                                                                     | $R^2 / R^2_{\text{adj}}$ | MAE,<br>мг/м <sup>3</sup> | MPE, % |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------|---------------------------|--------|
| Метеорологические условия в текущую дату; 6/6/1; 200 эпох                                                                                                                                                                                                                       | 0,202/0,118              | 0,025                     | 31,3   |
| Метеорологические условия в текущую дату + данные<br>производственного календаря + сезон; 8/8/1; 200 эпох                                                                                                                                                                       | 0,266/0,159              | 0,016                     | 28,1   |
| Метеорологические условия в текущую дату +<br>метеорологические условия в предыдущие сутки +<br>концентрация $\text{NO}_x$ в предыдущие сутки + данные<br>производственного календаря + сезон; 15/15/1; 200 эпох                                                                | 0,589/0,446              | 0,014                     | 18,3   |
| Метеорологические условия в текущую дату +<br>метеорологические условия за двое предыдущих суток +<br>концентрации $\text{NO}_x$ за двое предыдущих суток + данные<br>производственного календаря + сезон; 22/22/1; 200 эпох                                                    | 0,608/0,369              | 0,014                     | 18,6   |
| Метеорологические условия в текущую дату +<br>метеорологические условия в предыдущие сутки +<br>концентрация $\text{NO}_x$ в предыдущие сутки + данные<br>производственного календаря + сезон; 15/30/1; 5000 эпох со<br>значением параметра скорости обучения, равным $10^{-4}$ | 0,667/0,551              | 0,013                     | 17,8   |

Дополнение входного набора результатами измерений за предыдущие сутки существенно улучшает качество модели. При этом расширение набора данными за двое предыдущих суток не улучшает качество расчетов.

Наилучшими характеристиками точности обладает модель, обученная в течении 5000 эпох, использующая в качестве входных данных 15 параметров:

- актуальные среднесуточные атмосферное давление, интенсивность осадков, направление ветра, относительная влажность, скорость ветра, температура;
- среднесуточные атмосферное давление, интенсивность осадков, направление ветра, относительная влажность, скорость ветра, температура в предшествующие сутки;
- среднесуточная концентрация  $\text{NO}_x$  в предшествующие сутки;
- рабочий/выходной день (0/1);
- сезон.

Результат работы обученной нейронной сети данных измерений концентраций  $\text{NO}_x$ , не участвовавших в обучении модели, представлен на рисунках 4.9-4.10.

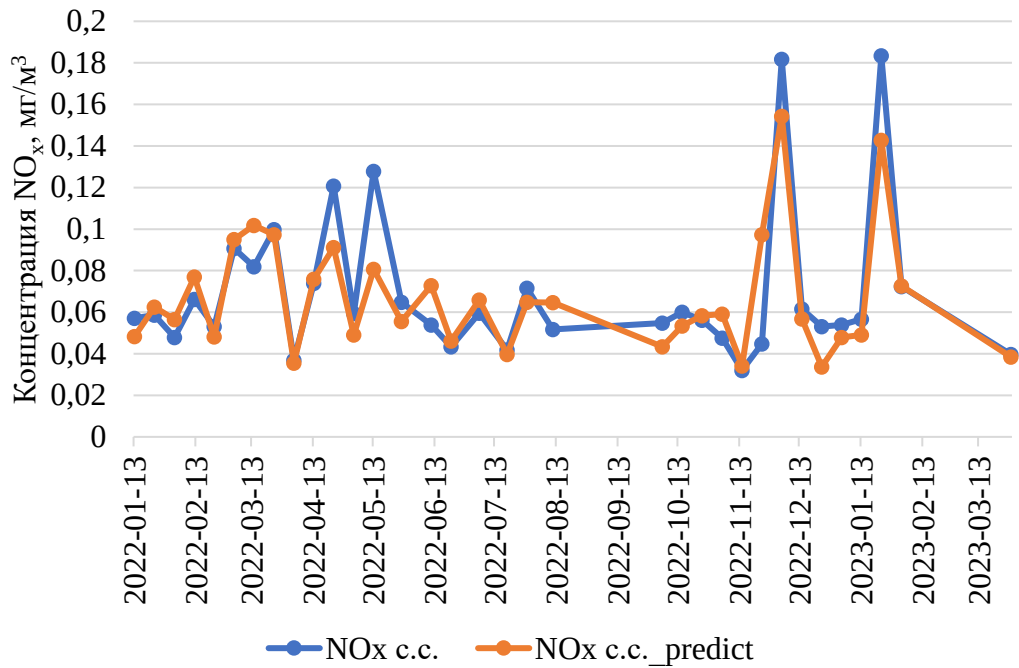


Рисунок 4.9 – Сопоставление измеренных (синяя линия) и рассчитанных нейронной сетью (оранжевая линия) концентраций  $\text{NO}_x$

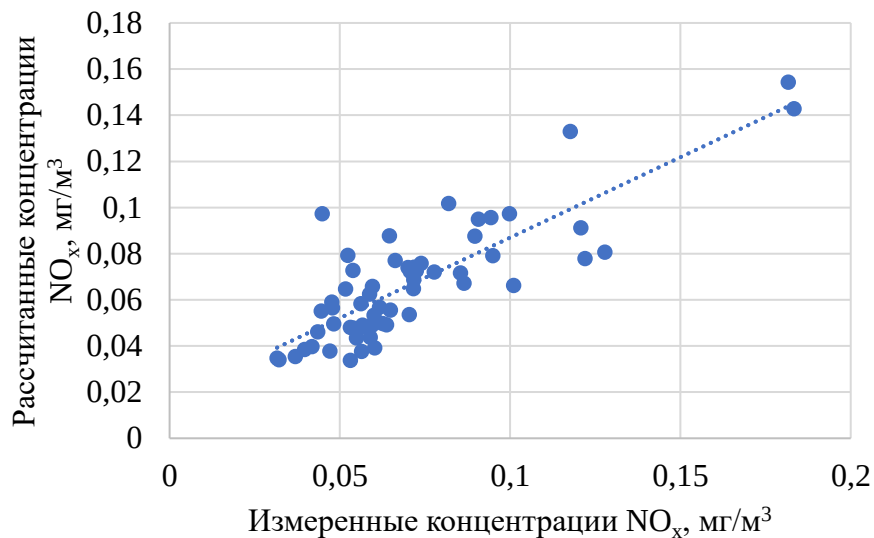


Рисунок 4.10 – Сопоставление значений измеренных и рассчитанных нейронной сетью концентраций  $\text{NO}_x$

Анализ результатов работы нейронной сети на данных, не участвовавших в обучении, показывает, что в 86,2 % случаев нейросетевая модель правильно предсказывает повышение концентрации  $\text{NO}_x$  выше 50-процентиля ряда среднесуточных концентраций. Таким образом, полученная нейросетевая модель может успешно применяться на практике для определения ожидаемого роста

среднесуточных уровней загрязнения, например, при проведении производственного экологического контроля или осуществлении государственного экологического контроля для разработки программы маршрутных наблюдений за загрязнением атмосферного воздуха.

#### 4.4 Заключение по главе 4

В главе предложен и обоснован методический подход к формированию ПЭК для объектов, оказывающих негативное воздействие на атмосферный воздух, в условиях отсутствия нормативных требований. В основу подхода положен риск-ориентированный принцип с использованием вероятностного критерия опасности, который определяет вероятность превышения примесями их пороговых концентраций в пределах разных зон. Данный критерий позволяет ранжировать ЗВ и точки контроля по приоритетности.

Разработан алгоритм, включающий проведение расчетов рассеивания в УПРЗА «Эколог», нейросетевую кластеризацию точек наблюдения для выделения однородных зон по уровню опасности, а также обоснование перечня контролируемых веществ и периодичности контроля.

Апробация подхода на примере предприятия химической отрасли показала, что приоритетными ЗВ во всех выделенных кластерах являются фенол,  $\text{NO}_2$  и бензол. Для точек с очень высоким уровнем опасности рекомендован непрерывный автоматический контроль, для точек со средним – ежеквартальный, с низким – разовый.

Дополнительно разработана нейросетевая модель для прогноза среднесуточных концентраций  $\text{NO}_x$  на основе метеопараметров, данных об уровне концентрации ЗВ за предыдущие сутки, учета сезона и типа дня (рабочий/выходной). Модель показала правильность предсказания изменения концентраций выше 50-перцентиля в 86,2 % случаев, что подтверждает ее практическую применимость для оперативного планирования наблюдений.

## **Глава 5. Подходы для учета залповых выбросов при работе стационарных источников**

### **5.1 Значимость и способы учета залповых выбросов**

Ведение государственного учета стационарных источников выбросов осуществляется на основе данных об инвентаризации выбросов ЗВ в атмосферный воздух и их источников, проводимой юридическими лицами и индивидуальными предпринимателями, эксплуатирующими стационарные источники выбросов. Инвентаризация выбросов, корректировка ее данных осуществляются в порядке, определенном приказом Минприроды России от 19 ноября 2021 г. № 871 [237]. Согласно данному приказу при проведении инвентаризации выбросов должны быть выявлены и учтены все стационарные источники загрязнения атмосферного воздуха (ИЗАВ), в том числе стационарные источники залповых выбросов, установлены их характеристики, а также определены количественные и качественные показатели выбросов из всех ИЗАВ. Для стационарных источников залповых выбросов должны быть определены периодичность, продолжительность и условия, при которых возможны залповые выбросы.

Обязательный учет залповых выбросов в атмосферный воздух предусмотрен также методикой расчета и установления нормативов допустимых выбросов ЗВ в атмосферный воздух, утвержденной приказом Минприроды России от 11 августа 2020 г. № 581 [83], предусматривающей определение максимально безопасного для окружающей среды режима осуществления выбросов их ЗВ. Согласно данной методике, при расчете нормативов ПДВ данные о каждом стационарном источнике должны быть определены исходя из условий работы технологического оборудования в режиме, при котором выбросы по конкретному ЗВ достигают максимальных значений.

Одним из препятствий в реализации, предусмотренных требованиями законодательства России работ, направленных на минимизацию негативного воздействия на атмосферный воздух, в настоящее время является, в том числе,

отсутствие в природоохранных нормативных правовых актах четкого определения понятия «залповые выбросы».

В соответствии с разъяснениями, содержащимися в Методическом пособии по расчету, нормированию и контролю выбросов ЗВ в атмосферный воздух, подготовленном в 2012 г. ОАО «НИИ Атмосфера» [165], залповые выбросы, как сравнительно непродолжительные и обычно во много раз превышающие по мощности средние выбросы, присущи многим производствам. Их наличие предусматривается технологическим регламентом и обусловлено проведением отдельных (специфических) стадий определенных технологических процессов, например, очистка поверхностей котлов и пусковые операции на котлах в теплоэнергетике, стадия розжига в производственных печах, стадии продувки и подтопки в конверторах, взрывные работы и др. Как показывает анализ технологических регламентов различных производств, качественные показатели параметров залповых выбросов существенно отличаются от аналогичных характеристик при штатном режиме работы оборудования. Диапазон значений отношения максимальных разовых выбросов (г/с) при залповой и штатной ситуациях может изменяться до 2-3 тыс. раз. Определение численных критериев отнесения выбросов к категории «залповых» должно осуществляться в разрезе конкретных отраслей промышленности на основе анализа результатов инвентаризации выбросов, исходя из описаний технологических регламентов работы оборудования.

Поступление в атмосферный воздух значительного количества ЗВ за относительно непродолжительный период времени в ходе залповых выбросов может являться причиной некорректного их отождествления с аварийными выбросами. В этой связи следует отметить, что основным отличием указанных видов выбросов является то, что залповые выбросы, в отличие от аварийных, являются неотъемлемой частью выполняемых на объектах технологических процессов, и, в ряде случаев, связаны с выполнением работ, направленных именно на предотвращение аварийных ситуаций. С учетом этого, нормативными правовыми актами РФ, регламентирующими выполнение инвентаризации выбросов [237] и

расчетов нормативов выбросов [83], предусматривается обязательность учета залповых выбросов и не предусматривается учет аварийных выбросов.

Также важно, что учет максимально полных и достоверных данных об осуществлении залповых выбросов необходим в соответствии с требованиями к мероприятиям по уменьшению выбросов ЗВ в атмосферный воздух в периоды НМУ, утвержденными приказом Минприроды России от 28 ноября 2019 г. № 811 [238], Наступление НМУ, согласно ФЗ от 4 мая 1999 г. № 96-ФЗ [36] может приводить к изменению состояния атмосферного воздуха, угрожающему жизни и здоровью людей. Согласно приказу Минприроды России от 28 ноября 2019 г. № 811 [238] в периоды НМУ всех трех возможных степеней опасности (1, 2 и 3) залповые выбросы запрещены (кроме случаев, когда уже проводятся технологические операции, по подготовке к проведению залповых выбросов).

Эффективному выявлению и учету периодов осуществления залповых выбросов при проведении работ, направленных на минимизацию негативного воздействия на атмосферный воздух, должно способствовать также наличие данных о таком типе выбросов в составе применяемых в РФ стандартов, а также методик расчета выбросов ЗВ в атмосферный воздух стационарными источниками, ведение Перечня которых осуществляется Минприроды России. В таблице приведены ссылки на вышеуказанные стандарты и методики, в составе которых приводятся данные о залповых выбросах.

Таблица 5.1 – Применяемые в РФ стандарты, информационно-технические справочники и методики расчета выбросов ЗВ в атмосферный воздух стационарными источниками, в составе которых приводятся данные о залповых выбросах

| Стандарты, информационно-технические справочники и методики расчета выбросов                                                                                                                                                                                       | Производственные процессы, связанные с залповыми выбросами         |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------|
| 1                                                                                                                                                                                                                                                                  | 2                                                                  |
| Методика расчета количества отходящих, уловленных и выбрасываемых в атмосферу ЗВ при проведении взрывных работ в разрезах (карьерах). Сведения о Методике расчета внесены в Перечень методик расчета выбросов распоряжением Минприроды России от 24.06.2019 № 19-р | проведение взрывных работ (залповые выбросы) в разрезах (карьерах) |

Продолжение таблицы 5.1

| 1                                                                                                                                                                                                                                                                               | 2                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Методические указания по расчету залповых выбросов природного газа в атмосферу при технологических операциях на линейной части магистральных трубопроводов. М., 2009. Сведения внесены в Перечень методик расчета выбросов распоряжением Минприроды России от 28.06.2021 № 22-р | залповые выбросы при продувках и стравливании на линейной части магистрального газопровода                                                                                                                                                                                                                           |
| Расчет и нормирование залповых выбросов природного газа в атмосферу при технологических операциях на линейной части магистральных газопроводов. Сведения внесены в Перечень методик расчета выбросов распоряжением Минприроды России от 28.06.2021 № 22-р                       | залповые выбросы природного газа (метана) при продувках и стравливании на линейной части магистральных газопроводов                                                                                                                                                                                                  |
| Национальный стандарт РФ ГОСТ Р 113.05.02-2024 «НДТ. Системы автоматического контроля и учета выбросов ЗВ при производстве листового и тарного стекла. Основные требования» (Национальный стандарт РФ, 2024)                                                                    | залповые выбросы: при розжиге печей, переводе пламени                                                                                                                                                                                                                                                                |
| Национальный стандарт РФ ГОСТ Р 113.06.01-2023 «НДТ. Системы автоматического контроля выбросов в производстве цемента. Общие требования к организации автоматического контроля и выбору измерительных секций и мест измерений»                                                  | залповые выбросы: при розжиге печей                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| Межгосударственный стандарт ГОСТ 34070-2017 «Система газоснабжения. Магистральная трубопроводная транспортировка газа. Мобильная компрессорная станция. Технические требования»                                                                                                 | залповые выбросы газа при продувке и/или стравливании через свечи трубопроводов обвязки МКС и свечи кранового узла газопровода                                                                                                                                                                                       |
| ИТС НДТ 28-2021 «Добыча нефти»                                                                                                                                                                                                                                                  | залповые выбросы: проведение профилактических работ на нефте- и газопроводах; сброс газа на продувочные свечи при запуске оборудования; сброс на свечу с газоуравнительной линии нефтеналивных терминалов; стравливание газа из межколонного пространства на импульсные трубки на площадках эксплуатационных скважин |
| ИТС 29-2017 «Добыча природного газа»                                                                                                                                                                                                                                            | залповые выбросы от «свечей» при периодических продувках технологического оборудования                                                                                                                                                                                                                               |

Как видно из данных, приведенных в таблице 5.1, не для всех производственных процессов определены периоды осуществления залповых выбросов, в том числе отсутствуют стандарты и методики расчета выбросов для таких широко распространенных на территории РФ производств, как производство

тепла и электроэнергии; химические и нефтехимические производства; производство различного вида топлив; эксплуатация печного оборудования; выполнение погрузочно-разгрузочных работ с сыпучими материалами и др.

Важно также отметить, что при проведении ПЭК в области охраны атмосферного воздуха должна быть определена периодичность выполнения контроля в отношении каждого стационарного источника выбросов и выбрасываемого им ЗВ, включая случаи перевода технологического оборудования на новый постоянный режим работы и завершения капитального ремонта или реконструкции установки [42], т.е. фактически в периоды осуществления залповых выбросов. Таким образом, обеспечение полноценного учета залповых выбросов в атмосферный воздух имеет крайне важное значение для эффективного проведения ПЭК, выполняемого в целях реализации мероприятий по охране окружающей среды, рациональному использованию и восстановлению природных ресурсов.

Таким образом, в целях обеспечения экологической безопасности территорий и защиты населения от загрязнения атмосферного воздуха, необходимо закрепить на законодательном уровне понятие залповых выбросов, утвердить перечень видов производств, работа которых сопровождается залповыми выбросами, и в дальнейшем обеспечить контроль полноты учета таких выбросов при рассмотрении материалов инвентаризации выбросов ЗВ уполномоченными государственными органами.

Максимально полный учет залповых выбросов в атмосферный воздух позволит также повысить эффективность использования систем сводных расчетов загрязнения атмосферы, признанных в РФ одним из основных инструментов управления качеством воздуха и используемых в настоящее время для определения потенциальных источников загрязнения атмосферы, работа которых приводит к превышениям допустимого содержания ЗВ в воздухе [239].

Выполнение максимально полного учета залповых выбросов в атмосферный воздух при работе стационарных источников позволит обеспечить эффективность работ, направленных на минимизацию негативного воздействия производственной

деятельности на качество окружающей среды в целях обеспечения экологического благополучия территорий.

## 5.2 Пример учета залповых выбросов для выбросов предприятия химической отрасли

Для исследования использовались данные о выбросах крупного предприятия химической отрасли. В отчете инвентаризации данного предприятия отсутствует четкое разграничение на штатные и залповые выбросы. Выделение последней категории выбросов проводится в ряде случаев основываясь на коротком времени осуществления выбросов. Это приводит к необоснованному отнесению к «залповым» ряда штатных выбросов и, одновременно, к исключению из учета истинно залповых выбросов, растянутых во времени из-за особенностей технологии.

Для определения приземных концентраций ЗВ определен набор расчетных точек, расположенных вдоль границы санитарно-защитной зоны (СЗЗ) основной промышленной площадки предприятия с шагом 200 м (рисунок 5.1, таблица 5.2).

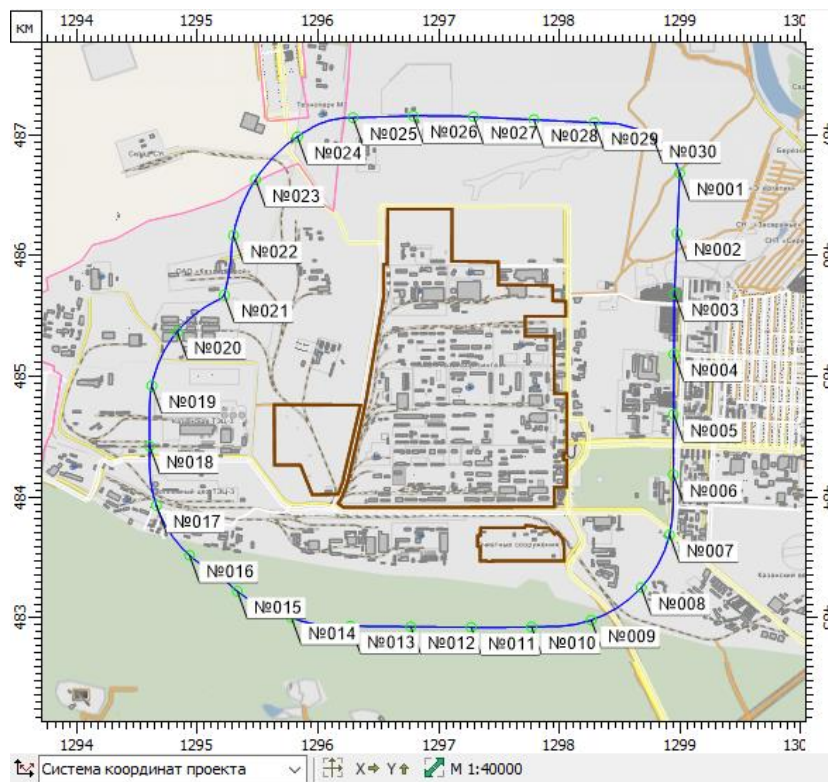


Рисунок 5.1 – Карта расположения расчетных точек

Таблица 5.2 – Набор расчетных точек для определения приземных концентраций ЗВ

| Код | Координаты (м) |           | Тип точки      |
|-----|----------------|-----------|----------------|
|     | X              | Y         |                |
| 1   | 1298990,30     | 486677,77 | на границе СЗЗ |
| 2   | 1298968,61     | 486178,24 | на границе СЗЗ |
| 3   | 1298946,93     | 485678,71 | на границе СЗЗ |
| 4   | 1298941,97     | 485178,77 | на границе СЗЗ |
| 5   | 1298939,25     | 484678,78 | на границе СЗЗ |
| 6   | 1298936,52     | 484178,79 | на границе СЗЗ |
| 7   | 1298905,68     | 483681,08 | на границе СЗЗ |
| 8   | 1298671,86     | 483245,03 | на границе СЗЗ |
| 9   | 1298257,19     | 482975,16 | на границе СЗЗ |
| 10  | 1297763,05     | 482919,43 | на границе СЗЗ |
| 11  | 1297263,10     | 482915,45 | на границе СЗЗ |
| 12  | 1296763,12     | 482920,34 | на границе СЗЗ |
| 13  | 1296263,15     | 482925,23 | на границе СЗЗ |
| 14  | 1295772,87     | 482998,97 | на границе СЗЗ |
| 15  | 1295325,71     | 483214,21 | на границе СЗЗ |
| 16  | 1294929,97     | 483512,99 | на границе СЗЗ |
| 17  | 1294656,43     | 483924,66 | на границе СЗЗ |
| 18  | 1294598,62     | 484418,05 | на границе СЗЗ |
| 19  | 1294617,85     | 484916,66 | на границе СЗЗ |
| 20  | 1294829,01     | 485363,37 | на границе СЗЗ |
| 21  | 1295218,06     | 485669,05 | на границе СЗЗ |
| 22  | 1295294,18     | 486162,10 | на границе СЗЗ |
| 23  | 1295477,79     | 486623,06 | на границе СЗЗ |
| 24  | 1295823,55     | 486979,02 | на границе СЗЗ |
| 25  | 1296283,79     | 487137,39 | на границе СЗЗ |
| 26  | 1296783,57     | 487152,09 | на границе СЗЗ |
| 27  | 1297283,41     | 487144,42 | на границе СЗЗ |
| 28  | 1297782,83     | 487120,39 | на границе СЗЗ |
| 29  | 1298282,26     | 487096,36 | на границе СЗЗ |
| 30  | 1298764,03     | 486991,41 | на границе СЗЗ |

В 30 контрольных точках СЗЗ были определены максимальные разовые концентрации ЗВ, выбрасываемых источниками основной промышленной площадки предприятия, с помощью программы УПРЗА «Эколог-Город», разработанной фирмой «Интеграл», г. Санкт-Петербург. При проведении инвентаризации выбросов ЗВ предприятием, имеющим на балансе данную промышленную площадку, было определено три режима выбросов ЗВ:

- штатный режим;
- режим с учетом залповых выбросов;

– режим с учетом залповых и аварийных выбросов.

Для расчетов полей концентраций нами была выбрана расчетная площадка 10000x10000, которая включает территорию промышленной площадки, а также территории за ее границами.

При проведении инвентаризации выбросов в ее состав были ошибочно внесены аварийные выбросы. Учитывая характер возможных аварийных ситуаций на химических производствах, а также учитывая положения ФЗ от 21 июля 1997 г. № 116-ФЗ «О промышленной безопасности опасных производственных объектов» [240], вероятнее всего данный режим необходимо относить к выбросам, произошедшим в результате инцидентов, т.е. отказов технических устройств, применяемых на опасном производственном объекте, отклонений от установленного режима технологического процесса, без разрушения сооружений или технических устройств. При этом, исходя из существующих требований по проведению инвентаризации выбросов, учет инцидентов, возникновение которых всегда связано с отхождением от утвержденных технологических регламентов, также не должны учитываться в материалах инвентаризаций.

Расчеты выбросов производились нами по сокращенному перечню веществ, масса или параметры выбросов которых изменяются вследствие перехода из штатного режима работы. Результаты расчета концентраций ЗВ по сокращенному перечню представлен в таблице 5.3.

Очевидно, при разработке нормативов ПДВ расчеты концентраций ЗВ в приземном слое атмосферы проводились только в штатных условиях (таблица 5.3). Залповые выбросы при проведении расчетов рассеивания для расчета нормативов выбросов не учитывались, что является некорректным [241].

В соответствии с порядком проведения инвентаризации выбросов, утвержденным приказом Минприроды РФ от 19.11.2021 № 871 [237], характеристики ИЗАВ и показатели выбросов должны определяться для всех основных режимов работы технологического оборудования (установки) и стадий технологических процессов.

Таблица 5.3 – Результаты расчета концентраций ЗВ для основной промышленной площадки предприятия химической отрасли

| Код ЗВ<br>или групп<br>их<br>суммаций | Наименование                                           | ПДК,<br>мг/м <sup>3</sup> | Максимальная концентрация, доли<br>ПДК |                     |                                   |
|---------------------------------------|--------------------------------------------------------|---------------------------|----------------------------------------|---------------------|-----------------------------------|
|                                       |                                                        |                           | Штатный<br>режим                       | Залповые<br>выбросы | Аварийные+<br>залповые<br>выбросы |
| 0301                                  | Азота диоксид                                          | 0,2                       | 0,76                                   | 1,77                | 1,77                              |
| 0304                                  | Азот оксид                                             | 0,4                       | 0,08                                   | 0,15                | 0,15                              |
| 0328                                  | Углерод                                                | 0,15                      | 0,05                                   | 30,53               | 30,53                             |
| 0333                                  | Дигидросульфид                                         | 0,008                     | 0,032                                  | 0,03                | 0,031                             |
| 0337                                  | Углерода оксид                                         | 5                         | 0,08                                   | 7,70                | 7,7                               |
| 0410                                  | Метан                                                  | 50                        | 0,00                                   | 0,12                | 0,12                              |
| 1071                                  | Гидроксибензол                                         | 0,01                      | 0,45                                   | 0,50                | 4,41                              |
| 1080                                  | Бисфенол А                                             | 0,04                      | 0,05                                   | 0,05                | 0,31                              |
| 1716                                  | Одорант СПМ                                            | 0,012                     | 0,00                                   | 0,01                | 0,01                              |
| 6003                                  | Аммиак, сероводород                                    | 1                         | 0,09                                   | 0,09                | 0,09                              |
| 6004                                  | Аммиак, сероводород,<br>формальдегид                   | 1                         | 0,09                                   | 0,09                | 0,09                              |
| 6007                                  | Азота диоксид, гексан, углерода<br>оксид, формальдегид | 1                         | 0,81                                   | 9,44                | 9,44                              |
| 6008                                  | Азота диоксид, гексен, серы<br>диоксид, углерода оксид | 1                         | 0,82                                   | 9,45                | 9,45                              |
| 6013                                  | Ацетон и фенол                                         | 1                         | 0,63                                   | 0,63                | 4,51                              |
| 6032                                  | Озон, двуокись азота и<br>формальдегид                 | 1                         | 0,76                                   | 1,77                | 1,77                              |
| 6035                                  | Сероводород, формальдегид                              | 1                         | 0,03                                   | 0,04                | 0,04                              |
| 6038                                  | Серы диоксид и фенол                                   | 1                         | 0,50                                   | 0,50                | 4,42                              |
| 6040                                  | Серы диоксид и трехокись серы,<br>аммиак               | 1                         | 0,89                                   | 1,9                 | 1,97                              |
| 6043                                  | Серы диоксид и сероводород                             | 1                         | 0,04                                   | 0,05                | 0,04                              |
| 6048                                  | Фенол и ацетофенон                                     | 1                         | 0,50                                   | 0,50                | 4,42                              |
| 6052                                  | Уксусная кислота, фенол и<br>этилацетат                | 1                         | 0,50                                   | 0,50                | 4,42                              |
| 6204                                  | Азота диоксид, серы диоксид                            | 1,6                       | 0,48                                   | 1,11                | 1,11                              |

В соответствии с методикой расчета и установления нормативов допустимых выбросов, утвержденной приказом Минприроды России от 11.08.2020 № 581 [83], при разработке ПДВ данные о каждом стационарном источнике должны определяться исходя из условий работы технологического оборудования в режиме, при котором выбросы по конкретному ЗВ достигают максимальных значений.

Залповый выброс является частью технологического процесса. В то же время, залповые выбросы – это выбросы, сопряженные с поступлением в атмосферный воздух значительного количества ЗВ. Таким образом, их учет является

обязательным для получения корректных результатов оценки воздействия выбросов объекта на прилегающие территории.

Как следствие, максимальные приземные концентрации для таких веществ, как  $\text{NO}_2$ , углерод, СО и сопутствующие суммы, оказались заниженными по сравнению с расчетом, выполненным с учетом пиковых нагрузок во время данных выбросов. Это говорит о потенциальном превышении гигиенических нормативов качества атмосферного воздуха в периоды проведения указанных операций.

При учете в расчете источников, идентифицированных в инвентаризации как аварийные, дополнительно происходит превышение ПДК для гидроксibenзола и суммы с данным веществом.

Согласно п. 9 требований к мероприятиям по уменьшению выбросов ЗВ в атмосферный воздух в периоды НМУ, утвержденных приказом Минприроды № 651 от 26.11.2025 г., при наступлении НМУ осуществление залповых выбросов ЗВ в атмосферный воздух подлежит запрету.

Данное требование является прямым следствием положений статьи 19 ФЗ от 04.05.1999 г. № 96-ФЗ [36]. Обоснование такого запрета заключается в том, что в период НМУ (приземные инверсии, штили, туманы) процессы рассеивания ЗВ в приземном слое атмосферы резко ослаблены, что создает предпосылки для кратковременного формирования экстремально высоких приземных концентраций, значительно превышающих гигиенические нормативы.

В связи с этим, важна корректная идентификация в рамках инвентаризации всех стационарных источников, эксплуатация которых связана с залповыми выбросами. Для каждого такого источника в соответствии с приказом Минприроды России от 19.11.2021 г. № 871 [237] должны быть установлены условия, при которых его эксплуатация должна быть запрещена.

Проведенный анализ демонстрирует, что формальный подход к заполнению разделов отчета инвентаризации, игнорирование требований к описанию условий возникновения залповых выбросов и их исключение из процедуры нормирования приводят к недостоверной оценке экологической обстановки.

В целях ликвидации неопределенности в идентификации залповых выбросов при проведении работ по инвентаризации источников и выбросов вредных веществ в атмосферный воздух необходимо ввести четкую трактовку понятия «залповые выбросы».

На основе проведенного анализа материалов инвентаризации выбросов ЗВ крупнейших объектов химической отрасли и технологических процессов, обеспечивающих стабильное функционирование аппаратов, предлагается определить понятие «залповые выбросы» как «непродолжительный (не более 48 ч) режим выбросов ЗВ в атмосферный воздух, являющийся неотъемлемой частью технологического процесса производства и/или технического обслуживания производственного оборудования, сопряженный с увеличением мощности выбросов ЗВ в атмосферный воздух на 30 и более % в сравнении с штатным режимом работы оборудования».

Закрепление понятия залповых выбросов обеспечит точность их идентификации при проведении работ по инвентаризации выбросов.

### **5.3 Моделирование загрязнения атмосферного воздуха в условиях отсутствия данных о режимах работы источников выбросов**

В рамках настоящего раздела поставлена задача разработки способа расчета разовых концентраций на основе набора наиболее релевантных, но при этом доступных входных параметров, обуславливающих процессы распространения ЗВ в приземном слое атмосферного воздуха. С учетом результатов обработки данных измерений АСКЗА, полученных ранее (см. главу 3), для моделирования в качестве наиболее приоритетного вещества выбран  $\text{NO}_2$ .

Как рассматривалось нами ранее, концентрации вредных веществ, в том числе и  $\text{NO}_2$ , в приземном слое атмосферного воздуха формируются под воздействием метеорологических условий, параметров выбросов, а также процессов химической трансформации, протекающих в воздушной среде. При этом, данные о текущих актуальных параметрах выбросов ЗВ из антропогенных

источников, оказывающих воздействие на исследуемую территорию, как правило недоступны. Поэтому, в рамках решения поставленной задачи тестируется подход, при котором исходные данные для проектирования и обучения нейронной сети предварительно подвергаются кластеризации с выделением кластеров со значимыми различиями в изменении концентраций  $\text{NO}_2$  в зависимости от расширенного набора предикторов, для каждого из которых в последствии обучается собственная нейронная сеть с индивидуальными показателями точности.

Пусть  $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  - вектор входных признаков, включающий температуру воздуха, влажность, атмосферное давление, другие метеопараметры. Задача прогнозирования концентраций  $\text{NO}_2$  может быть представлена как задача восстановления неизвестного нелинейного отображения:

$$y = f(X) + \varepsilon,$$

где:  $y$  – наблюдаемое значение концентраций  $\text{NO}_2$ ;

$X$  – вектор входных признаков;

$f(X)$  – неизвестная функциональная зависимость;

$\varepsilon$  – случайная составляющая, отражающая шум и неучтенные факторы.

Необходимо построить модель, способную с высокой точностью аппроксимировать функцию  $f(X)$  на основе имеющихся экспериментальных данных.

На этапе предварительных разведывательных численных экспериментов предпринималась попытка использовать относительную процентную ошибку вида:

$$\delta = \frac{|y - \hat{y}|}{y} \cdot 100\%$$

Однако для рассматриваемой задачи данная метрика оказалась недостаточно корректной. Это связано с тем, что концентрация  $\text{NO}_2$  в ряде наблюдений принимает очень малые значения, близкие к нулю. В подобных случаях даже небольшое абсолютное отклонение приводит к искусственно завышенным

значениям процентной ошибки, достигающим сотен процентов. Таким образом, процентная ошибка не отражает реального качества модели и может приводить к неверной интерпретации результатов.

Для корректной количественной оценки качества построенных моделей прогнозирования было решено использовать набор метрик, широко применяемых в задачах регрессионного анализа: коэффициент детерминации  $R^2$ , средняя абсолютная ошибка (MAE) и среднеквадратичная ошибка (RMSE). Использование нескольких метрик одновременно позволяет более полно охарактеризовать качество модели, поскольку каждая из них отражает различные аспекты точности прогнозирования.

Основной метрикой качества в работе являлся коэффициент детерминации  $R^2$ :

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2},$$

где:  $y_i$  – истинное значение концентраций  $\text{NO}_2$ ;

$\hat{y}_i$  – предсказанное моделью значение;

$\bar{y}$  – среднее значение целевой переменной;

$n$  – число наблюдений.

Коэффициент детерминации показывает, какая доля дисперсии исходных данных объясняется моделью. Значение  $R^2 = 1$  соответствует идеальному совпадению прогноза и реальных данных, тогда как значение, близкое к нулю, свидетельствует о низкой информативности модели. Для расчета приземных концентраций данная метрика является особенно важной, поскольку позволяет оценить способность модели воспроизводить общую структуру сложного нелинейного процесса.

Средняя абсолютная ошибка (Mean Absolute Error – MAE) определяется выражением:

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|.$$

Метрика MAE характеризует среднее абсолютное отклонение прогнозируемых значений от реальных. В отличие от квадратичных метрик, MAE менее чувствительна к единичным выбросам и экстремальным значениям. Использование MAE в данной работе позволяет оценить средний уровень ошибки модели в физических единицах измерения концентрации NO<sub>2</sub>.

Среднеквадратичная ошибка (Root Mean Square Error – RMSE) рассчитывается по формуле:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}.$$

Данная метрика сильнее штрафует большие ошибки, поскольку использует квадратичную зависимость. Это особенно важно для задач определения приземных концентраций примесей, где существенные ошибки прогнозирования могут приводить к некорректным оценке и выбору воздухоохраных решений. Также RMSE является одной из наиболее информативных метрик для оценки устойчивости модели.

Таким образом, в качестве основных критериев качества были выбраны метрики  $R^2$ , MAE и RMSE, обеспечивающие устойчивую и объективную оценку точности прогнозирования.

Многослойный персептрон представляет собой классическую архитектуру ИНС, реализующую нелинейное отображение входного пространства признаков в выходное пространство значений:

$$\hat{y} = W_3 \cdot \sigma(W_2 \cdot \sigma(W_1 X + b_1) + b_2) + b_3,$$

где:  $X$  – вектор входных признаков;

$W_i$  – матрицы весовых коэффициентов;

$b_i$  – векторы смещений;

$\sigma$  – функция активации;

$\hat{y}$  – прогнозируемое значение концентраций  $\text{NO}_2$ .

Выбор данной архитектуры обусловлен рядом причин. Во-первых, атмосферные процессы обладают выраженной нелинейностью, то есть зависимость концентраций  $\text{NO}_2$  от метеорологических факторов определяется сложным влиянием их совокупности. Например, температура нелинейным образом, влияет на интенсивность химических реакций, изменяет механизм их протекания, и т.п. Многослойный персептрон способен аппроксимировать функции практически любой сложности. Согласно теореме универсальной аппроксимации, нейронная сеть с хотя бы одним скрытым слоем способна приближать произвольную непрерывную функцию с заданной точностью. Это делает MLP эффективным инструментом для моделирования сложных нелинейных процессов, протекающих в приземном слое атмосферного воздуха.

Другим важным преимуществом нейронных сетей является способность автоматически выявлять скрытые взаимосвязи между признаками без необходимости явного задания аналитической модели. В отличие от классических статистических методов нейросеть не требует предварительного задания структуры зависимости, самостоятельно определяет наиболее значимые комбинации признаков и способна выявлять скрытые закономерности, неочевидные при традиционном анализе данных. Это особенно важно для атмосферных процессов рассеивания компонентов выбросов, характеризующихся высокой сложностью и большим числом скрытых значимых факторов.

Немаловажным фактором является устойчивость нейронных сетей к многомерности данных. Исходная база данных включает большое количество параметров, характеризующих условия формирования приземных концентраций. Для подобных задач характерна высокая размерность пространства признаков. Благодаря распределенному представлению информации и способности формировать внутренние абстрактные признаки, многослойный персептрон

хорошо работает в условиях многомерных данных. В то же время многослойный персептрон эффективен и при работе с большими данными. Так, используемый в работе база данных содержит более 216 тыс. наблюдений, и для таких объемов данных нейросетевые методы способны обеспечить высокую масштабируемость и устойчивость к шуму.

Архитектура MLP легко адаптируется под конкретную задачу путем изменения числа скрытых слоев, регулирования количество нейронов, выбором различных функций активации и изменением алгоритмов оптимизации. Это позволяет подбирать структуру сети в зависимости от сложности данных и требуемой точности прогнозирования. На основе этого свойства использование многослойного персептрона создает основу для дальнейшего развития модели с расширенным или сокращенным числом признаков, а также при создании гибридных моделей, сочетающих различные виды нейросетей и классических алгоритмов.

Для построения модели нейросетевого расчета приземных концентраций  $\text{NO}_2$  использован база данных, содержащий 216665 записей замеров, следующих параметров:

- дата и время пробоотбора (информационный параметр);
- концентрации  $\text{NO}_2$  ( $\text{мг/м}^3$ );
- метеопараметры:
  - атмосферное давление (мм рт. ст.);
  - интенсивность осадков (мм/час);
  - направление ветра (град.);
  - относительная влажность воздуха (%);
  - скорость ветра (м/сек);
  - температура воздуха ( $^{\circ}\text{C}$ ).

Данные получены в результате обработки результатов измерений уровней загрязнения воздуха на АСКЗА в г. Казань за 7-летний период.

Для обучения и валидации модели база данных был разбит на обучающее и тестовое множества в пропорции 80 % и 20 % соответственно

В качестве модели для расчета была спроектирована нейронная сеть типа MLP, где входами являлись метеопараметры, а выходом – прогнозируемые концентрации  $\text{NO}_2$ . Сеть MLP имела следующую архитектуру (рисунок 5.2):

- Входной слой: 6 нейронов (по числу признаков);
- Скрытый слой 1: 32 нейрона;
- Скрытый слой 2: 16 нейронов;
- Выходной слой: 1 нейрон.

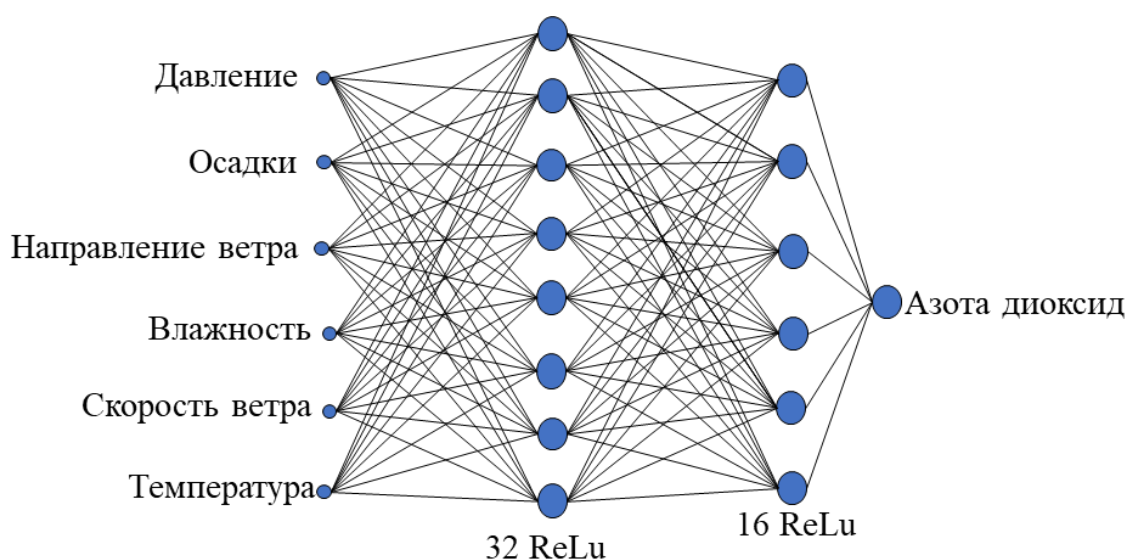


Рисунок 5.2 – Архитектура сети MLP прогнозирования концентраций  $\text{NO}_2$  по значениям основных значимых метеопараметров

В качестве функции активации использовалась ReLU:

$$\text{ReLU}(x) = \max(0, x).$$

Функция ReLU обладает высокой вычислительной эффективностью и устойчивостью к проблеме затухающего градиента. Использование двух скрытых слоев обусловлено необходимостью моделирования сложных нелинейных зависимостей между метеопараметрами и концентрациями  $\text{NO}_2$ .

Перед обучением модели входные признаки подвергались нормализации:

$$x' = \frac{x - \mu}{\sigma}.$$

где:  $\mu$  – среднее значение признака;

$\sigma$  – стандартное отклонение.

Нормализация позволяет ускорить процесс обучения, повышает устойчивости градиентной оптимизации и предотвращает доминирование признаков с большими диапазонами значений.

После обучения в течение 10000 эпох были получены значения метрик качества модели, отраженные в таблице 5.4.

Таблица 5.4 – Метрики модели MLP для предикторов – метеопараметров

| Метрика  | R <sup>2</sup> | MAE   | RMSE  |
|----------|----------------|-------|-------|
| Значение | 0,22           | 0,023 | 0,036 |

Полученные значения свидетельствуют о крайне низкой точности модели. Это указывает на недостаточную информативность исходного набора признаков и невозможность адекватного описания сложной зависимости между параметрами.

Для адекватного моделирования процессов, происходящих в атмосферном воздухе, в частности при расчете концентраций NO<sub>2</sub>, необходимо учитывать вторичные химические реакции в атмосфере. Одним из параметров, косвенно характеризующих интенсивность таких превращений, является гамма-фон, поэтому его использование в качестве дополнительного признака может повысить точность моделей прогнозирования концентраций NO<sub>2</sub>.

Результаты исследования метрик качества модели с расширенным набором предикторов представлены в таблице 5.5.

Таблица 5.5 – Метрики модели MLP для расширенного набора предикторов

| Метрика  | R <sup>2</sup> | MAE   | RMSE  |
|----------|----------------|-------|-------|
| Значение | 0,58           | 0,013 | 0,025 |

Такой подход позволил увеличить точность нейросетевой модели, коэффициент детерминации  $R^2$  достиг значения 0,58. Этот показатель более чем вдвое превышает точность модели без использования гамма-фона в качестве предиктора, однако эта точность также недостаточна. Дополнительным способом повышения адекватности моделей может служить предварительная кластеризация исходных данных, позволяющая выделить группы наблюдений с близкими характеристиками условий формирования приземных концентраций. Для каждого такого кластера целесообразно строить отдельную модель, что позволяет учитывать неоднородность процессов и повышает точность прогнозирования.

Для повышения точности прогнозирования в работе была разработана гибридная модель, объединяющая методы кластеризации данных и ИНС. Предлагаемый подход включает два последовательных этапа:

- 1) предварительное разделение данных на кластеры методом k-средних;
- 2) построение отдельной нейросетевой модели типа многослойный персептрон для каждого кластера.

Использование подобной гибридной схемы обусловлено выраженной неоднородностью процессов формирования приземных концентраций. Единая модель, обучаемая на полном наборе данных, вынуждена одновременно описывать несколько различных комбинаций значимых параметров, определяющих приземные концентрации. В результате качество аппроксимации снижается, поскольку одна модель не способна одинаково эффективно описывать все режимы одновременно.

Предварительная кластеризация позволяет разделить исходное пространство наблюдений на более однородные области, внутри которых зависимости между параметрами, определяющими условия рассеивания среды и концентрацией  $\text{NO}_2$  имеют более устойчивый характер. Для каждой такой области может быть построена специализированная модель, адаптированная под соответствующий характер процессов, формирующих приземные концентрации.

Для предварительного разделения исходных данных на однородные группы в работе использовался алгоритм кластеризации k-средних (k-means). Данный метод относится к числу наиболее распространенных алгоритмов неиерархической

кластеризации и предназначен для автоматического выделения групп объектов со схожими характеристиками. Применение алгоритма  $k$ -средних в рамках данного исследования обусловлено выраженной неоднородностью процессов формирования приземных концентраций. Предварительная кластеризация позволяет разделить данные на более однородные подмножества, уменьшить внутригрупповую вариативность, снизить влияние шумовых режимов, а затем построить специализированные модели для каждого типа условий рассеивания и формирования приземных концентраций. Кроме того, применение кластеризации позволяет выявить скрытую структуру данных и установить наличие различных условий формирования приземных концентраций. Таким образом, использование алгоритма  $k$ -средних является обоснованным и позволяет существенно повысить точность прогнозирования концентраций  $\text{NO}_2$ . Таким образом, работу спроектированной гибридной модели можно представить как двухэтапный процесс.

Этап 1. Кластеризация данных. На первом этапе исходный набор наблюдений разбивается на  $k$  кластеров методом  $k$ -средних. По результатам серии вычислительных экспериментов с различным количеством кластеров с последующим определением характеристик распределения данных внутри каждого кластера, для финального моделирования было принято  $k = 3$ . Таким образом после выполнения кластеризации каждое наблюдение относится к одному из трех режимов формирования приземных концентраций:

- кластер 0 - устойчивые режимы;
- кластер 1 - переходные режимы;
- кластер 2 - сложные режимы.

Элементы описательной статистики полученных кластеров представлены в таблице 5.6.

Таблица 5.6 – Элементы описательной статистики полученных кластеров (1/2/3 кластер)

| Предиктор                                           | Среднее                      | Стандартная<br>ошибка        | Медиана                   | Мода                         | Стандартное<br>отклонение    | Дисперсия<br>выборки             | Экссесс                          | Асимметрия                   | Минимум                      | Максимум                  |
|-----------------------------------------------------|------------------------------|------------------------------|---------------------------|------------------------------|------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|------------------------------|------------------------------|---------------------------|
| Атмосферное<br>давление,<br>мм.рт.ст.               | 760,14/<br>755,61/<br>748,15 | 0,03/<br>0,02/<br>0,02       | 760/<br>755,2/<br>748,7   | 760,3/<br>754,9/<br>749,8    | 7,76/<br>6,02/<br>6,56       | 60,19/<br>36,22/<br>43,05        | 0,43/<br>0/<br>-0,1              | 0,31/<br>0,26/<br>-0,24      | 732,3/<br>733,4/<br>726,7    | 789,1/<br>776,2/<br>771,3 |
| Направление<br>ветра, °                             | 153,17/<br>190,28/<br>204,99 | 0,45/<br>0,4/<br>0,35        | 165/<br>198/<br>215       | 178/<br>279/<br>278          | 119,7/<br>104,75/<br>96,65   | 14328,8/<br>10973,18/<br>9341,41 | 0,3/<br>-0,25/<br>1,06           | -0,65/<br>-0,45/<br>-0,92    | 0/<br>0/<br>0                | 360/<br>360/<br>360       |
| Скорость ветра,<br>м/с                              | 1,34/<br>1,43/<br>1,55       | 0/<br>0/<br>0,01             | 1,1/<br>1,2/<br>1,3       | 0/<br>0/<br>0                | 1,13/<br>1,19/<br>1,39       | 1,29/<br>1,41/<br>1,95           | 2,49/<br>1,57/<br>0,82           | 1,31/<br>1,16/<br>1          | 0/<br>0/<br>0                | 9,1/<br>8,8/<br>8,9       |
| Относительная<br>влажность, %                       | 78,22/<br>50,71/<br>78,97    | 0,04/<br>0,05/<br>0,03       | 80/<br>51/<br>80          | 84/<br>53/<br>83             | 9,8/<br>12,27/<br>9,42       | 96,07/<br>150,58/<br>88,78       | 0,39/<br>-0,37/<br>-0,26         | -0,83/<br>-0,07/<br>-0,52    | 34/<br>12/<br>35             | 96/<br>89/<br>98          |
| Температура<br>воздуха, °С                          | -4,48/<br>17,81/<br>7,96     | 0,03/<br>0,03/<br>0,03       | -4,3/<br>18,8/<br>8,5     | 1,3/<br>22,3/<br>0,3         | 8,51/<br>7,68/<br>8,52       | 72,43/<br>59,01/<br>72,62        | -0,32/<br>-0,52/<br>-0,71        | 0,04/<br>-0,33/<br>-0,22     | -28,1/<br>-8,3/<br>-21,7     | 23,7/<br>36,6/<br>34,3    |
| Интенсивность<br>осадков, мм                        | 0,01/<br>0/<br>0,1           | 0/<br>0/<br>0                | 0/<br>0/<br>0             | 0/<br>0/<br>0                | 0,1/<br>0,07/<br>0,95        | 0,01/<br>0,01/<br>0,91           | 638,34/<br>2793,51/<br>1652,07   | 22,48/<br>47,25/<br>31,83    | 0/<br>0/<br>0                | 5/<br>6,1/<br>75,3        |
| Гамма-фон,<br>мкР/ч                                 | 8,45/<br>8,92/<br>9,35       | 0/<br>0/<br>0                | 8,5/<br>9/<br>9,3         | 8,5/<br>8,6/<br>9,1          | 1,08/<br>1,19/<br>1,15       | 1,16/<br>1,43/<br>1,32           | 3,82/<br>3,8/<br>4,84            | -0,91/<br>-0,56/<br>0,64     | 0/<br>0/<br>4,3              | 15/<br>19,9/<br>21,3      |
| КТ                                                  | 0,74/<br>0,63/<br>0,52       | 0/<br>0/<br>0                | 0,83/<br>0,68/<br>0,46    | 0,4/<br>0,4/<br>0,4          | 0,22/<br>0,26/<br>0,26       | 0,05/<br>0,07/<br>0,07           | -0,39/<br>-0,88/<br>-0,96        | -0,86/<br>-0,44/<br>0,18     | 0,01/<br>/0/<br>0            | 1/<br>1/<br>1             |
| Концентрация<br>NO <sub>2</sub> , мг/м <sup>3</sup> | 0,0197/<br>0,0188/<br>0,0228 | 0,0002/<br>0,0001/<br>0,0001 | 0,004/<br>0,007/<br>0,007 | 0,0005/<br>0,0005/<br>0,0005 | 0,0481/<br>0,0382/<br>0,0409 | 0,0023/<br>0,0015/<br>0,0017     | 118,2387/<br>59,7942/<br>32,5993 | 8,4834/<br>6,1851/<br>4,5735 | 0,0005/<br>0,0005/<br>0,0005 | 1,214/<br>0,731/<br>0,676 |

Графически распределение величин предикторов представлено на рисунках 5.3-5.10 в виде диаграмм «ящик с усами».

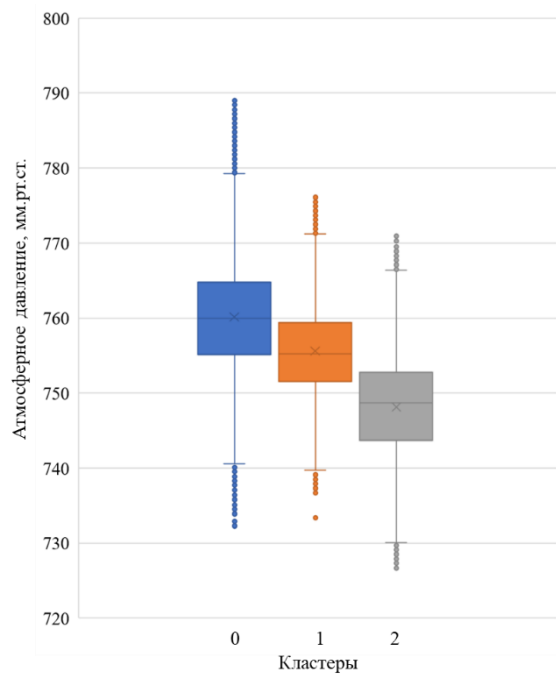


Рисунок 5.3 – Атмосферное давление

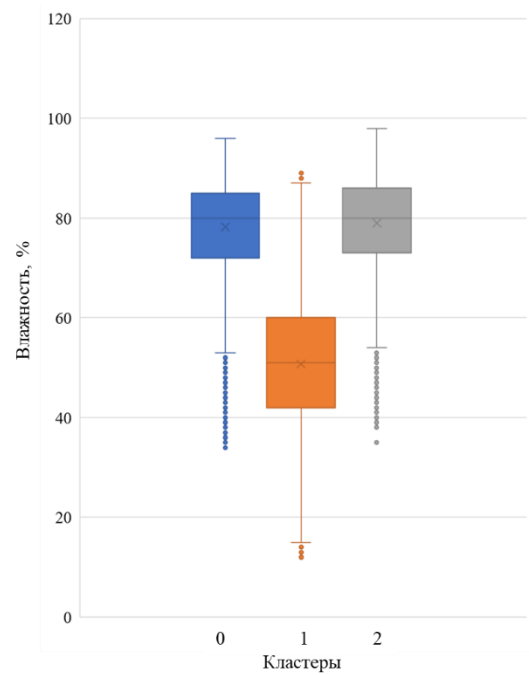


Рисунок 5.4 – Относительная влажность

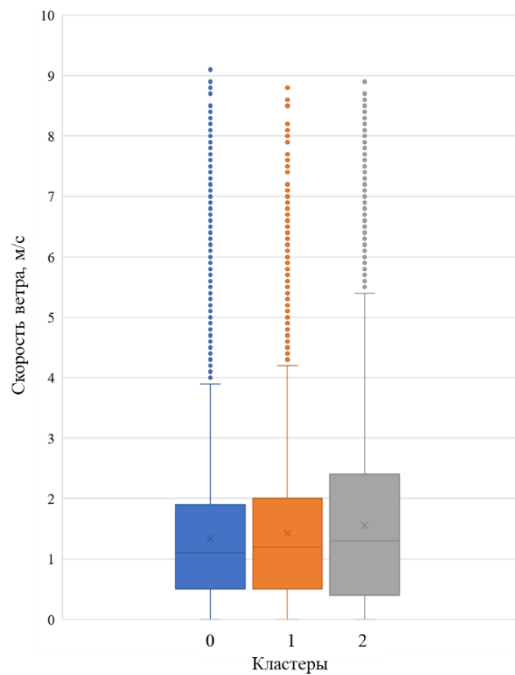


Рисунок 5.5 – Скорость ветра

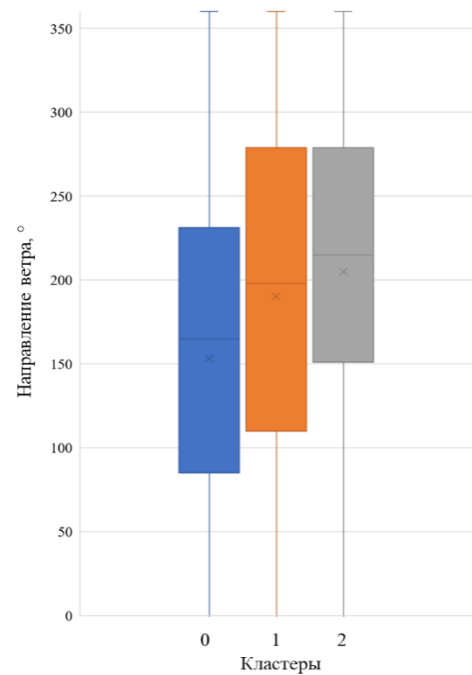


Рисунок 5.6 – Направление ветра

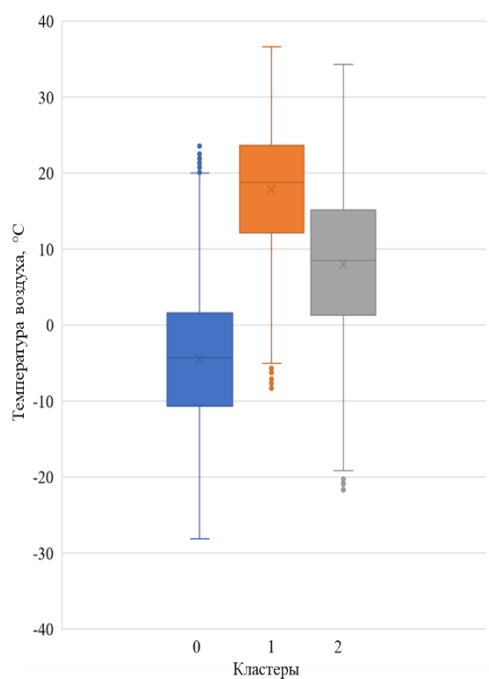


Рисунок 5.7 – Температура

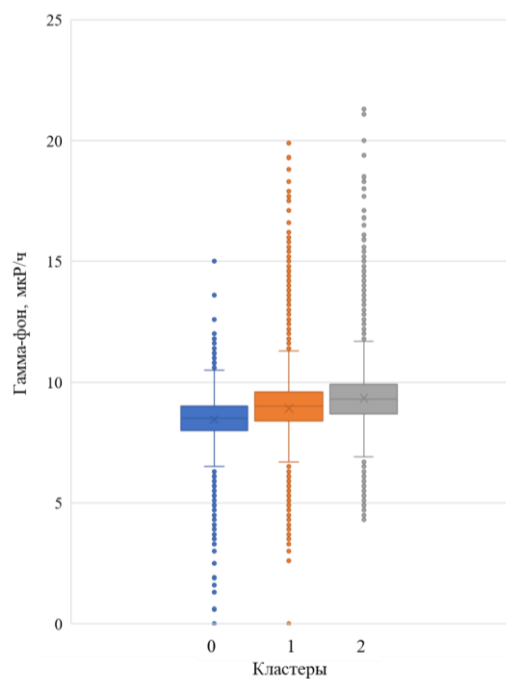


Рисунок 5.8 – Гамма-фон

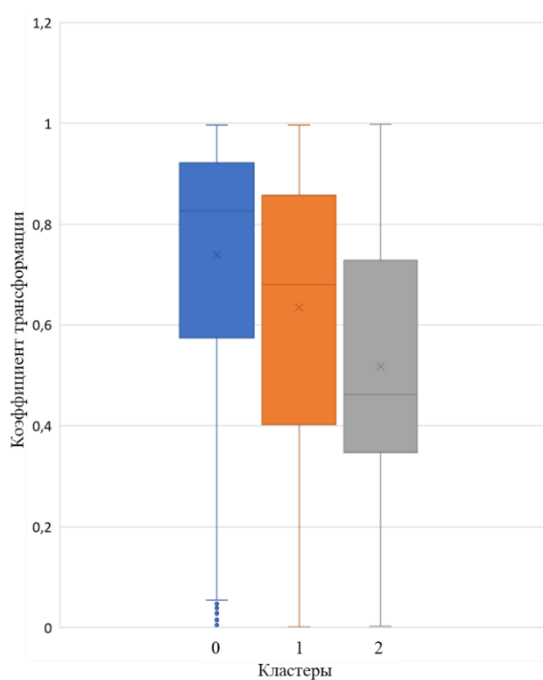
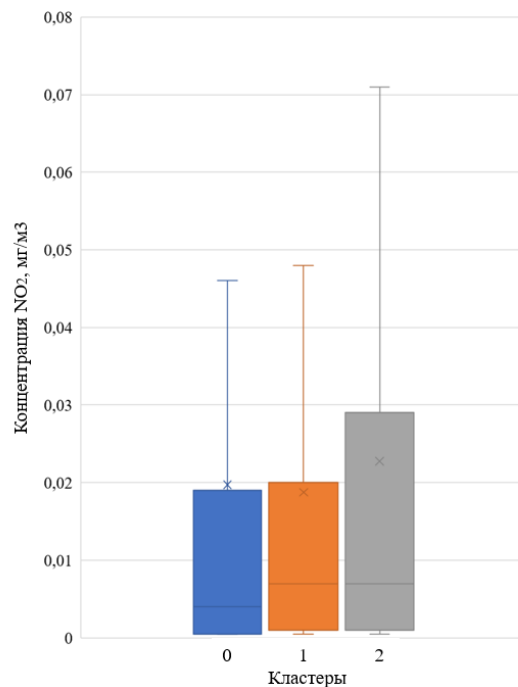


Рисунок 5.9 – Коэффициент трансформации

Рисунок 5.1 – Концентрация NO<sub>2</sub>

Как можно видеть из таблицы 5.6 и рисунках 5.3-5.10, в кластере 2 чаще наблюдаются более высокие значения концентраций NO<sub>2</sub>, в то время как большинство предикторов указывают на более выгодные или средние условия

рассеивания и менее выгодные условия его образования за счет вторичных реакций. Таким образом, в данном кластере можно констатировать усиление влияния фактора, не учтенного в наборе предикторов, наиболее важным из которых, очевидно, является мощность эмиссии.

## Этап 2. Построение специализированных MLP-моделей

После разбиения данных для каждого кластера строится собственная нейросетевая модель:

$$MLP_0, MLP_1, MLP_2.$$

Каждая модель обучается только на данных соответствующего кластера, и имеет упрощенную архитектуру:

- входной слой: 7 нейронов;
- скрытый слой 1: 16 нейронов;
- скрытый слой 2: 8 нейронов;
- выходной слой: 1 нейрон.

В качестве функции активации использовалась функция  $ReLU(x) = \max(0, x)$ .

Использование отдельных нейросетевых моделей позволяет каждой сети адаптироваться под собственный режим формирования приземных концентраций.

Работа гибридной модели осуществляется следующим образом.

Шаг 1. Для нового наблюдения:

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_n).$$

вычисляется расстояние до центров кластеров:

$$d_j = ||X - \mu_j||.$$

Наблюдение относится к кластеру:

$$c = \arg \min_j d_j.$$

Шаг 2. После определения номера кластера выбирается соответствующая нейросетевая модель:

$$MLP_c.$$

Шаг 3. Выбранная нейросеть вычисляет приземные концентрации  $\text{NO}_2$ :

$$\hat{y} = MLP_c(X).$$

С физической точки зрения предложенная модель реализует адаптивный подход к прогнозированию режима формирования приземных концентраций. Фактически модель сначала определяет текущий режим, а затем использует специализированную модель, соответствующую данному режиму. Подобный подход аналогичен использованию различных физических моделей для разных состояний системы.

На этапе 1 была произведена кластеризация имеющихся данных методом k-средних на три кластера. Данное число было выбрано как компромисс между степенью разделимости данных, устойчивостью кластеров и достаточным количеством наблюдений внутри каждой группы.

Результаты распределения элементов база данных с расширенным перечнем параметров по кластерам демонстрирует рисунке 5.11.

В рассматриваемой задаче расчета приземных концентраций  $\text{NO}_2$  используется многомерный набор признаков, характеризующий сложные процессы рассеивания и химической трансформации. Анализ таких данных непосредственно в исходном пространстве затруднен вследствие высокой размерности. После выполнения кластеризации методом k-средних возникла необходимость анализа того, насколько хорошо выделенные кластеры разделяются в пространстве

признаков. Для этого был проведен PCA. Данный метод является одним из наиболее распространенных подходов к снижению размерности многомерных данных и широко применяется при анализе сложных систем, содержащих большое количество взаимосвязанных признаков.

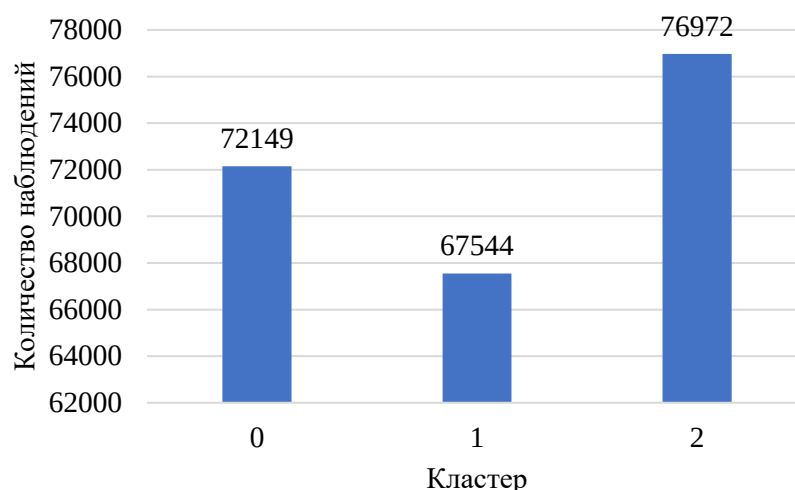


Рисунок 5.11 – Количество наблюдений в каждом из трех выделенных кластеров

Проекция данных на пространство двух компонент позволила построить двумерную карту распределения наблюдений и визуально оценить структуру кластеров (рисунок 5.12).

На полученной PCA – визуализации наблюдается формирование трех относительно обособленных областей, соответствующих выделенным кластерам. Это подтверждает наличие скрытой структуры в данных и свидетельствует о том, что различные режимы процессов рассеивания и химической трансформации действительно отличаются друг от друга по совокупности параметров.

Анализ PCA – визуализации показывает, что кластер 0 формирует наиболее компактную область, кластеры 1 и 2 обладают более сложной структурой, при этом наблюдается частичное пересечение кластеров. Компактность кластера 0 объясняет достижение максимальной точности прогнозирования для данного кластера. Частичное пересечение кластеров 1 и 2 свидетельствует о наличии переходных состояний и сложных нелинейных режимов, что затрудняет задачу прогнозирования.

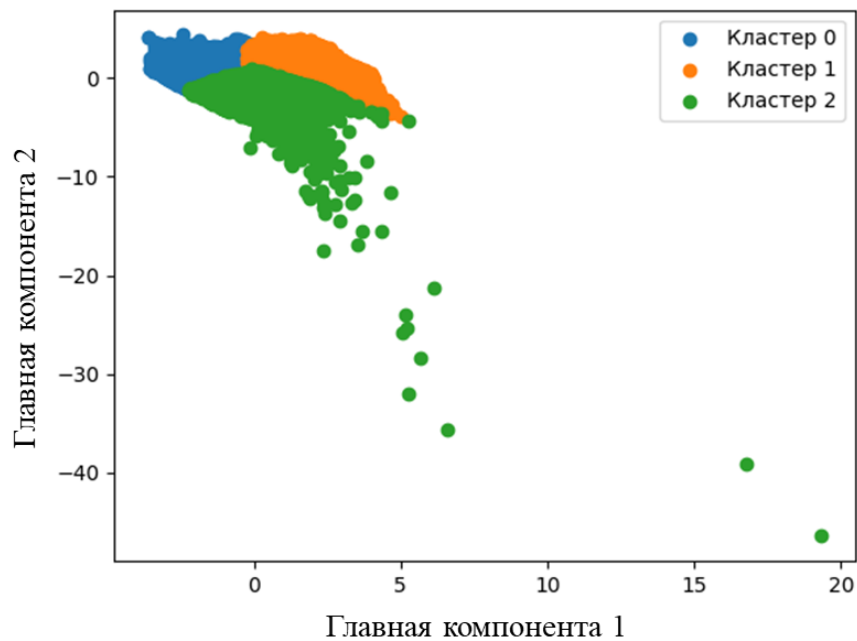


Рисунок 5.12 – Разделимость кластеров относительно главных компонент

Анализ распределения концентраций  $\text{NO}_2$  и структуры данных позволил качественно интерпретировать полученные кластеры.

Кластер 0 – устойчивые условия. Для данного кластера характерны:

- высокая взаимосвязанность параметров, определяющих процессы рассеивания, и значений приземных концентраций;
- высокая предсказуемость.

Кластер 1 – переходные режимы. Кластер характеризуется:

- более сложной динамикой;
- наличием переходных состояний между устойчивыми режимами.

Кластер 2 – сложные и шумные режимы. Для кластера характерны:

- высокая вариативность концентраций;
- наличие выбросов и экстремальных значений.

В контексте анализа причин изменения уровней загрязнения воздуха данная классификация может быть интерпретирована следующим образом. Кластеру 0 соответствуют условия с относительно стабильным уровнем эмиссии  $\text{NO}_x$ , когда изменение их концентраций обусловлено колебанием метеорологических и фотохимических условий. Кластер 2 соответствует условиям, когда при изменениях

приземных концентраций увеличивается роль параметров, не учтенных среди выбранного набора предикторов, а именно, кратковременное увеличение эмиссии  $\text{NO}_x$ , в том числе при осуществлении залповых выбросов. Кластер – переходные условия, которые не могут быть однозначно интерпретированы.

Интерпретация кластеров показана в таблице 5.7.

Таблица 5.7 – Физическая интерпретация состава выделенных кластеров

| Кластер | Характеристика          |
|---------|-------------------------|
| 0       | устойчивые условия      |
| 1       | переходные состояния    |
| 2       | сложные и шумные режимы |

Таким образом, PCA подтвердил корректность применения кластеризации и позволил качественно интерпретировать структуру исходных данных.

На Этапе 2 для каждого кластера данных была построена индивидуальная нейросетевая модель MLP упрощенной архитектуры (рисунок 5.13):

- Входной слой: 7 нейронов;
- Скрытый слой 1: 16 нейрона, ReLU;
- Скрытый слой 2: 8 нейронов, ReLU;
- Выходной слой: 1 нейрон.

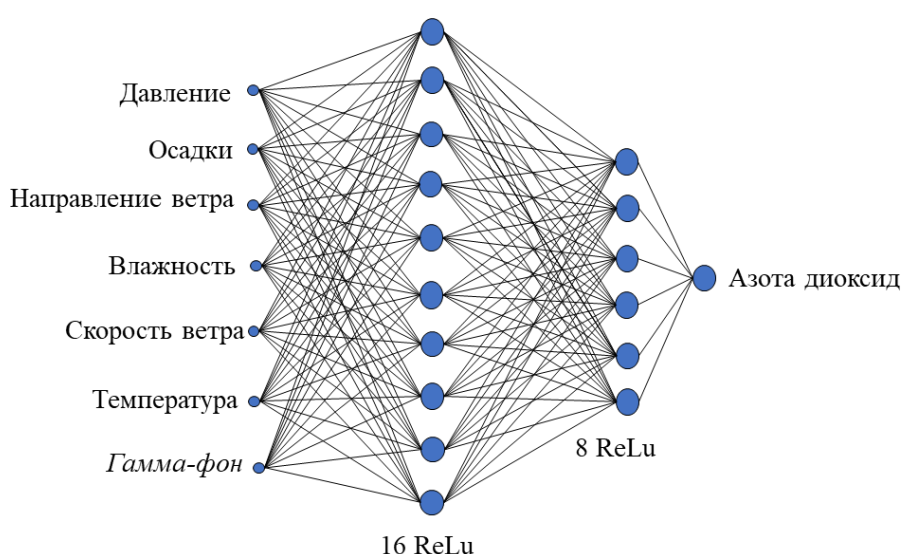


Рисунок 5.13 – Архитектура сети MLP для расчета приземных концентраций  $\text{NO}_2$  по кластерам

Архитектура построенной гибридной модели представлена на рисунке 5.14.

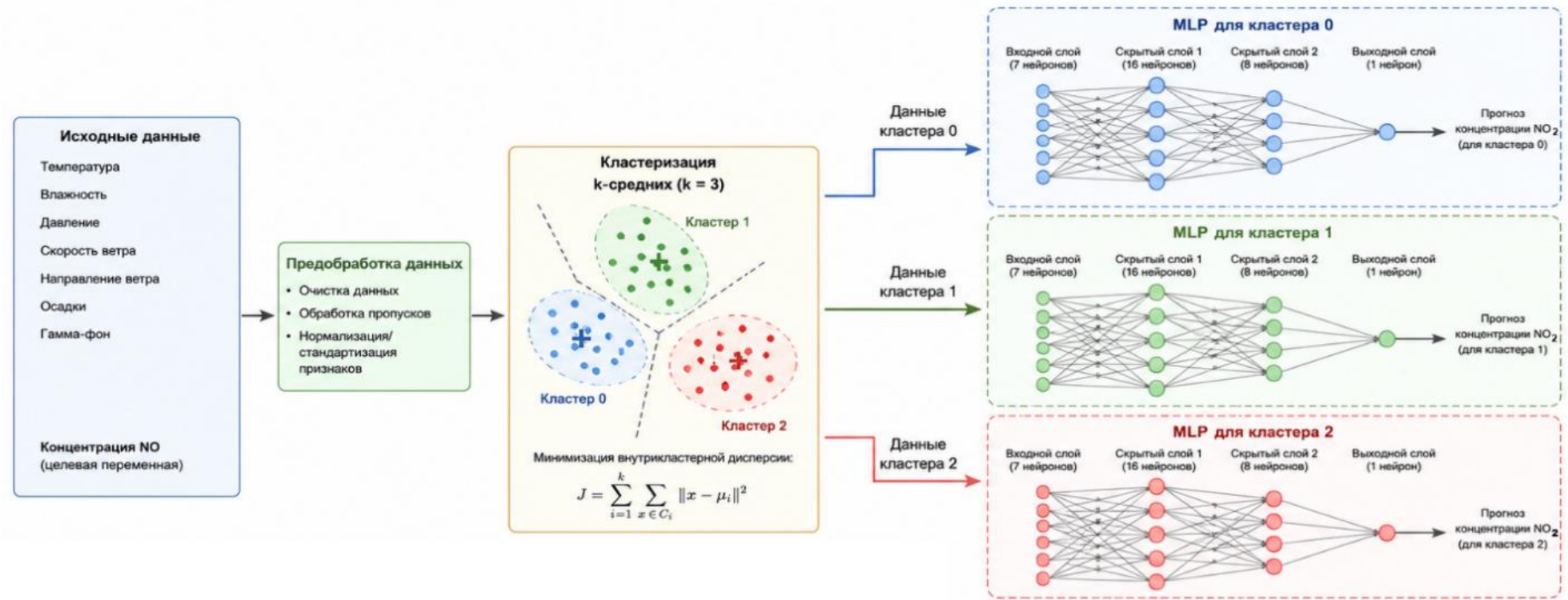


Рисунок 5.14 – Гибридная модель, объединяющая этапы кластеризации и нейросетевого прогноза

Результаты моделирования гибридной моделью представлены на рисунках 5.15-5.16.

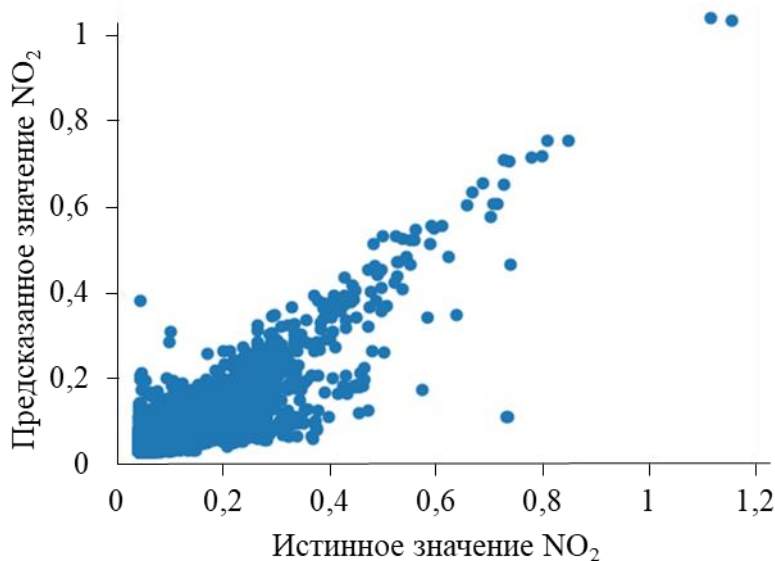


Рисунок 5.15 – Сопоставление предсказанных и истинных значений концентраций NO<sub>2</sub>

Из графика видно, что большинство точек расположено вдоль диагонали, что свидетельствует о хорошем согласовании предсказаний с реальными значениями. Следовательно модель корректно воспроизводит общий характер зависимости.

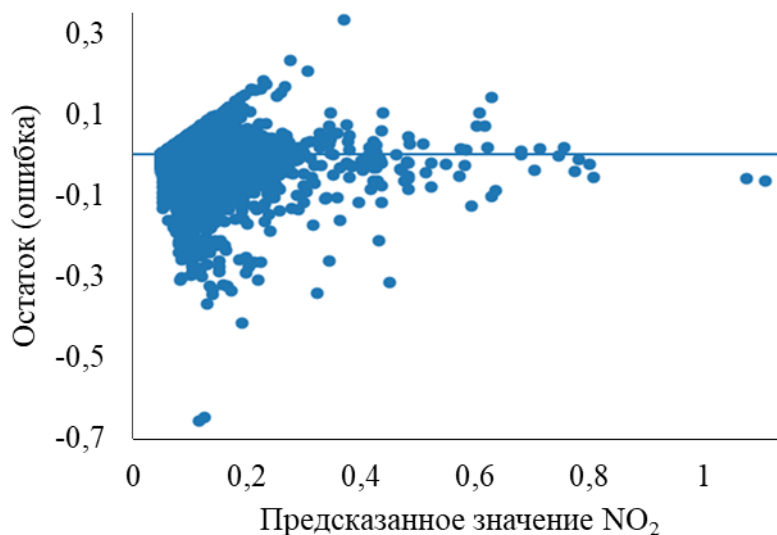


Рисунок 5.16 – Зависимость величины ошибки модели от предсказанного значения концентрации NO<sub>2</sub>

Характеристика точности индивидуальных MLP-моделей по каждому кластеру представлена в таблице 5.8.

Таблица 5.8 – Метрики модели MLP для расширенного набора предикторов с кластеризацией

| Кластер | $R^2$  | MAE    | RMSE   |
|---------|--------|--------|--------|
| 0       | 0,9229 | 0,0052 | 0,0129 |
| 1       | 0,6591 | 0,0096 | 0,0222 |
| 2       | 0,7183 | 0,0106 | 0,0224 |

Полученные результаты показывают, что наибольшая точность достигается для кластера 0, что свидетельствует о высокой однородности данных в данной группе. Кластеры 1 и 2 характеризуются более низкими значениями  $R^2$ , что обусловлено большей вариативностью и сложностью зависимостей.

Отношение отдельных метрик качества рассмотренных моделей представлено на рисунке 5.17. Для кластерной модели даны усредненные результаты по кластерам.

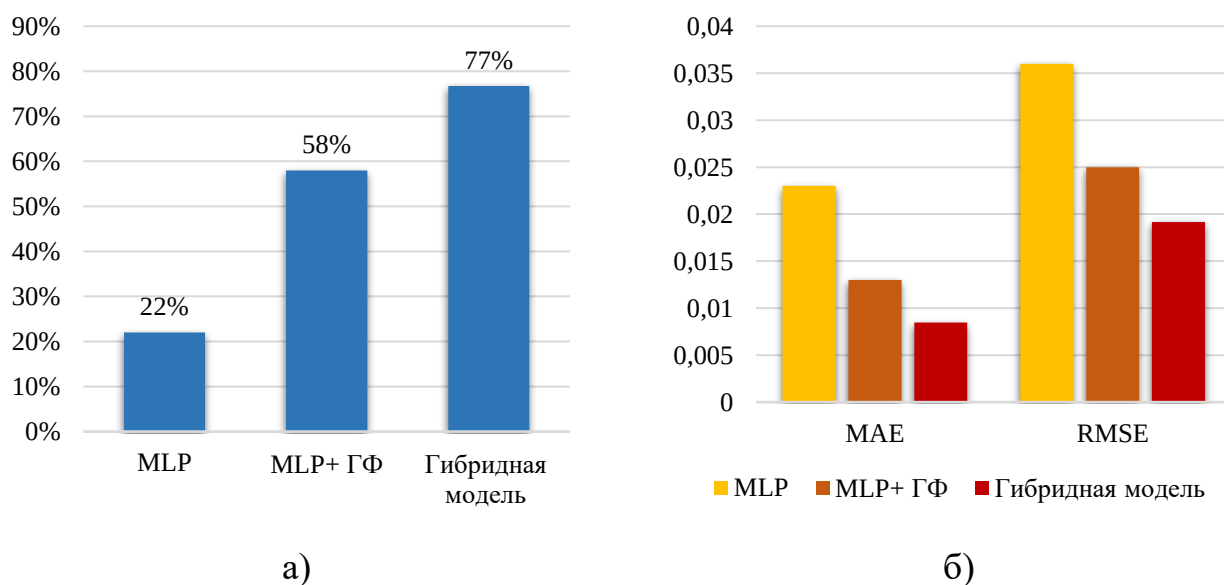


Рисунок 5.17 – Характеристики моделей расчета приземных концентраций  $\text{NO}_2$ : а) оценка точность по метрике  $R^2$ , б) оценка ошибок по метрикам MAE и RMSE

В целом применение гибридной модели позволило повысить точность за счет разделения данных на подмножества, соответствующие различным режимам рассеивания и работы источников выбросов, при этом достигнуто более чем трехкратное повышение точности кластерной MLP-модели по сравнению с базовой (таблица 5.9).

Таблица 5.9 – Характеристики моделей прогнозирования уровня NO<sub>2</sub>

| Модель                                           | R <sup>2</sup> | Улучшение |
|--------------------------------------------------|----------------|-----------|
| Базовый MLP                                      | 0,22           | -         |
| MLP+ ГФ                                          | 0,58           | +164%     |
| Гибридная модель<br>Кластеризация +MLP+гамма-фон | 0,75+          | +240%     |

Таким образом, была исследована задача расчета разовых приземных концентраций NO<sub>2</sub> для использования при осуществлении оперативных прогнозов на основе хеометрических методов, в которой учитывается влияние различных режимов рассеивания и работы источников выбросов. В ходе работы был сформирован и исследован база данных, содержащий 216665 наблюдений значимых параметров, определяющих формирование приземных концентраций.

На первом этапе исследования была построена базовая модель прогнозирования на основе многослойного персептрона (MLP), использующая только стандартные метеорологические параметры. Полученные результаты показали низкую точность базовой модели:  $R^2 = 0,22$  при  $MAE = 0,023$  и  $RMSE = 0,036$ . Данные результаты свидетельствуют о том, что использование только стандартных метеопараметров недостаточно для адекватного описания сложных атмосферных процессов, определяющих формирование приземных концентрации NO<sub>2</sub>.

Для повышения информативности модели в состав признаков был введен дополнительный параметр – гамма-фон, косвенно характеризующий интенсивность вторичных химических реакций в атмосферном воздухе. Использование расширенного набора признаков позволило существенно повысить качество прогнозирования:  $R^2 = 0,58$  при  $MAE = 0,013$ ,  $RMSE = 0,025$ .

Включение параметра гамма-фона обеспечило более чем двукратное повышение коэффициента детерминации и существенное снижение ошибок модели. Полученные результаты подтверждают значимость учета данного предиктора при моделировании приземных концентраций.

Дальнейшее повышение точности было достигнуто за счет применения гибридной модели, включающей предварительную кластеризацию данных методом k-средних и построение отдельных нейросетевых моделей для каждого кластера. В результате кластеризации исходные данные были разделены на три группы:

- кластер 0 – 72 149 наблюдений;
- кластер 1 – 67 544 наблюдений;
- кластер 2 – 76 972 наблюдений.

Проведенный PCA-анализ подтвердил наличие скрытой структуры в данных и показал, что выделенные кластеры соответствуют различным режимам рассеивания и вторичных химических реакций. Было установлено, что:

- кластер 0 соответствует условиям с высокой взаимосвязанностью параметров, определяющих процессы рассеивания, и значений приземных концентраций;

- кластер 1 отражает переходные состояния;

- кластер 2 характеризуется наиболее сложными и шумными режимами, при которых в изменениях приземных концентраций увеличивается роль параметров, не учтенных среди выбранного набора предикторов, а именно, происходит кратковременное увеличение эмиссии газов, в том числе, при осуществлении залповых выбросов.

Для каждого кластера была построена индивидуальная MLP-модель упрощенной архитектуры. Результаты моделирования показали значительное повышение качества прогнозирования по сравнению с базовой моделью. Так, для кластера 0 были получены наилучшие результаты:  $R^2 = 0,92$ ,  $MAE = 0,005$ ,  $RMSE = 0,013$ . Для кластеров 1 и 2 коэффициенты детерминации составили  $R^2 = 0,66$  и  $R^2 = 0,72$  соответственно. Среднее значение коэффициента детерминации

гибридной модели превысило  $R^2 \approx 0,75$ , то есть по сравнению с базовой моделью точность прогнозирования была увеличена более чем в три раза.

Полученные результаты показывают, что основными факторами повышения качества прогнозирования являются расширение признакового пространства за счет учета гамма-фона, разделение данных на однородные группы, и использование специализированных моделей для различных условий рассеивания и протекания вторичных химических реакций. Проведенное исследование подтверждает высокую эффективность применения хемометрических методов для задач расчетного экологического мониторинга качества атмосферного воздуха.

Данный подход разработан с учетом особых условий, которые формируются при кратковременных, но, в то же время, значительных изменениях уровня эмиссии.

Физическая интерпретация результатов кластеризации данных подтверждает необходимость учета залповых выбросов при осуществлении расчетного мониторинга уровней загрязнения воздуха. Следует отметить, что абсолютно точное разделение границ условий невозможно с учетом характера поставленной задачи. Но при этом, за счет применения кластеризации с последующим обучением отдельной нейронной сети для каждого из состояний, разработанный подход позволяет повысить точность моделирования уровней загрязнения в условиях отсутствия данных о текущих режимах работы источников выбросов, что может быть применено для выявления наличия залповых выбросов от источников загрязнения атмосферы.

#### **5.4 Заключение по главе 5**

В главе установлено, что существующая система инвентаризации и нормирования выбросов не обеспечивает полноценного учета залповых выбросов, что приводит к недостоверной оценке воздействия промышленных объектов на качество атмосферного воздуха и здоровье населения. На примере предприятия химической отрасли продемонстрировано, что расчет максимальных приземных концентраций для  $\text{NO}_2$ , углерода и  $\text{CO}$  с учетом залповых выбросов дает значения,

в десятки и сотни раз превышающие результаты, полученные для штатного режима. Исключение из процедуры нормирования залповых выбросов при разработке нормативов ПДВ является некорректным и потенциально опасным.

На основе проведенного анализа материалов инвентаризации выбросов ЗВ крупнейших объектов химической отрасли и технологических процессов, обеспечивающих стабильное функционирование аппаратов, предложено четкое определение понятия «залповые выбросы».

Для решения проблем моделирования загрязнения в условиях отсутствия данных о режимах работы источников разработана гибридная модель, объединяющая кластеризацию и использование ИНС с расширенным набором входных параметров. Введение предиктора гамма-фон, характеризующего интенсивность вторичных химических реакций, позволило вдвое повысить коэффициент детерминации и существенно снизить ошибки модели.

## Глава 6. Расчет концентраций парникового газа диоксида углерода

### 6.1 Методическое обоснование способа расчета

Глобальное изменение климата превратилось в одну из наиболее острых проблем мировой экономики и политики. Прошедшая в 2015 г. в Париже конференция по изменению климата и принятое на ней Соглашение призваны перейти от Киотского протокола к Рамочной конвенции ООН об изменении климата, которое обязывает государства сократить или стабилизировать выбросы парниковых газов. Установлено введение углеродного налога на импортируемую продукцию, получение которой связано с выбросами парниковых газов. Разрабатываются на международном, национальном, региональном и локальном уровнях методы и средства для снижения выбросов парниковых газов в атмосферу, в основе которых лежит количественное определение этих выбросов.

В РФ принят ряд нормативных правовых документов для снижения выбросов парниковых газов и климатических рисков. Среди них «Климатическая доктрина РФ», утвержденная Указом Президента РФ от 16.10.2023 г. [242] являющаяся основой формирования и реализации политики в области климата. Приняты распоряжения Правительства РФ, регламентирующие порядок формирования системы мониторинга, отчетности и проверки объема выбросов парниковых газов [243,244]. В 2021 г. принят ФЗ «Об ограничении выбросов парниковых газов» [245]. Национальные стандарты РФ детализируют требования по количественному определению парниковых газов и углеродного следа продукции, соответствующие международным стандартам [244,245]. В 2021 г. принят Указ Президента РФ, утвердивший стратегию национальной безопасности, включающую меры по снижению климатических рисков [247].

Измерения концентраций  $\text{CO}_2$  в крупных городах страны имеют значительные количественные и пространственные ограничения. Так, измерения концентраций  $\text{CO}_2$  на территории г. Казани проводятся только на двух АСКЗА МЭПР РТ (АСКЗА-1, 2 г. Казань).

Нормативным документом, регламентирующим количественное определение приземных концентраций примесей из источников загрязнения расчетным путем, является методика расчета концентраций в атмосферном воздухе ЗВ, поступающих с выбросами предприятий [74]. Использование указанной методики ограничено наличием данных о техногенных параметрах выбросов (качественный и количественный состав выбросов, высота источника выброса, скорость выхода газовой смеси из источника выбросов, температура выброса). Рассчитать приземные концентрации  $\text{CO}_2$  по указанной нормативной методике не представляется возможным, поскольку отсутствуют данные по инвентаризации источников выбросов  $\text{CO}_2$ , включающие указанные параметры.

Нами разработан принципиально новый подход, основанный на расчете концентраций  $\text{CO}_2$  с учетом процессов трансформации в атмосферном воздухе. В состав выбросов, образующихся при неполном сжигании топлива, входит СО – угарный газ. Он выбрасывается совместно с  $\text{CO}_2$  в промышленных процессах сжигания топлива, что обуславливает взаимосвязь между концентрациями данных газов. В экспериментально измеряемых на АСКЗА концентрациях  $\text{CO}_2$  есть его доля, образовавшаяся в ходе химической трансформации из СО. Тот факт, что в измерениях концентрации  $\text{CO}_2$  на АСКЗА, помимо выбросов из стационарных источников, вносит свой вклад  $\text{CO}_2$ , образующийся в результате вторичных химических реакций из СО, позволяет использовать концентрации СО в качестве исходных данных для расчета концентрации  $\text{CO}_2$ .

В качестве модели регрессии для процессов, обладающих выраженной нелинейностью и неопределенностью внутренних взаимосвязей, наибольшую эффективность могут показать искусственные регрессионные нейронные сети типа MLP. Являясь, согласно теореме Цыбенко, универсальными аппроксиматорами, при наличии в обучающих данных всевозможных сочетаний значений значимых факторов, сети типа MLP позволяют учесть трудно моделируемые скрытые зависимости между факторами и получить высокоточную адекватную модель расчета. Таким образом, концентрации СО могут использоваться в качестве предикторов для расчета концентраций  $\text{CO}_2$ . Преимуществом данного подхода

является возможность непосредственного расчета концентраций СО в любой точке при помощи регламентированной методики расчета рассеивания, реализованной в программном комплексе УПРЗА «Эколог-Город».

Повышение точности расчетов может быть обеспечено применением нейросетевых технологий. Точность нейросетевых моделей, в свою очередь, определяется адекватным выбором значимых предикторов [186]. Установлено наличие тесных связей между приземными концентрациями компонентов выбросов, коэффициентами трансформации и концентрациями  $O_3$ , характеризующими интенсивность вторичных химических реакций в атмосферном воздухе [190,191]. Поэтому данные предикторы были выбраны в качестве входов проектируемой нейросети. Наряду с данными предикторами исследовалась эффективность использования в качестве предиктора гамма-фона, измеряемого на АСКЗА.

Следующим этапом построения модели расчета  $CO_2$  является разработка способа учета трансформации в атмосферном воздухе СО в  $CO_2$ . Для оценки влияния вторичных химических реакций на концентрации газовых примесей требуется учет значительного количества сложно моделируемых процессов (интенсивность солнечной радиации, облачность, интенсивность осадков, тип подстилающей поверхности или ее отражающую способность и т.д.). Для повышения адекватности расчетов необходимо сократить число учитываемых значимых факторов, оставив основные.

## **6.2 Применение предложенного способа расчета концентраций диоксида углерода для предприятия химической отрасли**

Одним из основных стационарных источников поступления  $CO_2$  в атмосферу является химическая промышленность. Для расчета эмиссий парникового газа  $CO_2$  от источников выбросов предприятия химической отрасли, расположенного в г. Казань, была поставлена задача проектирования нейросетевой модели, нивелирующей отсутствие данных о техногенных параметрах источников

загрязнения атмосферы. При этом в модели необходимо было учесть процессы химической трансформации СО в СО<sub>2</sub> в атмосферном воздухе [249-252].

Для учета вторичных химических реакций в атмосферном воздухе учитывались три предиктора.

Предиктор №1: коэффициент трансформации (КТ), определяется расчетным путем по соотношению экспериментально измеренных на АСКЗА концентраций NO<sub>x</sub>. Данный коэффициент характеризует способность атмосферы к окислительным реакциям.

Предиктор №2: концентрация O<sub>3</sub>, измеренная на АСКЗА. Использование концентраций O<sub>3</sub> позволяет учесть интенсивность фотохимических реакций.

Предиктор №3: гамма-фон, измеренный на АСКЗА, характеризующий активацию молекул в результате поглощения электромагнитного излучения. Информативность и пространственная локализация указанных характеристик позволяет адекватно оценивать интенсивность вторичных химических реакций в атмосферном воздухе на локальных участках территории города.

Для проведения расчета приземных концентраций СО, поступающих с выбросами указанного предприятия, был использован программный комплекс УПРЗА «Эколог-Город», версия 4.70. Расчет произведен с использованием результатов измерений концентраций СО и СО<sub>2</sub> АСКЗА-1 и АСКЗА-2 г. Казань. В качестве исходных данных для расчета использованы техногенные параметры источников выбросов СО. Учитывались следующие метеоусловия: температура воздуха, скорость и направление ветра. Для каждой расчетной точки проведены расчеты концентраций СО с перебором скорости ветра с шагом 1 м/с от скорости 0,5 м/с до наибольшей, фиксируемой на АСКЗА, скорости 8,5 м/с и направления ветра по 8-румбовой шкале с шагом 10 °С помощью программного комплекса в точках жилой зоны были рассчитаны максимально разовые концентрации СО (мг/м<sup>3</sup>), соответствующие проектным параметрам выбросов предприятия [253].

Расположение расчетных точек представлено на рисунке 6.1.

Максимальные значения концентраций СО в расчетных точках составили 0,61 мг/м<sup>3</sup>, среднегодовая концентрация – 0,05 мг/м<sup>3</sup>. Для повышения сходимости

измеренных на АСКЗА концентраций  $\text{CO}_2$  и расчетных с использованием нейросетей концентраций парникового газа спроектированные ИНС обучались на массиве экспериментально измеренных концентраций  $\text{CO}_2$ , получаемых ежедневно с 20-минутным осреднением.

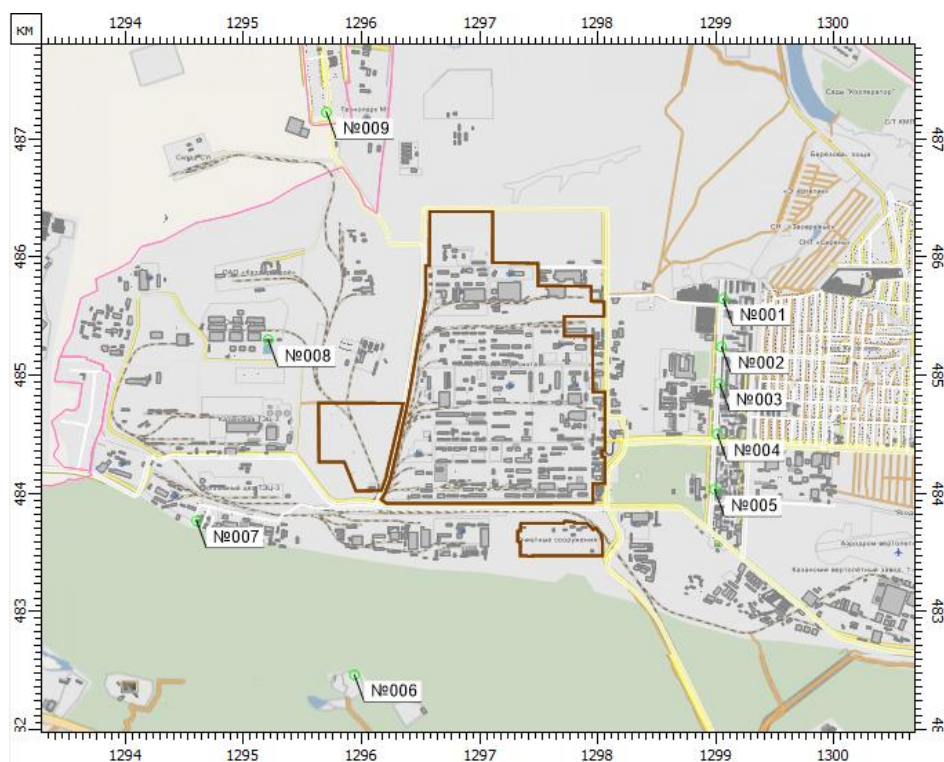


Рисунок 6.1 – Карта расположения расчетных точек

Для расчета концентраций  $\text{CO}_2$  рассчитанные программным комплексом УПРЗА «Эколог-Город» концентрации  $\text{CO}$  использовались в качестве предиктора в разработанной нейросетевой модели типа многослойный персептрон, количество входных нейронов определялось числом учитываемых предикторов; количество выходных нейронов – 1; количество скрытых слоев – 1; количество нейронов в скрытом слое – 4; функция активации нейронов скрытого слоя – гиперболический тангенс; функция активации нейрона выходного слоя – линейная. Использовались полные кортежи данных, содержащих одновременно измерения всех трех характеристик, использованных в качестве предикторов, для учета вторичных химических реакции в атмосферном воздухе. Непосредственно моделирование производилось в пакете Deductor Academic версии 5.3.

При обосновании выбора предикторов для каждого предиктора была построена собственная нейросетевая модель. Доказано, что использование только одного коэффициента трансформации не позволяет достичь стабильного повышения точности моделирования концентрации  $\text{CO}_2$ . То же относится и к использованию гамма-фона в качестве единственного отражающего вторичные химические реакции предиктора. Учет трех предикторов – КТ, гамма-фона и концентрации  $\text{O}_3$ , отражающих интенсивность вторичных химических реакций в атмосферном воздухе, дает наилучшие результаты. Окончательная гибридная модель для вычисления содержания  $\text{CO}_2$  включает вычислительный модуль, работающий по типовой регламентированной методике, а также два блока на основе нейронных сетей. Все вычисления выполняются поэтапно.

На первом этапе задействуется расчетный блок, который использует утвержденную методику рассеивания выбросов и определяет концентрацию  $\text{CO}$  в заданной точке. На втором этапе нейронная сеть вносит поправки в результаты, полученные на предыдущем шаге. На третьем этапе вторая группа нейронных сетей выполняет непосредственный расчет концентрации  $\text{CO}_2$ . В число входных параметров на данном этапе дополнительно включаются КТ, содержание  $\text{O}_3$  и гамма-фон. Графическое отображение порядка вычислений с использованием гибридной модели приведено на рисунке 6.2.

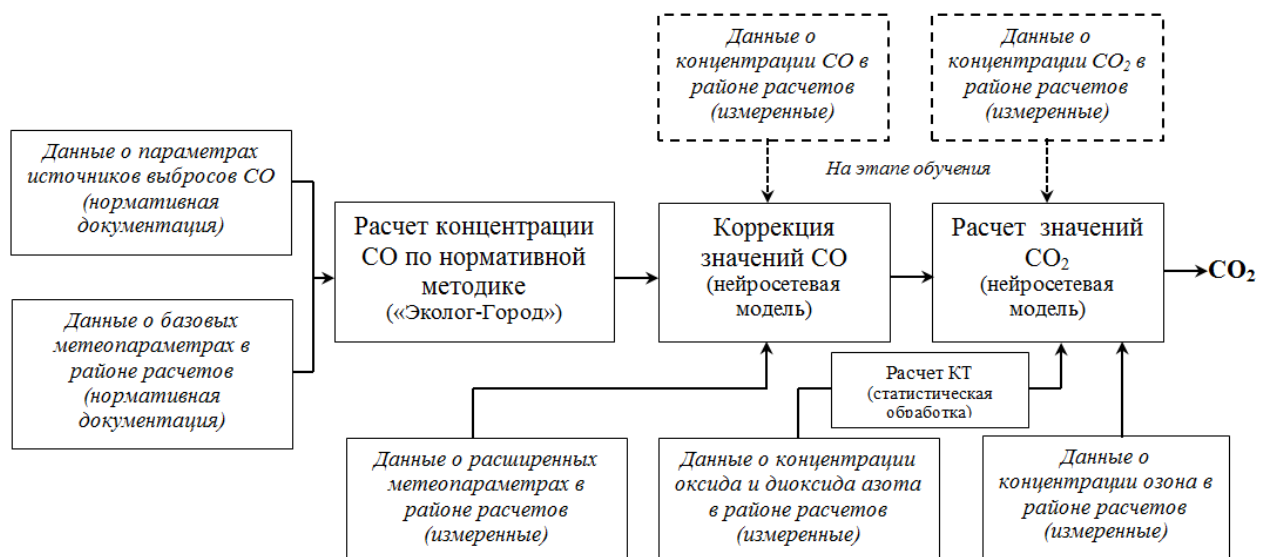


Рисунок 6.2 – Вычислительные блоки гибридной модели расчета концентрации  $\text{CO}_2$

Итоговая модель нейросетевого расчета концентраций углекислого газа с каскадной последовательностью вычислений показана на рисунке 6.3.

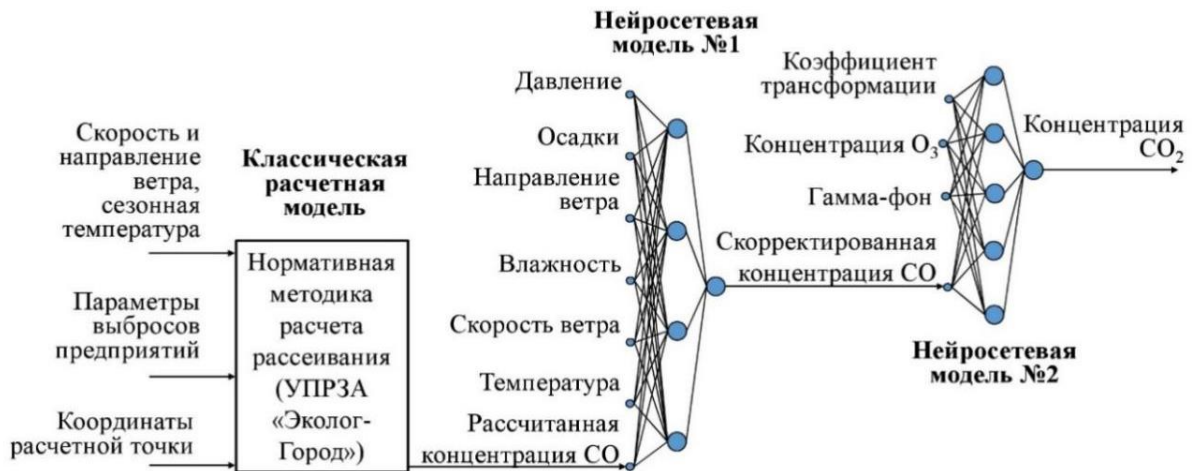


Рисунок 6.3 – Алгоритм нейросетевого расчета концентраций углекислого газа

Абсолютная точность прогноза для каждого обучающего и тестового примера вычислялась как модуль разности реального и прогнозного значений. Относительная погрешность определялась как процент отклонения расчетного значения от экспериментально измеренного. В качестве дополнительного параметра точности использована мера ACCURACY, отражающая относительный процент правильно распознанных кортежей данных. Графическое представление фрагмента результатов моделирования концентраций  $\text{CO}_2$  нейросетевой моделью в сравнении с экспериментально измеренными эталонными значениями показано на рисунке 6.4.

В результате проведенных исследований разработан способ получения расчетных значений приземных концентраций  $\text{CO}_2$  в условиях отсутствия данных о техногенных параметрах источников выбросов данного парникового газа. В качестве предикторов обосновано использование концентрации угарного газа  $\text{CO}$ , рассчитываемой в УПРЗА «Эколог-город» с использованием базы данных параметров выбросов химического предприятия, метеорологических условий,

определяющих процессы распространения примесей, коэффициента трансформации, гамма-фона и концентрации  $O_3$ .

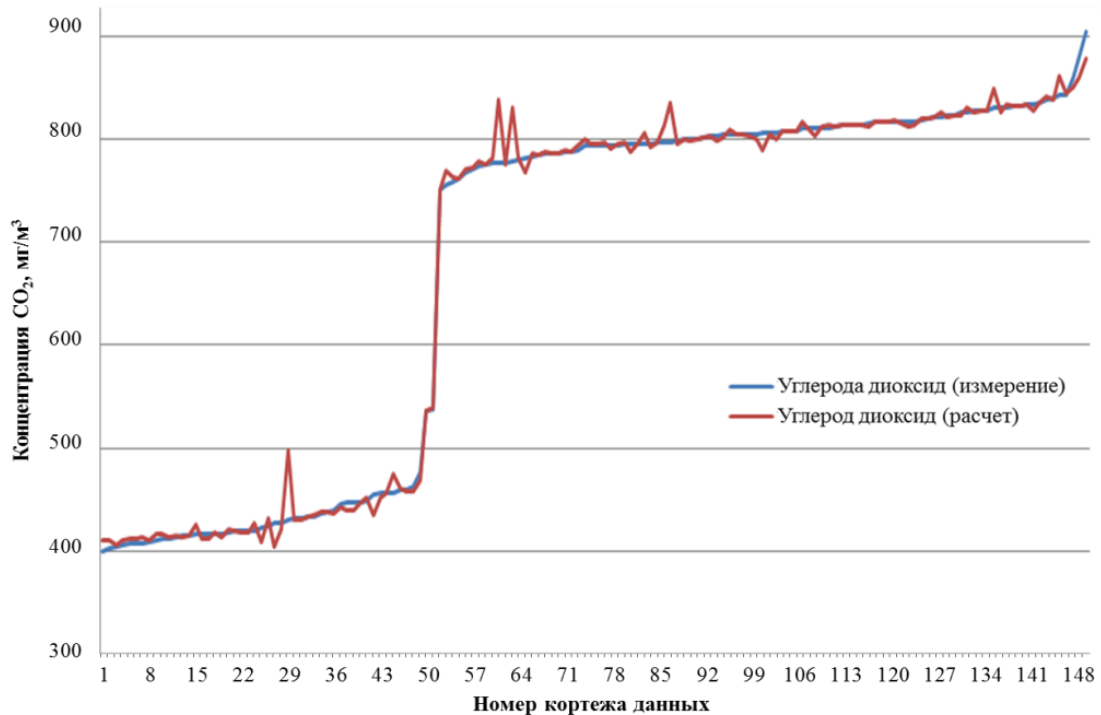


Рисунок 6.4 – Результаты моделирования концентраций  $CO_2$  нейросетевой моделью в сравнении с экспериментально измеренными эталонными значениями

Разработана каскадная методика расчета. На первом этапе используется регламентированный расчет концентраций  $CO$ . Вторым этапом является нейросетевая коррекция результатов, полученных на первом этапе, со значительным увеличением точности расчетов концентрации  $CO$ . На третьем этапе используются разработанные нейронные сети, рассчитывающие непосредственно концентрацию  $CO_2$ . Вычислительные эксперименты продемонстрировали высокую точность предложенного подхода. Использование коэффициента трансформации, концентраций  $O_3$  и гамма-фона в качестве предикторов для учета вторичных химических реакций в атмосферном воздухе дает наиболее точные результаты расчетов. Средняя погрешность модели по всему набору данных составила 0,9 %.

### 6.3 Заключение по главе 6

В главе разработан способ расчетного определения приземных концентраций  $\text{CO}_2$  для различных территорий с учетом процессов трансформации в атмосферном воздухе.

Предложен каскадный подход: на первом этапе с использованием УПРЗА «Эколог-Город» рассчитываются концентрации  $\text{CO}$  по имеющимся данным о параметрах выбросов от источников загрязнения. На втором этапе обученная нейросетевая модель корректирует полученные значения для повышения точности. На третьем этапе вторая нейросетевая модель рассчитывает концентрацию  $\text{CO}_2$ , используя в качестве предиктора скорректированную концентрацию  $\text{CO}$ , а также параметры, характеризующие вторичные химические реакции в атмосфере: коэффициент трансформации, концентрацию  $\text{O}_3$  и гамма-фон.

Показано, что наилучшая точность достигается при использовании всех трех указанных предикторов. Апробация способа на примере предприятия химической отрасли в г. Казани продемонстрировала высокую сходимость расчетных значений с экспериментальными данными, полученными на АСКЗА. Средняя погрешность модели по всему набору данных составила 0,9 %, что подтверждает эффективность предложенного хеометрического подхода для мониторинга парникового газа  $\text{CO}_2$  в условиях урбанизированных территорий.

## Заключение

В диссертационной работе решена актуальная научно-практическая задача – повышение информативности и достоверности системы экологического мониторинга качества атмосферного воздуха на основе внедрения хемометрических подходов. Разработанный комплекс методик позволяет повысить эффективность систем экологического контроля на всех уровнях – от локального (производственный экологический контроль) до территориального (государственный экологический мониторинг). Предложенные подходы обладают универсальностью и могут быть масштабированы на другие урбанизированные территории, что определяет их значимость для развития системы экологического мониторинга. С учетом выявленных ограничений действующей системы экологического мониторинга, а именно недостаточной плотности сети, несовместимости данных разных ведомств, сложности учета нелинейных зависимостей, залповых выбросов загрязняющих веществ и вторичных химических реакций в атмосферном воздухе, получены следующие основные результаты и выводы:

1. Определены приоритетные для контроля загрязняющие вещества (оксиды азота и углерода), для которых установлены превышения максимальных разовых предельно допустимых концентраций до 18,4 ПДК и выявлены метеорологические условия формирования наиболее высоких концентраций в атмосферном воздухе в урбозкосистеме. Установлено, что формирование приземных концентраций происходит в зависимости от режимов работы источников выбросов и вторичных химических реакций в атмосферном воздухе.

2. Разработана методика формирования программы производственного экологического контроля загрязнения атмосферного воздуха с позиций риск-ориентированного подхода и нечеткой кластеризации. Определено местоположение точек контроля с использованием метода последовательной бинарной кластеризации данных с экспертным оцениванием, на примере предприятия химической отрасли. Обоснован алгоритм выбора приоритетных для

контроля загрязняющих веществ, из всего перечня присутствующих в выбросах примесей, и периодичности их контроля с использованием предложенного вероятностного критерия опасности рНQ с использованием риск-ориентированных подходов.

3. Разработана прогностическая нейросетевая модель для определения концентраций загрязняющих веществ в приземном слое атмосферного воздуха с учетом информации об ожидаемых метеорологических условиях. Показано, что в 86,2 % случаев нейросетевая модель правильно предсказывает повышение концентрации оксидов азота для ряда среднесуточных концентраций.

4. Определен способ учета залповых выбросов на примере предприятия химической отрасли для корректной оценки воздействия выбросов данного объекта на прилегающие территории. Установлено, что максимальные приземные концентрации для таких веществ, как диоксид азота, углерод, оксид углерода и сопутствующие суммации, с учетом пиковых нагрузок во время залповых выбросов оказались значительно выше в 2 и более раза, что свидетельствует о потенциальном превышении гигиенических нормативов качества атмосферного воздуха. Предложено определение понятия «залповые выбросы».

5. Разработана методика оперативного прогноза концентраций диоксида азота на основе кластеризации данных совместно с применением искусственных нейронных сетей, учитывающая особенности формирования приземных концентраций при увеличении мощности эмиссии загрязняющих веществ в атмосферный воздух. Среднее значение коэффициента детерминации гибридной модели превысило  $R^2 = 0,75$ , то есть по сравнению с базовой моделью точность прогнозирования была увеличена более чем в три раза.

6. Разработан способ нейросетевого расчета приземных концентраций диоксида углерода в условиях отсутствия данных о техногенных параметрах источников выбросов данного парникового газа на основе обоснованных предикторов: концентрации угарного газа, метеорологических условий рассеивания, а также коэффициента трансформации, гамма-фона и концентрации

О<sub>3</sub>, характеризующих вторичные химические реакции в атмосфере. Средняя погрешность модели по всему набору данных составила 0,9 %.

Перспективы разработки темы диссертационного исследования обширны. Полученные результаты служат развитию цифровизации системы государственного экологического мониторинга и производственного экологического контроля, позволяющего оперативно оценивать изменчивость уровней загрязнения атмосферного воздуха с учетом вкладов источников выбросов, определять допустимую степень аэрогенного воздействия предприятиями химической отрасли. Использование хемометрических подходов позволит предложить алгоритмы решения сложных задач для системы государственного и производственного экологического мониторинга и контроля. Данные диссертационного исследования могут быть использованы для развития риск-ориентированных способов ранжирования загрязняющих веществ по степени негативного воздействия на здоровье населения. Использование хемометрических подходов позволит осуществлять расчет приземных концентраций компонентов выбросов, который не может быть реализован существующими расчетными методами. Обоснованный максимально полный учет залповых выбросов в атмосферный воздух позволит значительно снизить негативное воздействие производственной деятельности для обеспечения экологического благополучия территорий.

**Список сокращений и условных обозначений**

АО – акционерное общество

АСКЗА – автоматизированная станция контроля загрязнения атмосферы

БД – база данных

ГИС – географическая информационная система

ГОСТ – государственный стандарт

ДЗЗ – дистанционное зондирование земли

ЕС – Европейский союз

ЗВ – загрязняющее вещество

ИЗА – индекс загрязнения атмосферы

ИЗАВ – источник загрязнения атмосферного воздуха

ИК – инфракрасное излучение

ИНС – искусственные нейронные сети

ИТС – информационно-технический справочник

КИЗА – комплексный индекс загрязнения атмосферы

КТ – коэффициент трансформации

Минприроды России – Министерство природных ресурсов и экологии Российской Федерации

МПЗА – метеорологический потенциал загрязнения атмосферы

МРР – методы расчетов рассеивания

МЭПР РТ – Министерство экологии и природных ресурсов Республики Татарстан

НВОС – негативное воздействие на окружающую среду

НДТ – наилучшие доступные технологии

НИИ – научно-исследовательский институт

НМУ – неблагоприятные метеорологические условия

НП – наибольшая повторяемость превышений

ОАО – открытое акционерное общество

ОБУВ – ориентировочный безопасный уровень воздействия

ОНД – общесоюзный нормативный документ

ООО – общество с ограниченной ответственностью

ПАО – публичное акционерное общество

ПГ – парниковый газ

ПДВ – предельно-допустимый выброс

ПДК – предельно-допустимая концентрация

ПДКм.р. – максимальная разовая предельно допустимая концентрация

ПДКс.г. – среднегодовая предельно допустимая концентрация

ПНЗ – пункт наблюдения за загрязнением

ПНСТ – предварительный национальный стандарт

пр. – проспект

ПЭК – производственный экологический контроль

РД – руководящий документ

РОБУЛ – Региональная оценка бюджета углерода лесов

РТ – Республика Татарстан

РФ – Российская Федерация

СЗЗ – санитарно-защитная зона

СИ – стандартный индекс

США – Соединенные Штаты Америки

ТКО – твердые коммунальные отходы

ТП – трудоемкость и производств

тыс. – тысяч

ТЭЦ – тепловая электростанция

УМПА – усовершенствованный метеорологический потенциал рассеивающей способности атмосферного воздуха

УПРЗА – унифицированная программа расчета загрязнения атмосферы

УСП – углеродный след продукции

УФ – ультрафиолетовое излучение

ФГБУ «УГМС РТ» – Федеральное государственное бюджетное учреждение «Управление по гидрометеорологии и мониторингу окружающей среды Республики Татарстан»

ФЗ – Федеральный закон

$\text{Al}_2\text{O}_3$  – диалюминий триоксид

$\text{C}_{12}\text{H}_{26}$ - $\text{C}_{19}\text{H}_{40}$  – углеводороды предельные  $\text{C}_{12}$ - $\text{C}_{19}$

$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$  – ацетальдегид

$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$  – уксусная кислота

$\text{C}_6\text{H}_6$  – бензол

$\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$  – фенол

$\text{C}_7\text{H}_8$  – толуол

$\text{C}_8\text{H}_{10}$  – этилбензол

$\text{C}_8\text{H}_8$  – стирол

$\text{CH}_3\text{Cl}$  – хлорметан

$\text{CO}$  – оксид углерода

$\text{CO}_2$  – диоксид углерода

$\text{H}_2\text{S}$  – сероводород

LCS – legrand cabling system

LSTM – long short-term memory

MAE – mean absolute error

MLP – multilayer perceptrons

MLR – multidimensional linear regression

MPE – mean percentage error

$\text{NH}_3$  – аммиак

$\text{NO}$  – азота оксид

$\text{NO}_x$  – оксиды азота

$\text{NO}_2$  – азота диоксид

PCA – principal component analysis

PLS – partial least squares

PM<sub>10</sub>, PM<sub>2.5</sub> – particulate matter

pH – показатель кислотности воды или других растворов, отрицательный десятичный логарифм концентрации ионов водорода

RMSE – root mean square error

$\text{SiO}_2$  – кремния диоксид

$\text{SO}_2$  – серы диоксид

### Список литературы

1. Байтелова, А.И. Экологические особенности городской среды / А.И. Байтелова // М.: Литрес. – 2016. – 100 с.
2. Музалевский, А.А. Техногенный и экологический риск в природно-технических системах / А.А. Музалевский // СПб.: Изд-во РГГУ. – 2019. – 144 с.
3. Grimm, N. B. Global change and the ecology of cities / N.B. Grimm, S.H. Faeth, N.E. Golubiewski, C.L. Redman, J. Wu, X. Bai, J.M. Briggs // Science. – 2008. – V. 319. – №5864. – P.756-760.
4. Герасимова, О.В. Комплексная оценка воздействия на экосистемы при градостроительном зонировании и разработке планов реабилитации их отдельных участков / О.В. Герасимова, В.А. Кузнецов // Лесной вестник. – 2011. – №7. – С. 51-55.
5. Southerland, V.A. Global urban temporal trends in fine particulate matter (PM<sub>2.5</sub>) and attributable health burdens: estimates from global datasets. / V.A. Southerland, M. Brauer, et al // Lancet Planet Health. – 2022. – 6(2):e139-e146. doi: 10.1016/S2542-5196(21)00350-8.
6. Burnett, R. Global estimates of mortality associated with long-term exposure to outdoor fine particulate matter / R. Burnett, H. Chen, M. Szyszkowicz, et al // Proc Natl Acad Sci U S A. – 2018. – 115(38):9592-9597. doi: 10.1073/pnas.1803222115.
7. Galloway, J. N. Nitrogen cycles: past, present, and future / J.N. Galloway, F.J. Dentener, D.G. Capone, E. W. Boyer, et al // Biogeochemistry. – 2004. – V. 70. – №2. – P.153-226.
8. Зализняк, Е.А. КРІ государственного управления безопасностью в техносфере на примере охраны атмосферного воздуха / Е.А. Зализняк, Е.А. Иванцова, Е. Р. Зализняк // Природные системы и ресурсы. – 2018. – Т. 8. – №3. – С. 38-50.
9. Гао, Ж. Выбросы углерода: влияние на структуру экономики, энергетическую политику и климат – на примере Китая и России / Ж. Гао, А.И. Семячков, Я. Сан // Экономика региона. – 2025. – №3. – С. 859-874.
10. Шагидуллин, А.Р. Автотранспорт как источник загрязнения атмосферного воздуха (на примере г.Казань) / А.Р. Шагидуллин, В.А.

Габдрахимова, А.Р. Магдеева, А.А. Ибрагимова, Р.А. Шагидуллин, Шагидуллин Р.Р. // Сборник материалов Всероссийской научно-практической конференции «Экология. Риск. Безопасность» (Курган, 29-30 октября 2020 года). – Курган, 2020. – С. 25-28.

11. Габдрахимова, В.А. Роль автотранспорта в загрязнении атмосферного воздуха в крупном промышленном городе / В.А. Габдрахимова, А.Р. Шагидуллин, А.А. Ибрагимова, А.Р. Магдеева, Р.Р. Шагидуллин // Транспортные системы: безопасность, новые технологии, экология: сборник трудов III международной научно-практической конференции (г. Якутск, 16 апреля 2021 г.). – Якутск, 2021. – С. 346-350.

12. Коваль, В.Н. Экологическая роль геохимических барьеров почвы / В.Н. Коваль // Наука, образование и культура. – 2020. – №6(50). – С. 12-13.

13. Каманина, И.З. Канцерогенный риск, связанный с загрязнением почв, для здоровья населения городов / И.З. Каманина, С.П. Каплина, О.А. Макаров // Гигиена и санитария. – 2023. – Т. 102. – №3. – С. 299-304. doi: 10.47470/0016-9900-2023-102-3-299-304.

14. Ковалев, Д.В. Кислотные дожди как экологическая проблема [Электронный ресурс] / Д.В. Ковалев, Е.Н. Френкель // Материалы IX Международной студенческой научной конференции «Студенческий научный форум». – Режим доступа: <https://scienceforum.ru/2017/article/2017039075> (дата обращения: 23.01.2026).

15. Ершова, М.В. Тяжелые металлы и их влияние на растения / М.В. Ершова, В.Н. Поликарпов // Природноресурсный потенциал, экология и устойчивое развитие регионов России: Сборник статей XXIII Международной научно-практической конференции, Пенза, 20–21 января 2025. – Пенза: Пензенский государственный аграрный университет. – 2025. – С. 71-74.

16. Wanner, H. Monitoring and Modelling Airflow and Air Pollution as a Base for Landuse Planning / H. Wanner // The Case of Biel. Switzerland. International Geographical Congress. Washington. – 1992. – P. 45-47.

17. Перельман, А.И. Геохимия ландшафта / А.И. Перельман, Н.С. Касимов // М.: Астерия – 2000. – 768 с.
18. Bormann, F.N. The effects of air pollution on the New England landscape. / F.N. Bormann // *Ambio*. – 1982. – V. 11. – №6. – P. 338-346.
19. Васильева, М.А. Использование значений ПДК и фоновых концентраций для учета региональных особенностей содержания металлов в почве для оценки локального уровня загрязнения приземного слоя атмосферного воздуха по составу депонирующих сред / М.А. Васильева, А.Р. Шагидуллин, В.А. Габдрахимова // Сборник материалов Международной молодежной научной конференции «XXV Туполевские чтения (школа молодых ученых)» (г.Казань, 10-11 ноября 2021 г.). – Казань: Изд-во ИП Сагиева А.Р. – 2021. – С. 319-321.
20. Кошелева, Н.Е. Влияние геохимических барьеров на накопление тяжелых металлов в городских почвах / Н.Е. Кошелева, Н.С. Касимов, Д.В. Власов // Доклады Академии наук. – 2014. – Т. 458. – №2. – 220 с. doi: 10.7868/S0869565214260193.
21. Amato, F. A review on the effectiveness of street sweeping, washing and dust suppressants as urban PM control methods / F. Amato, X. Querol, C. Johansson, C. Nagl, A. Alastuey // *Science of The Total Environment*. – 2010. – V. 408. – №16. – P. 3070-3084.
22. Thorpe, A. Sources and properties of non-exhaust particulate matter from road traffic: A review / A. Thorpe, R. M. Harrison // *Science of The Total Environment*. – 2008. – V. 400. – №1-3. – P. 270-282.
23. Воскобойникова, В.А. Кислотные осадки как следствие антропогенного фактора / В.А. Воскобойникова // *Международный журнал гуманитарных и естественных наук*. – 2021. – №1-3. – С. 12–14. doi: 10.24411/2500-1000-2021-1113.
24. Nowak, D.J. Modeled PM<sub>2.5</sub> removal by trees in ten U.S. cities and associated health effects / D.J. Nowak, S. Hirabayashi, A. Bodine, R. Hoehn. // *Environ Pollut*. – 2013. – 178:395-402. doi: 10.1016/j.envpol.2013.03.050.

25. Chaparro-Suarez, I.G. Nitrogen dioxide (NO<sub>2</sub>) uptake by vegetation controlled by atmospheric concentrations and plant stomatal aperture / I.G. Chaparro-Suarez, F.X. Meixner, J. Kesselmeier // *Atmospheric Environment*. – 2011. – V. 45. – №32. – P. 5742-5750.
26. Ильченко, И.А. Особенности сезонной динамики формирования ответных реакций городской экосистемы на химическое загрязнение (на примере г. Таганрога) / И.А. Ильченко // *Кадастр недвижимости и мониторинг природных ресурсов*. – 2012. – №1. – С. 34-42.
27. Большакова, А.Д. Роль зеленых насаждений в повышении качества здоровья городского населения (на примере г. Нижнего Новгорода) / А.Д. Большакова, Н.И. Зазнобина, Т.А. Ковалева // *СНВ*. – 2023. – №1. – С. 27-33.
28. Синицын, И.С. Оценка влияния загрязнения атмосферного воздуха города Ярославля на заболеваемость органов дыхания / Синицын И.С. // *Ярославский педагогический вестник*. – 2011. – №1. – Т. 3. – С. 190-194.
29. Ревич, Б.А. Экологическая эпидемиология / Б.А. Ревич, С.Л. Авалиани, Г.И. Тихонова // М.: Академия. – 2004. – 384 с.
30. Безуглая, Э.Ю. Проблемы загрязнения воздуха. Крупнейшие города России / Э.Ю. Безуглая, И.В. Смирнова // *Сборник инженерные системы №2*. С.Петербург. – 2008. – С. 24-32.
31. Потапов, А.И. Мониторинг, контроль, управление качеством окружающей среды / А.И. Потапов, В.Н. Воробьев, Л.Н. Карлин, А.А. Музалевский // СПб.: РГГМУ. – 2005. – 600 с.
32. Левич, А.П. Теоретические и методические основы технологии регионального контроля природной среды по данным экологического мониторинга / А.П. Левич, Н.Г. Булгаков, В.Н. Максимов // М.: НИА Природа. – 2004. – 271 с.
33. Штриплинг, Л.О. Совершенствование системы мониторинга атмосферного воздуха в населенном пункте / Л.О. Штриплинг, В.В. Баженов, Н.С. Баженова, П.Е. Нор // *Омский научный вестник*. – 2020. – № 3(171). – С. 80-85.
34. Вологодина, И.Д. Экологический мониторинг городов / И.Д. Вологодина // *Решетневские чтения: Материалы XXVIII Международной научно-практической*

конференции, посвященной 100-летию со Дня рождения генерального конструктора ракетно-космических систем академика Михаила Федоровича Решетнева. В 2-х частях, Красноярск, 18–22 ноября 2024 г. – Красноярск: Сибирский государственный университет науки и технологий им. акад. М.Ф. Решетнева – 2024. – С. 439-441.

35. Нурмехамитова, В.А. Анализ выбора предикторов нейросетевых моделей для расчета концентраций примесей на примере г. Казань / В.А. Нурмехамитова // XXVII Всероссийский аспирантско-магистерский научный семинар, посвященный Дню энергетика и 55-летию КГЭУ: материалы докладов, Казань, 05–06 декабря 2023 г. – Казань: Казанский государственный энергетический университет. – 2023. – С. 488-491.

36. Об охране атмосферного воздуха: Федеральный закон от 04.05.1999 № 96-ФЗ (ред. от 08.08.2024) // Собрание законодательства РФ. – 1999. – №19.

37. Технический регламент о безопасности зданий и сооружений: Федеральный закон от 30.12.2009 № 384-ФЗ (ред. от 25.12.2023) // Собрание законодательства РФ. – 2010. – №1.

38. О состоянии и об охране окружающей среды Российской Федерации в 2023 году: Проект Государственного доклада. – М.: Минприроды России, ООО «Интеллектуальная аналитика», ФГБУ «Дирекция НТП», Фонд экологического мониторинга и международного технологического сотрудничества – 2024. – 707 с.

39. Панарин, В.М. Обзор станций автоматического мониторинга загрязнения атмосферного воздуха / В.М. Панарин, А.А. Маслова, К.В. Гришаков // Известия Тульского государственного университета. Технические науки. – 2022. – №7. – С. 69-75. – doi: 10.24412/2071-6168-2022-7-69-75.

40. Валиева, Э.Ф. Мониторинг атмосферного воздуха / Э.Ф. Валиева, В.И. Сафарова, Р.М. Хатмуллина // Наука, образование, производство в решении экологических проблем (Экология-2020): Материалы XVI Международной научно-технической конференции, посвященной 75-летию Победы в Великой Отечественной войне. В 2-х томах, Уфа, 22 апреля 2020 г. Т. 2. – Уфа: Уфимский государственный авиационный технический университет. – 2020. – С. 119-121.

41. Попов, В.Н. Анализ технологии сенсорного мониторинга / В.Н. Попов, Т.В. Сафонова, К.А. Кирспуу // Информационные технологии и системы: управление, экономика, транспорт, право. – 2023. – №2(46). – С. 24-28.
42. Шагидуллина, Р.А. Проблемные вопросы проведения производственного экологического контроля в области охраны атмосферного воздуха / Р.А. Шагидуллина, А.Р. Шагидуллин, В.А. Нурмехамитова, Р.Р. Шагидуллин // Российский журнал прикладной экологии. – 2025. – №1(41). – С. 70-78.
43. Мальгинов, А.В. Обеспечение прослеживаемости результатов измерений содержания загрязняющих веществ в промышленных выбросах автоматическими измерительными системами / Мальгинов А.В., Попов О.Г., Колобова А.В., Конопелько Л.А., Кустиков Ю.А. // Эталоны. Стандартные образцы. – 2020. – №4. С. 17-26.
44. Шагидуллин, А.Р. Определение приоритетных источников выбросов вредных веществ для оснащения системами автоматического контроля в соответствии с требованиями законодательства / А.Р. Шагидуллин, А.Ф. Гилязова, В.А. Габдрахимова // Материалы VI Всероссийской конференции и школы для молодых ученых (с международным участием) «Системы обеспечения техносферной безопасности» (Таганрог, 4-5 октября 2019 г.). – Таганрог: Изд-во ЮФУ, 2019. – С. 152-153.
45. Шарафутдинова, А.В. Значение и проблемы проведения экологического мониторинга / А. В. Шарафутдинова // Известия Казанского государственного архитектурно-строительного университета. – 2007. – №1(7). – С. 94-95.
46. European Monitoring and Evaluation Programme [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <https://www.emep.int>.
47. Schultz, M. G. The Global Atmosphere Watch reactive gases measurement network / M. G. Schultz, H. Akimoto, J. Bottenheim, B. Buchmann, et al // Elementa: Science of the Anthropocene. – 2015. – 3. – P. 1-23. <https://doi.org/10.12952/journal.elementa.000067>
48. Николаев, И.В. Измерение концентрации озона в атмосфере по поглощению излучения УФ-светодиода / И.В. Николаев, В.Н. Очкин, Ф.Ю.

Хаджийский, С.Н. Цхай, В.Ф. Чиркин // Краткие сообщения по физике ФИАН. – 2013. – №2. – С. 36-41.

49. ГОСТ Р 52733-2007 (ИСО 10498:2004) Атмосферный воздух. Определение диоксида серы. Ультрафиолетовый флуоресцентный метод. – М.: Стандартиформ, 2008. – 10 с.

50. ГОСТ Р 50759-95 Анализаторы газов для контроля промышленных и транспортных выбросов. Общие технические условия. – М.: Издательство стандартов, 1995. – 23 с.

51. Аблязов, Э.К. Решение лидарного уравнения для контроля углеводородов в атмосфере / Э.К. Аблязов, В.Г. Шеманин // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2009. – №2(77). – С. 117-121.

52. Сидельникова, О.П. Использование недорогих датчиков частиц для мониторинга загрязнения атмосферного воздуха пылевыми частицами PM<sub>2.5</sub> / О.П. Сидельникова, В.А. Багров, Ф.Г. Антонов, А.В. Дериченко, Р.А. Лясин, С.Ю. Ади Васим // Экономика строительства и природопользования. – 2023. – №4(89). – С. 50-58.

53. Kumar, P. The rise of low-cost sensing for managing air pollution in cities / P. Kumar, L. Morawska, C. Martani, G. Biskos, et al // Environment International. – 2015. – V. 75. – P. 199-205. doi: <https://doi.org/10.1016/j.envint.2014.11.019>.

54. Переведенцев, Ю.П. Качество атмосферного воздуха в центре г. Казани / Ю.П. Переведенцев, Ю.Г. Хабутдинов, Н.В. Исмагилов, А.А. Николаев // Вестник Удмуртского университета. Серия «Биология. Науки о Земле». – 2014. – №1. – С.122-130.

55. Храмова, Н.А. Современные источники загрязнения окружающей среды г. Казани / Н.А. Храмова // Ученые записки Казанского филиала «Российского государственного университета правосудия». – 2020. – Т. 16. – С. 381-388.

56. Ибрагимова, А.А. Пространственно-дифференцированная оценка уровня загрязнения атмосферного воздуха стационарными источниками в г. Казани / А.А. Ибрагимова, А.Р. Шагидуллин, В.А. Габдрахимова, Р.А. Шагидуллина,

Шагидуллин Р.Р. // Российский журнал прикладной экологии. – 2021. – №3 (27). – С. 58-66.

57. Габдрахимова, В.А. Результаты оценки загрязнения атмосферного воздуха на территории Раифского участка Волжско-Камского государственного природного биосферного заповедника / В.А. Габдрахимова, А.Р. Шагидуллин, Р.Р. Шагидуллин // Сборник трудов Международной научной конференции (школа молодых ученых) «Химия и инженерная экология – XIX» (Казань, 26-28 сентября 2019 г.). – Казань: Изд-во ИП Сагиева А.Р., 2019. – С. 302-305.

58. Ежегодный обзор состояния загрязнения атмосферного воздуха. 2023 [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <https://www.tatarmeteo.ru/ru/monitoring-okruzhayushhej-sredyi/ezhegodnyij-obzor-sostoyaniya-zagryazneniya-atmosfernogo-vozduxa.html>.

59. Государственный доклад о состоянии природных ресурсов и об охране окружающей среды Республики Татарстан в 2024 году [Электронный ресурс]. - Режим доступа: [https://eco.tatarstan.ru/file/pub/pub\\_4607449.pdf](https://eco.tatarstan.ru/file/pub/pub_4607449.pdf).

60. Р 2.1.10.3968-23. Руководство по оценке риска здоровью населения при воздействии химических веществ, загрязняющих среду обитания. М.: Роспотребнадзор, 2023. – 221 с.

61. Тафеева, Е.А. Загрязнение атмосферного воздуха формальдегидом и риск здоровью населения / Е.А. Тафеева, О.А. Фролова, Н.Х. Давлетова, А.С. Радченко // Вестник новых медицинских технологий. Электронное издание. – 2023. – №4. – С. 78-84.

62. Гасилин, В.В. Оценка риска для здоровья населения города Казани от воздействия химических веществ, загрязняющих атмосферный воздух (по данным лабораторных исследований различных ведомств) / В.В. Гасилин, Е.П. Бочаров, А.А. Айзатуллин, Д.М. Игнатьев // Анализ риска здоровью. – 2013. – №3. – С. 41-47.

63. Габдрахимова, В.А. Оценка условий самоочищения атмосферного воздуха по результатам измерений автоматизированных станций контроля загрязнения атмосферы / В.А. Габдрахимова, А.Р. Шагидуллин // XXVI Туполевские чтения (школа молодых ученых). Международная молодежная

научная конференция, материалы конференции (г. Казань, 9-10 ноября 2023 г.). Казань: ИП Сагиев А.Р., 2023. – С. 1876-1879.

64. РД 52.04.667-2005. Документы о состоянии загрязнения атмосферы в городах для информирования государственных органов, общественности и населения. Общие требования к разработке, построению, изложению и содержанию, 2005. – 52 с.

65. Шагидуллин, А.Р. Особенности регулирования выбросов загрязняющих веществ при неблагоприятных метеорологических условиях / А.Р. Шагидуллин, В.А. Нурмехамитова, Р.А. Шагидуллина, А. Ф. Гилязова, Р.Р. Шагидуллин // Химия и инженерная экология - XXIV : Сборник трудов международной научной конференции (школа молодых ученых), посвященной Году научно-технологического развития в Республике Татарстан, Казань, 27–28 сентября 2024 г. – Казань: ИП Сагиев А.Р., 2024. – С. 188-191.

66. Шагидуллин, А.Р. Снижение негативного воздействия на атмосферный воздух в периоды неблагоприятных метеорологических условий / А.Р. Шагидуллин, В.А. Габдрахимова, А.Р. Магдеева, А.А. Ибрагимова, Р.А. Шагидуллина, Р.Р. Шагидуллин // Сборник материалов Всероссийской научно-практической конференции «Экология. Риск. Безопасность» (Курган, 29-30 октября 2020 года). – 2020. – С.21-24.

67. РД 52.04.186-89. Руководство по контролю загрязнения атмосферы. – М.: Госкомгидромет СССР, 1989. – 573 с.

68. Бударина, О.В. Комплексная гигиеническая оценка загрязнения атмосферного воздуха в местах размещения пищевых продуктов и перерабатывающей продукции / О.В. Бударина, З.Ф. Сабирова, С.А. Сковронская, Н.С. Додина, А.А. Кохан, А.Г. Малышева // Гигиена и санитария. – 2024. – №3. – С. 198-207.

69. Шагидуллина, Р.А. Предложения по повышению эффективности работ по мониторингу загрязнения атмосферного воздуха в Республике Татарстан / Р.А. Шагидуллина, А.Р. Шагидуллин, В.А. Нурмехамитова, А.А. Мусина, А.Ф.

Гилязова, Р.Р. Шагидуллин // Российский журнал прикладной экологии. – 2023. – № 3(35). – С. 49-55.

70. Александр Шадриков: «Мы сейчас получаем данные о качестве воздуха с 30 станций. 13 из них – это станции градообразующих предприятий». Министерство экологии и природных ресурсов Республики Татарстан, 28.08.2025 [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <https://eco.tatarstan.ru/index.htm/news/2445522.htm>.

71. Экологический мониторинг. Сибур [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <https://www.sibur.ru/kazanorgsintez/ru/disclosure/ecomonitoring>.

72. Шагидуллина, Р.А. Развитие цифровых технологий на основе сводных расчетов загрязнения атмосферного воздуха / Р.А. Шагидуллина, В.А. Нурмехамитова, А.Р. Шагидуллин, Д.Ф. Валиуллин // Kazan digital week – 2024: сборник материалов Международного форума, Казань, 09–11 сентября 2024 г. – Казань: Научный центр безопасности жизнедеятельности, 2024. – С. 157-161.

73. Ибрагимова, А.А. Ранжирование территории города на основе результатов расчетного мониторинга загрязнения атмосферного воздуха стационарными источниками / А.А. Ибрагимова, А.Р. Шагидуллин, Габдрахимова В.А., Шагидуллина Р.А., Шагидуллин Р.Р. // Системы контроля окружающей среды. – 2021. – № 4. – С. 111-117.

74. Приказ Минприроды России от 06.06.2017 № 273 «Об утверждении методов расчетов рассеивания выбросов вредных (загрязняющих) веществ в атмосферном воздухе».

75. Приказ Минприроды России от 27.02.2020 № 99 «Об утверждении методики разработки (расчета) и установления нормативов допустимых выбросов загрязняющих веществ в атмосферный воздух».

76. Друганова, Л.П. К проблеме актуальности развития геоинформационных систем (ГИС) в охране здоровья населения / Л.П. Друганова, Т.В. Шаева // Научный вестник Воронежского государственного архитектурно-строительного университета. Серия: Информационные технологии в строительных, социальных и экономических системах, 2013. – № 2(2). – С. 50-52.

77. Шагидуллин, А.Р. Применение сводных расчетов загрязнения атмосферного воздуха для решения задач по управлению качеством окружающей среды / А. Р. Шагидуллин // Российский журнал прикладной экологии. – 2022. – №1(29). – С. 60-67. doi: 10.24852/2411-7374.2022.1.60.67.

78. Шагидуллина, Р.А. Направления применения расчетного мониторинга загрязнения атмосферы для обеспечения экологической безопасности территорий / Р.А. Шагидуллина, В.А. Нурмехамитова, А.Ф. Гилязова, А.А. Мусина, А.Р. Шагидуллин // Современные технологии в области защиты окружающей среды и техносферной безопасности, Материалы Всероссийской научно-образовательной конференции с международным участием (г.Казань, 16-17 марта 2024 г.). – Казань: Изд-во КНИТУ, 2024. – С. 651-655.

79. Шагидуллина, Р.А. Роль системы сводных расчетов загрязнения атмосферного воздуха в обеспечении качества воздушной среды урбанизированных территорий / Р.А. Шагидуллина, Р.И. Камалов, А. Р. Шагидуллин, Р.Р. Шагидуллин // Хартия Земли – практический инструмент решения фундаментальных проблем устойчивого развития: сборник материалов международной научно-практической конференции, посвященной 15-летию реализации принципов Хартии Земли в Республике Татарстан, Казань, 27–28 октября 2016 г. – Казань: Татарское книжное издательство, 2016. – С. 265-267.

80. Шагидуллин, А.Р. Применение сводных расчетов для анализа корректности установленных нормативов выбросов загрязняющих веществ в г. Нижнекамск / А.Р. Шагидуллин, А.Р. Магдеева, В.А. Габдрахимова // Материалы Международной молодежной научной конференции «XXIV Туполевские чтения (школа молодых ученых)» (Казань, 7-8 ноября 2019 г.). – Казань. Изд-во ИП Сагиева А.Р., 2019. – С. 494-496.

81. Об охране окружающей среды: Федеральный закон от 10.01.2002 № 7-ФЗ (ред. от 28.12.2025) // Собрание законодательства РФ. – 14.01.2002. – № 2. – ст. 67.

82. Семисотов, А.А. Производственный экологический контроль на предприятии / А.А. Семисотов, Н.Е. Степанова // Форум молодых ученых. – 2025. – №7(107). – С. 26-28.

83. Приказ Минприроды России от 11.08.2020 № 581 «Об утверждении методики разработки (расчета) и установления нормативов допустимых выбросов загрязняющих веществ в атмосферный воздух».

84. Приказ Минприроды России от 18.02.2022 № 109 «Об утверждении требований к содержанию программы производственного экологического контроля, порядка и сроков предоставления отчета об организации и о результатах осуществления производственного экологического контроля».

85. ИТС 22.1-2021 Общие принципы производственного экологического контроля и его метрологического обеспечения. – Утвержден 02.12.2021. – Москва: Бюро НДТ, 2021. – 203 с.

86. Тунакова, Ю.А. Алгоритм разработки программы производственного экологического контроля атмосферного воздуха с использованием нейросетевых технологий / Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, Р.А. Шагидуллина, А. Р. Шагидуллин, В. С. Валиев, В. А. Нурмехамитова // Российский журнал прикладной экологии. – 2026. – №1. – С. 88-96.

87. Дидиков, А.Е. Порядок и особенности организации производственного экологического контроля на предприятиях хлебопекарной отрасли / А.Е. Дидиков // Научный журнал НИУ ИТМО. Серия: Экономика и экологический менеджмент. – 2020. – №1. – С. 95-102. doi: 10.17586/2310-1172-2020-13-1-95-102.

88. Василькин, В.М. Организация производственного экологического мониторинга и контроля / В.М. Василькин // Научный Лидер. – 2025. – №17(218). – С. 181-188.

89. Шагидуллина, Р.А. Алгоритм разработки программы производственного экологического контроля в области загрязнения атмосферного воздуха / Р.А. Шагидуллина, Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, В.А. Нурмехамитова // Химия и инженерная экология – XXV / Сборник трудов международной научной конференции (школа молодых ученых), посвященной научному сотрудничеству России и дружественных стран, а также деятельности Академического союза «Зеленого» развития Ассоциации технических университетов России и Китая (г. Казань, 25–26 сентября 2025г.). – Казань: ИП Сагиев А.Р., 2025. – С. 279-285.

90. Тунакова, Ю.А. Области применения моделей для расчета распределения примесей в приземном слое атмосферного воздуха / Ю.А. Тунакова, И.Г. Григорьева, Р.А. Шагидуллина // Вестник Казанского технологического университета. – 2014. – Т. 17. – №20. – С. 163-166.

91. Об охране атмосферного воздуха: Федеральный закон от 04.05.1999 № 96-ФЗ (ред. от 08.08.2024) // Собрание законодательства Российской Федерации. – 1999. – №18. – Ст. 22.

92. Kumar Varma, S.A. Prediction of Ground Level Concentrations of Air Pollutants Using Gaussian Model, Rayalaseema Thermal Power Project, Kadapa, A.P., India / S.A. Kumar Varma, M. Srimurali, S.V. Kumar Varma // Energy and Environmental Engineering. – 2014. – V. 2(4). – P. 91-97. doi: 10.13189/eee.2014.020402.

93. Lozhkina, O.V. Analysis of the physic-mathematical models of the atmospheric diffusion for estimation of the influence of the cars on town ambience / O.V. Lozhkina, V.V. Popov, A.D. Kyznecova // Vestnik Saint-Petersburg University of State Fire Service of EMERCOM of Russia. – 2012. – V. 1. – P. 59-66.

94. Белихов, А. Б. Современные компьютерные модели распространения загрязняющих веществ в атмосфере / А.Б. Белихов, Д.Л. Леготин, А.К. Сухов // Вестник КГУ. – 2013. – №1. – С. 14-19.

95. Тунакова, Ю.А. Разработка технологии расчетного экологического мониторинга на территории интенсивного антропогенного воздействия / Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, Е.С. Мухаметшина // Вестник Казанского технологического университета. – 2014. – №16. – С. 136-137.

96. Пузанченко, Ю.Г. Математические методы в экологических и географических исследованиях / Ю.Г. Пузанченко // М.: Издательский центр «Академия», 2004. – 416 с.

97. Benestad, R.E. Various ways of using Empirical Orthogonal Functions for Climate Model evaluation / R.E. Benestad, A. Mezghani, J. Lutz, A. Dobler, K. Parding, O. A. Landgren // Egosphere. – 2023. – P. 1-25. doi:10.5194/egosphere-2022-1385.

98. Балабина, О.В. Классические методы прогнозирования / О.В. Балабина // Вестник магистратуры. – 2025. – №8(167). – С. 25-28.
99. Белов, И.В. Транспортная модель распространения газообразных примесей в атмосфере города / И.В. Белов, М.С. Беспалов, Л.В. Ключкова, А.А. Кулешов, Д.В. Сузан, В.Ф. Тишкин // Математическое моделирование. – 2000. – Т. 12. – №11. – С. 56-82.
100. Белов, И.В. Сравнительный анализ некоторых математических моделей для процессов распространения загрязнений в атмосфере / И.В. Белов, М.С. Беспалов, Л.В. Ключкова, Н.К. Павлова, Д.В. Сузан, В.Ф. Тишкин // Математическое моделирование. – 1999. – Т. 11. – №7. – С. 45-49.
101. Berlyand, M.E. Experimental investigation of atmospheric pollution due to motor vehicles / M.E. Berlyand, N.S. Burenin, E.L. Genihovich // Proc. Sov. American. Symp on mobile sources of air pollution. – V. 1. – 1992. – P. 105-121.
102. Uliasz, M. Regional modelling of air pollution transport in the south-western USA / M. Uliasz, R.A. Stocker, R.A. Pielke // Environmental Modelling III. – 1996. – P. 145-182.
103. Kukkonen, J. Evaluation of the dispersion model CAR-FMI against data from a measurement campaign near a major road / J. Kukkonen, J. Härkönen, J. Walden // Atmospheric Environment. – 2001. – V. 35/5. – P. 949-960.
104. Цветкова, Т.В. Экологический мониторинг и прогноз катастроф / Т.В. Цветкова, И.О. Невинский, В.Т. Панюшкин // Монография. Кубанский государственный университет, Краснодар. – 2005. – 347 с.
105. Строгонов, А. Прогнозирование деградации выходных параметров ТТЛ ИС / А. Строгонов // Компоненты и технологии. – 2005. – №8. – С 194-199.
106. Ларина, Н.С. Химико-экологический мониторинг городских территорий / Н.С. Ларина, М.Н. Куранова, Н.С. Палецких // Фундаментальные исследования. – 2005. – №10. – С. 82-84.
107. Dupont, M.F. Chemometrics for environmental monitoring: a review / M.F. Dupont, A. Elbourne, D. Cozzolino, J. Chapman, et al // Analytical Methods. – 2020. – V. 12. – P. 4597-4620.

108. Compendium of Chemical Terminology (Gold Book) [Электронный ресурс]. International Union of Pure and Applied Chemistry. - Режим доступа: <https://goldbook.iupac.org>.
109. Abdul-Wahab, S. A. Assessment and prediction of tropospheric ozone concentration levels using artificial neural networks / S.A Abdul-Wahab, S.M Al-Alawi, // Environmental Modelling and Software. – 2002. – V. 17 (3). – P. 219-228. doi: 10.1016/S1364-8152(01)00077-9.
110. Inobeme, A. Chemometric approach in environmental pollution analysis: A critical review / A. Inobeme, V. Nayak, T. J. Mathew, S. Okonkwo, et al // Journal of Environmental Management. – 2022. – V. 309. doi: 10.1016/j.jenvman.2022.114653/.
111. Vicente, E.D. Alves Assessment of the indoor air quality in copy centres at Aveiro / E.D. Vicente, J.P. Ribeiro, D. Custódio, et al // Portugal Air Qual. – 2017. – P. 117-127.
112. Gobiet, A. Urban air pollution monitoring with DOAS considering the local meteorological situation / A. Gobiet, D. Baumgartner, T. Krobath, R. Maderbacher, E. Putz // Urban Air Quality: Measurement, Modelling and Management. Springer Netherlands. – 2000. – P. 119-127.
113. Guariso, G. A decision framework for Integrated Assessment Modelling of air quality at regional and local scale / G. Guarisoa, M. Maioneb, M. Voltac // Environmental science and policy. – 2015. – №1781. – P. 10.
114. Huang, J. Health impact of China's air pollution prevention and control action plan: An analysis of national air quality monitoring and mortality data / J. Huang, X. Pan, X. Guo, G. Li // Lancet Planet. Health. – 2018. – V. 2(7). – P. 313-323.
115. Sirithian, D. Influence of Grid Resolution in Modeling of Air Pollution from Open Burning / D. Sirithian, S. Thepanondh // Atmosphere. – 2016. – V. 7(7). – 18 p.
116. Chen, J. Temporal and spatial features of the correlation between PM<sub>2.5</sub> and O<sub>3</sub> concentrations in China / J. Chen, H. Shen, T. Li, X. Peng, H. Cheng, C. Ma // Int. J. Environ. Res. Public Health. – 2019. – V. 16 (23). – P. 2-17.

117. Briffa, J. Heavy metal pollution in the environment and their toxicological effects on humans / J. Briffa, E. Sinagra, R. Blundell // *Heliyon*. – 2020. – V. 6(9). doi: 10.1016/j.heliyon.2020.e04691.

118. Egbueri, J.C. Prediction modeling of potentially toxic elements' hydrogeopollution using an integrated Q-mode HCs and ANNs machine learning approach in SE Nigeria / J.C. Egbueri // *Environmental Science and Pollution Research*. – 2021. – P. 40938-40956. doi:10.1007/s11356-021-13678-z.

119. Egbueri, J.C. A chemometric approach to source apportionment, ecological and health risk assessment of heavy metals in industrial soils from southwestern Nigeria / J.C. Egbueri, B.U. Ukah, O.E. Ubido, C.O. Unigwe // *International Journal of Environmental Analytical Chemistry*. – 2020. – V. 102(14). – P. 1-19. doi: 10.1080/03067319.2020.1769615.

120. Liu, E. Pollution and health risk of potentially toxic metals in urban road dust in Nanjing, a mega-city of China / E. Liu, T. Yan, G. Birch, Y. Zhu // *Science of the Total Environment*. – 2014. – V. 476. – P. 522-531. doi: 10.1016/j.scitotenv.2014.01.055.

121. Haque, S.M. Advanced Chemometric Techniques for Environmental Pollution Monitoring and Assessment: A Review / S.M. Haque, Y. Umar, A. Kabir // *Chemosensors*. – 2025. – V. 13(7). – 268 p. doi: 10.3390/chemosensors13070268.

122. Carslaw, D.C. New insights from comprehensive on-road measurements of NO<sub>x</sub>, NO<sub>2</sub> and NH<sub>3</sub> from vehicle emission remote sensing in London, UK. / D.C. Carslaw, G. Rhys-Tyler // *Atmospheric Environment*. – 2013. – V. 81. – P. 339-347.

123. Bystrzanowska, M. Chemometrics for selection, prediction, and classification of sustainable solutions for green chemistry—a review / M. Bystrzanowska, M. Tobiszewski // *Symmetry*. – 2020. – V. 12(12):2055. doi: 10.3390/sym12122055.

124. Azid, A. Spatial air quality modelling using chemometrics techniques: A case study in Peninsular Malaysia / A. Azid, H. Juahir, M.A. Amran, Z. Suhaili, R. Osman, A. Muhamad, I.Z. Abidin, N.H. Sulaiman // *Malaysian Journal of Analytical Sciences*. – 2015. – V. 19. – №6. – P. 1415-1430.

125. Осипова, Т.В. Метод главных компонент как альтернативный алгоритм обработки данных термokatалитических сенсоров / Т.В. Осипова, А.М. Баранов,

И.И. ИВАНОВ // НП. – 2022. – №1. – С. 77-92.

126. Brereton, R.G. Chemometrics in analytical chemistry–part I: history, experimental design and data analysis tools / R.G. Brereton, J. Jansen, J. Lopes, F. Marini, A. Pomerantsev, O. Rodionova // *Anal Bioanal Chem.* – 2017. – V. 409. – P. 5891-5899.

127. Kalivas, J.H. Calibration Methodologies / J.H. Kalivas // *Comprehensive Chemometrics: Chemical and Biochemical Data Analysis*. Editors-in-chief: R. Tauler, B. Walczak, S.D. Brown. Elsevier. – 2009. – P. 1-32.

128. Barker, M. Partial least squares for discrimination / M. Barker, W. Rayens // *Journal of Chemometrics.* – 2003. – V.17. – P. 166-173.

129. Brereton, R.G. Partial least squares discriminant analysis: taking the magic away / R.G. Brereton, G.R. Lloyd // *Journal of Chemometrics.* – 2014. – V. 28(4). – P. 221-235.

130. Gorrochategui, E. Data analysis strategies for targeted and untargeted LC-MS metabolomic studies: overview and workflow / E. Gorrochategui, J. Jaumot, S. Lacorte, R. Tauler // *TrAC - Trends in Anal Chem.* – 2016. – V. 82. – P. 425-442.

131. Kang, Y. Estimation of surface-level NO<sub>2</sub> and O<sub>3</sub> concentrations using TROPOMI data and machine learning over east Asia / H. Choi, J. Im, S. Park, M. Shin, C.-K. Song, S. Kim // *Environmental Pollution.* – 2021. – V. 288:117711.

132. Vlachokostas, Ch. Multicriteria methodological approach to manage urban air pollution / Ch. Vlachokostas // *Atmospheric Environment.* – 2011. – V. 45. – P. 4160-4169.

133. Hornik, K. Universal approximation of an unknown mapping and its derivatives using multilayer feedforward networks / K. Hornik, M. Stinchcombe, H. White // *Neural Networks.* – 1990. – V. 3. – №5. – P. 551-560. doi: 10.1016/0893-6080(90)90005-6

134. Рутковская, Д. Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечеткие системы / Д. Рутковская, М. Пилиньский, Л. Рутковский// М.: Горячая линия. Телеком, 2006. – 452 с.

135. Lek, S. Artificial neural networks as a tool in ecological modelling, an introduction / S. Lek, J.F. Guegan // *Ecological Modelling.* – 1999. – V. 120. – P. 65-73.

136. Pappa, A. Forecasting particulate pollution in an urban area: From copernicus to sub-km scale / A. Pappa, I. Kioutsioukis // *Atmosphere*. – 2021. – V. 12. – №7. – 881 p. doi: 10.3390/atmos12070881.

137. Wu, Z. An ensemble LSTM-based AQI forecasting model with decomposition-reconstruction technique via CEEMDAN and fuzzy entropy / Z. Wu, W. Zhao, Ya. Lv // *Air Quality, Atmosphere and Health*. – 2022. – V. 15. – №12. – P. 2299-2311. doi: 10.1007/s11869-022-01252-6.

138. Chang, M. LSTM model for predicting the daily number of asthma patients in Seoul, South Korea, using meteorological and air pollution data / M. Chang, Yu. Ku // *Environmental Science and Pollution Research*. – 2023. – V. 30. – №13. – P. 37440-37448. doi: 10.1007/s11356-022-24956-9.

139. Wan, A. Dynamic pollution emission prediction method of a combined heat and power system based on the hybrid CNN-LSTM model and attention mechanism / A. Wan, J. Yang, T. Chen, Y. Jinxing, K. Li, Z. Qinglong // *Environmental Science and Pollution Research*. – 2022. – V. 29. – №46. – P. 69918-69931. doi: 10.1007/s11356-022-20718-9.

140. Huang, G. Large scale air pollution prediction with deep convolutional networks / G. Huang, Ch. Ge, T. Xiong, S. Song, L. Yang, B. Liu, W. Yin, C. Wu // *Science China Information Sciences*. – 2021. – V. 64. – №9. – P. 1-11. doi: 10.1007/s11432-020-2951-1.

141. Рощупкин, Э.В. Нейросетевая модель прогноза загрязнения атмосферного воздуха / Э.В. Рощупкин // *Известия ТулГУ. Технические науки*. – 2010. – В. 4. – Ч. 2. – С. 266-271.

142. Nallathambi, I. Prediction of influencing atmospheric conditions for explosion Avoidance in fireworks manufacturing Industry-A network approach / I. Nallathambi, R. Ramar, D.A. Pustokhin, I.V. Pustokhina, D.K. Sharma, S. Sengan // *Environmental Pollution*. – 2022. – V. 304. – P. 119182. doi: 10.1016/j.envpol.2022.119182.

143. Azmat, S. Monitoring Air Quality using the Neural Network based Control Chart / S. Azmat, Q. Ul. An. Sabir, S. Tariq, A. Shafqat, S.R. Gadde, M. Aslam // *Mapan*

- Journal of Metrology Society of India. – 2023. – V. 38. – №4. – P. 885-893. doi: 10.1007/s12647-023-00663-9.

144. Миндубаева, Г.Р. Применение искусственных нейронных сетей для прогнозирования последствий выброса газа на примере экспериментов «Prairie Grass». Часть 2 / Г.Р. Миндубаева, А.И. Купцов, Ф.М. Гимранов // Вестник Технологического университета. – 2020. – Т. 23. – №11. – С. 106-109.

145. Тунакова, Ю.А. Метод нейросетевого расчета концентраций приоритетных загрязняющих веществ в приземном слое атмосферного воздуха / Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, А.Р. Шагидуллин, В.С. Валиев // Экологические системы и приборы. – 2023. – №11. – С. 24-31.

146. Тунакова, Ю.А. Использование нейросетевых технологий для расчета концентраций примесей в атмосферном воздухе на территории действия полимерных производств (на примере г. Нижнекамска) / Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, А.Р. Шагидуллин, В.С. Валиев, О.Н. Кузнецова // Промышленное производство и использование эластомеров. – 2021. – №3. – С. 63-68.

147. Дель, И.В. Использование методов нейросетевого моделирования для прогнозирования качества атмосферного воздуха / И.В. Дель, А.В. Старченко // Вестник Томского государственного университета. Управление, вычислительная техника и информатика. – 2023. – № 65. – С. 15-24. doi: 10.17223/19988605/65/2.

148. Кулакова, Е.С. Разработка системы экологического мониторинга атмосферы с использованием возможностей нейронной сети / Е.С. Кулакова, А.М. Батыркаева // Электротехнические и информационные комплексы и системы. – 2024. – Т. 20. – №2. – С. 115-122. doi: 10.17122/1999-5458-2024-20-2-115-122.

149. Мальцев, В.В. Применение алгоритмов искусственного интеллекта для мониторинга загрязнения воздуха городским автотранспортом / В.В. Мальцев // Моделирование систем и процессов. – 2025. – №2. – С. 86-96. doi: 10.12737/2219-0767-2025-18-2-86-96.

150. Маслова, А.А. Применение искусственных нейронных сетей для прогнозирования уровней загрязнения воздуха и водных объектов / А.А. Маслова, В.М. Панарин, К.В. Гришаков, Н.А. Рыбка, Е.А. Котова, Д.А. Селезнева // Экология

и промышленность России. – 2019. – Т. 23. – №8. – С. 36-41. doi: 10.18412/1816-0395-2019-8-36-41.

151. Плужников, В.В. Идентификация постоянно действующих источников загрязнения химических производств с помощью самоорганизующихся карт / В.В. Плужников, С.П. Дударов // Успехи в химии и химической технологии. – 2009. – №1(94). – С. 16-20.

152. Киселева, О.В. Прогнозирование экологической ситуации при помощи нейронных сетей / О.В. Киселева, Е.А. Савельева, И.Г. Дадаева // Культура, наука, образование: проблемы и перспективы: Материалы IX Международной научно-практической конференции, Нижневартовск, 10 ноября 2021 г. / Отв. редактор Д.А. Погонишев. – Нижневартовск: Нижневартовский государственный университет. – 2021. – С. 508-518. doi: 10.36906/KSP-2021/73.

153. Леоненков, А. Нечеткое моделирование в среде MatLab и FuzzyTech / А. Леоненков // Санкт-Петербург, БХВ Петербург. – 2005. – 719 с.

154. Kohonen, T. Self-Organizing Maps / T. Kohonen // Springer – Verlag. – 2001. – V. 3. – 501 p.

155. Karul, C. Case studies on the use of neural networks in eutrophication modeling / C. Karul, S. Soypak, A.F. Cilesiz, E. Germen // Ecological modelling. – 2000. – №134. – P. 145-152

156. Круглов, В.В. Искусственные нейронные сети. Теория и практика / В.В. Круглов, В.В. Борисов // М.: Горячая линия. – Телеком. – 2002. – 382 с.

157. Осовский, С. Нейронные сети для обработки информации / С. Осовский // М.: Финансы и статистика. – 2002. – 344 с.

158. Zade, L.A. The concept of a linguistic variable and its application to approximate reasoning / L.A. Zade // Information Sciences. – 1975. – V. 8. – P. 43-80.

159. Звягин, Л.С. Математическое моделирование глобальных систем и прогнозирования ее основных объектов / Л.С. Звягин // Мягкие измерения и вычисления. – 2022. – Т. 60. – №11(1). – С. 41-52.

160. Прохоренков, П.А. Построение адаптивной модели системы нечеткого логического вывода с использованием рядов селекции / П.А. Прохоренков, Т.В.

Регер // Современные наукоемкие технологии. – 2023. – №12(1). – С. 75-80.

161. Castro, J.L. Fuzzy logic controllers are universal approximators / J.L. Castro // IEEE Trans. on SMC 25. – 1995. – P. 629-635.

162. Adam, G. Machine learning approaches to drug response prediction: challenges and recent progress / G. Adam, L. Rampasek, Z. Safikhani, P. Smirnov, B. Haibe-Kains, A. Goldenberg // Precision Oncology – 2020. – V. 4. – 19 p. doi: 10.1038/s41698-020-0122-1.

163. Akyildiz I.F. Wireless sensor networks: a survey / I.F. Akyildiz, W. Su, Y. Sankarasubramaniam, E. Cayirci // Comput Network. – 2002. – V. 38(4). – P. 393-422. doi: 10.1016/S1389-1286(01)00302-4.

164. Azid A. Feed-forward artificial neural network model for air pollutant index prediction in the southern region of Peninsular Malaysia / A. Azid, H. Juahir, M.T. Latif, S. Zain, R. Osman // Journal of Environmental Protection. – 2014. – №4(12). – P. 1-10.

165. Методическое пособие по расчету, нормированию и контролю выбросов загрязняющих веществ в атмосферный воздух (дополненное и переработанное) / СПб: НИИ Атмосфера, 2012. – 224 с.

166. Нурмехамитова, В.А. О реализации мер по охране атмосферного воздуха, обеспечивающих экологическое благополучие территорий / В.А. Нурмехамитова, Р.А. Шагидуллина, Ю.А. Тунакова, А.Р. Шагидуллин, Р.Р. Шагидуллин // Российский журнал прикладной экологии. – 2025. – №4. – С. 59-64.

167. Купцов, А.И. Методика расчета предельно допустимого выброса опасного газа со свечи рассеивания / А.И. Купцов, Ф.М. Гимранов // Вестник Казанского технологического университета. – 2017. – Т. 20. – №7. – С. 98-100.

168. Гайнуллина, Л.Р. Углеродный след энергетического сектора / Л.Р. Гайнуллина, А.Р. Фасыхов, НФ. Тимербаев, В. Р. Ибрагимова // Вестник РУДН. Серия: Экология и безопасность жизнедеятельности. – 2024. – №4. – С. 365-384.

169. Ермакова, М.С. Выбросы парниковых газов: раскладываем по полочкам / М. С. Ермакова // Экология производства. – 2021. – С. 98-105.

170. Умнов, В.А. Углеродный след как индикатор воздействия экономики на климатическую систему / В.А. Умнов, О.С. Коробова, А.А. Скрыбина // Вестник

РГГУ. Серия: Экономика. Управление. Право. – 2020. – №2. – С. 87-93.

171. Силаева, П.Ю. Особенности рассеивания выбросов диоксида азота предприятиями энергокомплекса и их влияние на население мегаполисов / П.Ю. Силаева, А.В. Силаев // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Экология и безопасность жизнедеятельности. – 2018. – Т. 26. – №1. – С. 63-72.

172. Плотникова, И.Н. Актуальные вопросы декарбонизации / И.Н. Плотникова, С.А. Володин, Ю.Ю. Кочнева, А.Р. Салыхова. – Казань: Академия наук Республики Татарстан. – 2021. – Т. 1. – 56 с.

173. Horandner, L. Measurement Techniques, Calculation Methods, and Reduction Measures for Greenhouse Gas Emissions in Inland Navigation - A Preliminary Study / L. Horandner, B. Duldner-Borca, D. Beil, L.-M. Putz-Egger // Sustainability. – 2024. – 16:3007. doi: 10.3390/su16073007.

174. Балашов, Н.А. Углеродный след: как государства и компании пытаются его уменьшить / Н.А. Балашов, Д.Ф. Годван // Бизнес-образование в экономике знаний. – 2020. – №3. – С. 17-19.

175. Локтионов, О.А. Климатическая уязвимость техносферы города / О.А. Локтионов, М.И. Постельник, Ю.Ф. Тихоненко // Энергия: экономика, техника, экология. – 2020. – №2. – С. 11-16.

176. Esteve-Llorens, X. Could the economic crisis explain the reduction in the carbon footprint of food? Evidence from Spain in the last decade / X. Esteve-Llorens, M. T. Moreira, G. Feijoo, S. Gonzalez-Garcia // Science of the Total Environment. – 2020. – №755. doi: 10.1016/j.scitotenv.2020.142680.

177. Приказ Минприроды России от 27.05.2022 № 371 «Об утверждении методик количественного определения объемов выбросов парниковых газов и поглощений парниковых газов».

178. Орехов, Д.И. Бенчмаркинг удельных выбросов парниковых газов / Д.И. Орехов // Справочник эколога. – 2023. – №1. – С. 112-116.

179. Орехов, Д.И. Методика оценки снижения углеродного следа / Орехов Д.И. // Справочник эколога. – 2023. – №3. – С. 63-69.

180. ГОСТ Р 57262-2016. Экологический менеджмент. Расчет и декларирование энергопотребления и выбросов парниковых газов при предоставлении транспортных услуг. – Введ. 2017–12–01. – Москва: Стандартинформ, 2017. – 39 с.

181. Орехов, Д.И. Методики расчета выбросов и поглощения парниковых газов / Д.И. Орехов // Справочник эколога. – 2023. – №2. – С. 84.

182. Сорокина, Д.Д. Сравнительный анализ и оценка методик расчета поглощения парниковых газов лесными экосистемами, применяемых в Российской Федерации / Д.Д. Сорокина, А.В. Птичников, А.А. Романовская // Известия РАН. Серия географическая. – 2023. – Т. 87. – №4. – С. 497-511.

183. Pachauri, R.K. Climate Change 2014: Synthesis Report. Contribution of Working Groups I, II and III to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change / R.K. Pachauri, L.A. Meyer // IPCC, Geneva, Switzerland. – 2015. – 151 p.

184. Нурмехамитова, В.А. Применение нейросетевых моделей для расчета парникового газа диоксида углерода на территории г. Казань и г. Нижнекамск / В.А. Нурмехамитова, Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, А.Р. Шагидуллин, Р.А. Шагидуллина // Химия и инженерная экология - XXIV : Сборник трудов международной научной конференции (школа молодых ученых), посвященной Году научно-технологического развития в Республике Татарстан, Казань, 27-28 сентября 2024 г. – Казань: ИП Сагиев А.Р., 2024. – С. 209-212.

185. Нечаев, Ю.И. Нейронечеткое моделирование активных динамических систем / Ю.И. Нечаев // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. – 2018. – № 1. – С. 3-12.

186. Григорьева, И.Г. Оценка коэффициента трансформации оксидов азота в приземном слое атмосферы Нижнекамского промышленного узла / И.Г. Григорьева, Ю.А. Тунакова, В.С. Валиев, А.К. Александрова, О.Н. Кузнецова // Вестник Казанского технологического университета. – 2015. – №19. – С. 242-244.

187. Нурмехамитова, В.А. Выбор предикторов нейросетевых моделей для расчета парникового газа диоксида углерода / В.А. Нурмехамитова, Ю.А.

Тунакова, С.В. Новикова, Р.А. Шагидуллина // Наследие В.И. Вернадского и современные проблемы экологии. – 2024. – № 1. – С. 70-77.

188. Валиев, В.С. Оценка адекватности выбора предиктора гамма фона для моделирования рассеивания компонентов выбросов стационарных источников загрязнения на территории г. Казани / В.С. Валиев, А.Р. Шагидуллин, В.А. Нурмехамитова, Ю.А. Тунакова // Химия и инженерная экология - XXIII: Сборник трудов международной научной конференции (школа молодых ученых), посвященной сотрудничеству с союзными государствами, Казань, 25-26 сентября 2023 г. – Казань: ИП Сагиев А.Р., 2023. – С. 191-193.

189. Новикова С.В. Оценка адекватности выбора предикторов нейросетевых моделей для расчета концентраций примесей на территории г. Казани / С.В. Новикова, А.Р. Шагидуллин, В.А. Нурмехамитова, Ю.А. Тунакова // Химия и инженерная экология – XXIII. Сборник трудов международной научной конференции (школа молодых ученых), посвященной сотрудничеству с Союзными государствами (г. Казань, 25 – 26 сентября 2023 г.,). – Казань: ИП Сагиев А.Р., 2023. – С. 194-197.

190. Тунакова, Ю.А. Нейросетевой расчет концентраций диоксида углерода / Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, А.Р. Шагидуллин, В.С. Валиев // Южно-Сибирский научный вестник. – 2021. – №6. – С. 18-23.

191. Тунакова, Ю.А. Нейросетевой алгоритм и гибридная модель для расчета концентраций парникового газа диоксида углерода / Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, А.Р. Шагидуллин, В.С. Валиев // Системы контроля окружающей среды. – 2023. – В. 3. – С. 133-140. doi: 10.33075/2220-5861-2023-3-133-140.

192. Тунакова, Ю.А. Способ нейросетевого расчета концентраций парникового газа диоксида углерода на территории воздействия выбросов предприятия химической промышленности / Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, Р.А. Шагидуллина, А.Р. Шагидуллин, В.А. Нурмехамитова // Актуальные вопросы обеспечения комплексной безопасности: Материалы национальной научно-практической конференции с международным участием, посвященной 375-летию Пожарной охраны России и 300-летию Российской Академии Наук, Оренбург, 24 мая

2024 г. – Оренбург: ООО «Типография «Агентство «Пресса», 2024. – С. 933-937.

193. Khalid, S. Khanoranga Phytomonitoring of air pollution around brick kilns in Balochistan province Pakistan through air pollution index and metal accumulation index / S. Khalid // *Journal of Cleaner Production*. – 2019. – V. 229. – P. 727-738. doi: 10.1016/j.jclepro.2019.05.050.

194. Mishra, D. Development of artificial intelligence based NO<sub>2</sub> forecasting models at Taj Mahal, Agra / D. Mishra, P. Goyal // *Atmospheric Pollution Research*. – 2015. – V. 6(1). – P. 99-106. doi:10.5094/APR.2015.012.

195. Пискарев, И.М. Инициирование и исследование свободно-радикальных процессов в биологических экспериментах: монография/ И.М. Пискарев, И.П. Иванова, А.Г. Самоделкин, М.Н. Иващенко // Н. Новгород: ФГБОУ ВО Нижегородская ГСХА. – 2016. – 140 с.

196. Lebedyte, M. Variations of the ambient dose equivalent rate in the ground level air / M. Lebedyte, D. Butkus, G. Morkūnas // *Journal of Environmental Radioactivity*. – V. 64(1). – P. 45-57.

197. Datar, G. Response of Gamma-Ray Spectrum During Ockhi Cyclone / G. Datar, G. Vichare, A. Raghav, A. Bhaskar, A.K. Sinha, K. U. Nair // *Frontiers in Earth Science*. – 2020. – V. 8. – №15. – P. 1-12.

198. Яковлев, Е.Ю. Влияние короткоживущих радиоактивных изотопов на изменение гамма-фона во время осадков на европейском севере России / Е.Ю. Яковлев, С.В. Дружинин, В. М. Быков // *Успехи современного естествознания*. – 2017. – №6. – С. 123-129.

199. Fujinami, N. Looping variation of correlation between radon progeny concentration and dose rate in outdoor air / N. Fujinami, T. Watanabe, T. Tsutsui // *Radioactivity in the Environment*. – 2005. – V. 7. – P. 284-289.

200. Mercier, J. Increased environmental gamma-ray dose rate during precipitation: a strong correlation with contributing air mass / J. Mercier, B. Tracy, R. d'Amours, F Chagnon, I Hoffman, E.P Korpach, S. Johnson, R.K Ungar. // *Journal of Environmental Radioactivity*. – 2009. – V. 100(7). – P. 527-533.

201. Болтнева, Л. И. Временные вариации гамма-поля / Л.И. Болтнева, И. М.

Назаров, В. П. Чирков // Радиоактивность атмосферы и поверхности земли. Труды Института экспериментальной метеорологии. – 1971. – с. 14.

202. Burnett, J.L. Short-lived variations in the background gamma-radiation dose / J.L. Burnett, I.W. Croudace, P.E. Warwick // Journal of radiological protection: official journal of the Society for Radiological Protection. – 2010. – V. 30(3) – P. 525-533.

203. Мусина, А.А. Динамика уровней загрязнения атмосферного воздуха Г. Казань по данным автоматизированных станций мониторинга / А.А. Мусина, А.Р. Шагидуллин, В.А. Габдрахимова // Химия и инженерная экология - XXII : Сборник трудов международной научной конференции (школа молодых ученых), посвященной 90-летию кафедры общей химии и экологии Казанского национального исследовательского технического университета им. А.Н. Туполева - КАИ, Казань, 23–24 сентября 2022 г. – Казань: ИП Сагиев А.Р., 2022. – С. 239-242.

204. Ибрагимова, А.А. Оценка качества атмосферного воздуха на основе сводной базы данных параметров выбросов г. Казани / А.А. Ибрагимова, А.Р. Шагидуллин, В.А. Габдрахимова, Р.Р. Шагидуллин // Инновационные технологии защиты окружающей среды в современном мире: материалы Всероссийской научной конференции с международным участием (Казань, 18–19 марта 2021 г.). – Казань. – 2021. – С. 593-599.

205. Мусина, А.А. Оценка комплексного индекса загрязнения атмосферного воздуха г. Нижнекамск по данным автоматизированных станций мониторинга / А.А. Мусина, А.Р. Шагидуллин, В.А. Нурмехамитова, А.Ф. Гилязова // Системы контроля окружающей среды – 2023 / Тезисы докладов Международной научно-практической конференции (г. Севастополь, 7 – 10 ноября 2023 г.). – Севастополь: ИП Куликов А.С., 2023. С. 102.

206. Габдрахимова, В.А. Оценка локальных условий самоочищения атмосферного воздуха в г. Казань / В.А. Габдрахимова, А.Р. Шагидуллин // Сборник материалов Международной молодежной научной конференции «XXV Туполевские чтения (школа молодых ученых)» (г.Казань, 10-11 ноября 2021 г.). – Казань: Изд-во ИП Сагиева А.Р., 2021. – С. 328-331.

207. Габдрахимова, В.А. Оценка комплексными метеорологическими

показателями рассеивающей способности атмосферы / В.А. Габдрахимова, А.Р. Шагидуллин // Материалы Международного молодежного научного форума «Ломоносов-2022». – М.: МАКС Пресс. – 2022. [Электронный ресурс] Режим доступа: [https://confhub.ru/archive/Lomonosov\\_2022/data/25897/142348\\_uid684234\\_report.pdf](https://confhub.ru/archive/Lomonosov_2022/data/25897/142348_uid684234_report.pdf).

208. Габдрахимова, В. А. Метеорологический потенциал самоочищения атмосферного воздуха в Г.Казань / В. А. Габдрахимова, А. Р. Шагидуллин, А. А. Мусина // Химия и инженерная экология - XXII : Сборник трудов международной научной конференции (школа молодых ученых), посвященной 90-летию кафедры общей химии и экологии Казанского национального исследовательского технического университета им. А.Н. Туполева - КАИ, Казань, 23–24 сентября 2022 года. – Казань: ИП Сагиев А.Р., 2022. – С. 205-209.

209. Нурмехамитова, В.А. Методы оценки рассеивающей способности атмосферы на примере г.Казань / В.А. Нурмехамитова, А.Р. Шагидуллин, А.А. Мусина, А.Ф. Гилязова // Безопасность, защита и охрана окружающей природной среды: фундаментальные и прикладные исследования: сб. докл. Всеросс. научн. конф (г. Белгород, 23-27 октября 2023 г.) . – Белгород: Изд-во БГТУ, 2023. – С.42-45.

210. Погода в Казани-Опорной [Электронный ресурс] // Погода в 241 странах мира. – Режим доступа: [https://rp5.ru/Погода\\_в\\_Казани-Опорной](https://rp5.ru/Погода_в_Казани-Опорной).

211. Приказ Минприроды России от 06.06.2017 № 273 «Об утверждении методов расчетов рассеивания выбросов вредных (загрязняющих) веществ в атмосферном воздухе».

212. Завитаев, К.В. Сравнительный анализ модели Гаусса и программного продукта УПРЗА «Эколог», применяемых для расчета рассеивания загрязняющих веществ / К.В. Завитаев, О.В. Ягольницер // Производство. Технология. Экология: сборник трудов. – М.: СТАНКИН, 2022. – С. 177-181.

213. Rumelhart, D.E. Learning representations by back-propagating errors / Rumelhart, D.E., G.E. Hinton, R.J. Williams // Nature. – 1986. – V. 323. – P. 533-536. doi: 10.1038/323533a0.

214. Нурмехамитова, В.А. Анализ динамики и определяющих факторов формирования уровней загрязнения атмосферного воздуха промышленного города

Казань / В.А. Нурмехамитова, А.Р. Шагидуллин, Р.А. Шагидуллина, Р.Р. Шагидуллин, Ю.А. Тунакова // Российский журнал прикладной экологии. – 2026. – №1. – С.80-87.

215. Шагидуллин, А.Р. Динамика уровней загрязнения атмосферного воздуха г.Нижнекамск по данным автоматизированных станций мониторинга / А.Р. Шагидуллин, А.А. Мусина, В.А. Габдрахимова // Химия и инженерная экология - XXI: сборник трудов международной научной конференции (г. Казань, 28-30 сентября 2021 г.). – Казань: Изд-во ИП Сагиева А.Р., 2021. – С. 199-203.

216. Мусина, А.А. Динамика изменения уровня загрязнения атмосферного воздуха г. Нижнекамск по данным автоматизированных станций мониторинга / А.А. Мусина, А.Р. Шагидуллин, В.А. Нурмехамитова, А.Ф. Гилязова, Р.А. Шагидуллина // Химия и инженерная экология – XXIII / Сборник трудов международной научной конференции (школа молодых ученых), посвященной сотрудничеству с Союзными государствами (г. Казань, 25 – 26 сентября 2023 г.). – Казань: ИП Сагиев А.Р., 2023. – С. 180-183.

217. Селегей, Т.С. Потенциал рассеивающей способности атмосферы / Т.С. Селегей, И.П. Юрченко // География и природные ресурсы. – 1990. – №2. – С. 132-137.

218. Отчет о научно-исследовательской работе по теме 1.4.3.15 «Разработать усовершенствованный комплексный метеорологический показатель рассеивающей способности атмосферы (на примере территории Западной Сибири) (заключительный). – С Новосибирск: ФБГУ «СибНИГМИ», 2014. – 132 с.

219. Шагидуллин, А.Р. Динамика уровней загрязнения основными газовыми примесями и показателей рассеивающей способности атмосферного воздуха в г. Казани / А.Р. Шагидуллин // Системы контроля окружающей среды. – 2022. – №2. – С. 84-91. doi: 10.33075/2220-5861-2022-2-84-91.

220. Погода в Казани-Опорной [Электронный ресурс] // Погода в 241 странах мира. – Режим доступа: [https://rp5.ru/Погода\\_в\\_Казани-Опорной](https://rp5.ru/Погода_в_Казани-Опорной).

221. Переведенцев, Ю.П. Характеристики климата Казани и состояние окружающей среды / Ю.П. Переведенцев, Р.Х. Салахова, Н.В. Исмагилов, Э.П. Наумов, К. М. Шанталинский, Ф. В. Гоголь // Проблемы анализа риска. – 2007. –

Т. 4. – №2. – С. 152-164.

222. Шамсияров, Н.Н. Природно-климатические условия и состояние атмосферного воздуха в городе Казани [Электронный ресурс] / Н.Н. Шамсияров, А.Н. Галиуллин, М.И. Тимерзянов, Е. А. Тафеева // Современные проблемы науки и образовани. – 2014. – №5. – Режим доступа: <https://science-education.ru/ru/article/view?id=15182>.

223. Степанова, Н.В. Оценка влияния и риск для здоровья населения от загрязнения атмосферного воздуха выбросами автотранспорта / Н.В. Степанова, Н.В. Святова, И.Х. Сабирова, А.В. Косов // Фундаментальные исследования. – 2014. – №10(6). – С. 1185-1190.

224. Вышкваркова, Е.В. Оценка будущих изменений совместных экстремумов температуры воздуха и атмосферных осадков в XXI веке для Севастопольского региона / Е.В. Вышкваркова, О.Ю. Сухонос, Е.Н. Воскресенская // Системы контроля окружающей среды. – 2022. – В. 2(48). – С. 5-11. doi: 10.33075/2220-5861-2022-2-5-11.

225. Шагидуллин, А.Р. Характеристики ветрового режима г.Казань для оценки рассеивающей способности атмосферы / А.Р. Шагидуллин, А.А. Мусина, В.А. Габдрахимова // Химия и инженерная экология - XXI: сборник трудов международной научной конференции (г. Казань, 28-30 сентября 2021 г.). – Казань: Изд-во ИП Сагиева А.Р., 2021. – С. 195-199.

226. Габдрахимова, В.А. Оценка распределения ветрового потока в г. Нижнекамск / В.А. Габдрахимова, А.А. Мусина, А.Р. Шагидуллин // Актуальные научные исследования: сборник статей VIII Международной научно-практической конференции. – Пенза: МЦНС «Наука и Просвещение», 2022. – С. 31-33.

227. Мусина, А.А. Оценка ветрового потока по данным метеостанций в составе АСКЗА на территории г.Казань / А.А. Мусина, А.Ф. Гилязова, В.А. Нурмехамитова, А.Р. Шагидуллин // Безопасность, защита и охрана окружающей природной среды: фундаментальные и прикладные исследования: сб. докл. Всеросс. научн. конф (г. Белгород, 23-27 октября 2023 г.). – Белгород: Изд-во БГТУ, 2023. – С. 96-101.

228. Шагидуллин, А.Р. Динамика загрязнения атмосферного воздуха промышленного города Казань по данным инструментальных измерений / А.Р. Шагидуллин, В.А. Нурмехамитова, Р.А. Шагидуллина, Ю.А. Тунакова, Р.Р. Шагидуллин // Химия и инженерная экология – XXV / Международной научной конференции (школа молодых ученых) (г.Казань, 25–26 сентября 2025 г.) – Казань: ИП Сагиев А.Р., 2025. – С. 262-265.

229. Шагидуллин, А.Р. Факторы формирования повышенных уровней загрязнения атмосферного воздуха г.Казань / А.Р. Шагидуллин, В.А. Нурмехамитова, Р.А. Шагидуллина, Ю.А. Тунакова, Р.Р. Шагидуллин // Химия и инженерная экология – XXV / Сборник трудов международной научной конференции (школа молодых ученых), посвященной научному сотрудничеству России и дружественных стран, а также деятельности Академического союза «Зеленого» развития Ассоциации технических университетов России и Китая (г.Казань, 25–26 сентября 2025 г.). – Казань: ИП Сагиев А.Р., 2025. – С. 266-270.

230. ГОСТ Р ИСО 14001-2016. Системы экологического менеджмента. Требования и руководство по применению. – Введ. 2017–03–01. – Москва: Стандартинформ, 2016. – 36 с.

231. Об осуществлении государственного мониторинга состояния и загрязнения окружающей среды: Постановление Правительства РФ от 06.06.2013 № 477 (ред. от 02.10.2024) // Собрание законодательства РФ. – 2013. – №24.

232. Приказ Минприроды России от 30.07.2020 № 524 «Об утверждении требований к проведению наблюдений за состоянием окружающей среды, ее загрязнением».

233. Нурмехамитова, В.А. Определение условий для осуществления наблюдений за загрязнением атмосферного воздуха в рамках контрольных мероприятий на основе использования искусственных нейронных сетей / В.А. Нурмехамитова, Р.А. Шагидуллина, А.Р. Шагидуллин, Ю.А. Тунакова // Естественные и технические науки. – 2026. – № 9 (220). – С. 76-79.

234. Шагидуллин, А.Р. Характерные особенности изменения концентраций основных газовых примесей в течение суток по данным мониторинга загрязнения

воздуха в г.Казань / А.Р. Шагидуллин, Р.А. Шагидуллина, А.А. Мусина, В.А. Нурмехамитова, А.Ф. Гилязова // Химия и инженерная экология – XXIII / Сборник трудов международной научной конференции (школа молодых ученых), посвященной сотрудничеству с Союзными государствами (г. Казань, 25 – 26 сентября 2023 г.,). – Казань: ИП Сагиев А.Р., 2023. – С. 184-187.

235. Нурмехамитова, В.А. Нейросетевая модель для расчета приземных концентраций оксидов азота в атмосферном воздухе и анализа комплекса обуславливающих факторов / В.А. Нурмехамитова, А.Р. Шагидуллин, Р.А. Шагидуллина, Ю.А. Тунакова // Естественные и технические науки. – 2026. – № 9 (220). – С. 80-83.

236. Choi, S.-M. Air Quality. Prediction Affected by Different Activation Functions and Hidden Layer Nodes in Artificial Neural Network Models / S.-M. Choi // Applied Sciences. – 2025. – V. 15. – P. 1-17. doi: 10.3390/app152412863.

237. Приказ Минприроды России от 19.11.2021 № 871 «Об утверждении порядка проведения инвентаризации стационарных источников и выбросов загрязняющих веществ в атмосферный воздух, корректировки ее данных, документирования и хранения данных, полученных в результате проведения таких инвентаризации и корректировки.

238. Приказ Минприроды России от 28.11.2019 № 811 «Об утверждении требований к мероприятиям по уменьшению выбросов загрязняющих веществ в атмосферный воздух в периоды неблагоприятных метеорологических условий».

239. Шагидуллина, Р.А. Цифровые технологии на основе сводных расчетов загрязнения атмосферы как эффективный механизм управления качеством воздуха/ Р.А. Шагидуллина, А.Р. Шагидуллин // Международный форум KazanDigital Week-2023. Сборник материалов Международного форума, Казань, 20-22 сентября 2023г. – Казань: Изд-во ГБУ «НЦБЖД», 2023. – С. 268-273.

240. О промышленной безопасности опасных производственных объектов: Федеральный закон от 21.07.1997 № 116-ФЗ (ред. от 08.08.2024) // Собрание законодательства РФ. – 1997. – №30.

241. Шагидуллин, А.Р. Оценка корректности установления нормативов выбросов вредных веществ стационарными источниками в г. Казань / А.Р. Шагидуллин, А.Р. Магдеева, В.А. Габдрахимова, Р.А. Шагидуллина, Р.Р. Шагидуллин // Сборник трудов Международной научной конференции (школа молодых ученых) «Химия и инженерная экология – XIX» (Казань, 26-28 сентября 2019 г.). – Казань: Изд-во ИП Сагиева А.Р., 2019. – С. 288-292.

242. Об утверждении Климатической доктрины Российской Федерации: Указ Президента РФ от 26.10.2023 №812 // Собрание законодательства РФ. – 2023. – № 44.

243. Об утверждении Концепции формирования системы мониторинга, отчетности и проверки объема выбросов парниковых газов в РФ: Распоряжение Правительства РФ от 22.04.2015 № 716-р (ред. от 30.04.2018) // Собрание законодательства РФ. – 2015. – №18.

244. О внесении изменений в Концепцию формирования системы мониторинга, отчетности и проверки объема выбросов парниковых газов в РФ: Распоряжение Правительства РФ от 30.04.2018 №842-р // Собрание законодательства РФ. – 2018. – №19.

245. Об ограничении выбросов парниковых газов: Федеральный закон от 02.07.2021 № 296-ФЗ (ред. от 25.12.2023) // Собрание законодательства РФ. – 2021. – №27 (ч. II).

246. ГОСТ Р ИСО 14064-1-2021. Газы парниковые. Часть 1. Требования и руководство по количественному определению и отчетности о выбросах и поглощении парниковых газов на уровне организации. – Введ. 2022–01–01. – Москва: ФГБУ «РСТ», 2021. – 50 с.

247. ГОСТ Р ИСО 14067-2021. Газы парниковые. Углеродный след продукции. Требования и руководящие указания по количественному определению. – Введ. 2022–01–01. – Москва: ФГБУ «РСТ», 2021. – 50 с.

248. О Стратегии национальной безопасности Российской Федерации: Указ Президента РФ от 02.07.2021 № 400 // Собрание законодательства РФ. – 2021. – №27 (ч. II).

249. Тунакова, Ю.А. Способ расчета концентраций парникового газа диоксида углерода, поступающего в атмосферный воздух с выбросами предприятий химической промышленности / Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, Р.А. Шагидуллина, А.Р. Шагидуллин, В.А. Нурмехамитова // Российский журнал прикладной экологии. – 2024. – №3. – С. 62-67.

250. Нурмехамитова, В.А. Нейросетевые технологии в анализе парниковых газов на примере диоксида углерода / В.А. Нурмехамитова, Ю.А. Тунакова, Р.А. Шагидуллина, А.Р. Шагидуллин // Защита окружающей среды от экотоксикантов: международный опыт и российская практика / Материалы VII международной научно-технической конференции (г. Уфа, 24 апреля 2025 г.). – Уфа УНПЦ «Издательство УГНТУ», 2025. – С. 81-82.

251. Нурмехамитова, В.А. Использование нейронных сетей для оценки приземных концентраций диоксида углерода / В.А. Нурмехамитова, Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, Р.А. Шагидуллина, А.Р. Шагидуллин // Актуальные вопросы обеспечения комплексной безопасности / Материалы национальной научно-практической конференции с международным участием, посвященной 35-летию МЧС России и 95-летию Оренбургского ГАУ (г. Оренбург, 23 мая 2025 г.). – Оренбург: ФГБОУ ВО ОГАУ, 2025. – Часть 2. – С. 370-374.

252. Нурмехамитова, В.А. Нейросетевое моделирование концентраций диоксида углерода как основа для разработки технологий сокращения выбросов / В.А. Нурмехамитова, Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, Р.А. Шагидуллина, А.Р. Шагидуллин // Декарбонизация энергетического сектора. Сокращение выбросов парниковых газов / Сборник материалов: Международный семинар экспертов по экологическим аспектам развития энергетики (Республика Беларусь, г. Минск, 15 – 16 октября 2025 г.). – М.: Мир науки, 2025. – С. 30-34.

253. Тунакова, Ю.А. Способ определения концентраций парникового газа диоксида углерода в зоне влияния предприятия органического синтеза / Ю.А. Тунакова, С.В. Новикова, Р.А. Шагидуллина, В.А. Нурмехамитова, А.Р. Шагидуллин // Рациональное использование природных ресурсов и переработка техногенного сырья: фундаментальные проблемы науки, материаловедение, химия

и биотехнология / Сборник докладов Международной научной конференции (г. Белгород, 2 - 6 июня 2025 г.). – Белгород: Изд-во БГТУ, 2025. – С. 97-101.

## Приложение А

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



## СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2026681973

**Программа нейросетевого прогноза приземных  
концентраций диоксида углерода с учетом вторичных  
химических реакций в атмосфере**

Правообладатель: *Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования «Казанский  
национальный исследовательский технический университет им.  
А.Н. Туполева-КАИ» (RU)*

Авторы: *Новикова Светлана Владимировна (RU), Тунакова Юлия  
Алексеевна (RU), Шагидуллина Раиса Абдулловна (RU),  
Шагидуллин Артур Рифгатович (RU), Нурмехамитова  
Виолетта Алмазовна (RU)*

Заявка № 2026681771

Дата поступления 17 июля 2026 г.

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ 17 июля 2026 г.



Руководитель Федеральной службы  
по интеллектуальной собственности

Документ подписан электронной подписью  
Сертификат 55a179a177, 4-3175114a331bc7523956  
Подписан: **Зубов Юрий Сергеевич**  
Действителен с 04.07.2025 по 26.11.2026

Ю.С. Зубов

## Приложение Б

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



## СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2026681970

**Программа прогнозирования концентрации диоксида азота на основе гибридной модели кластеризации K-Means и многослойного персептрона (Hybrid NO Prediction) при увеличении мощности эмиссий в атмосферный воздух**

Правообладатель: *Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ» (RU)*

Авторы: *Новикова Светлана Владимировна (RU), Тунакова Юлия Алексеевна (RU), Шагидуллина Раиса Абдулловна (RU), Шагидуллин Артур Рифгатович (RU), Нурмехамитова Виолетта Алмазовна (RU)*



Заявка № 2026681769

Дата поступления 17 июля 2026 г.

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ 17 июля 2026 г.

Руководитель Федеральной службы  
по интеллектуальной собственности

Документ подписан электронной подписью  
Сертификат 00a570e474-0053164b8818e7529506  
Владелец **Зубов Юрий Сергеевич**  
Действителен с 04.09.2025 по 28.11.2026

Ю.С. Зубов

## Приложение В

МИНИСТЕРСТВО ЭКОЛОГИИ  
И ПРИРОДНЫХ РЕСУРСОВ  
РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН

Павлюхина ул., 75, г. Казань, 420049



ТАТАРСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ  
ЭКОЛОГИЯ ҺӘМ ТАБИГый  
БАЙЛИКЛАР МИНИСТРЛЫГЫ

Павлюхин ур., 75, Казан шәһәре, 420049

Тел.: (843) 267-68-01, факс: (843) 267-68-70, e-mail: eco@tatar.ru, http://eco.tatarstan.ru

17.08.2016 № 14926/06

На № \_\_\_\_\_

Справка о передаче результатов диссертационной работы  
Нурмехамитовой В.А. и использовании их для обеспечения экологического  
благополучия территорий

Результаты диссертационного исследования Нурмехамитовой В.А. по теме, касающейся вопросов совершенствования системы экологического мониторинга химического загрязнения атмосферного воздуха урбозкосистемы с применением хеометрики, переданы в Министерство экологии и природных ресурсов Республики Татарстан для использования их в практической деятельности министерства.

Результаты диссертационного исследования Нурмехамитовой В.А., касающиеся оценки уровня загрязненности приземного слоя атмосферного воздуха и выделения факторов, приводящих к повышению приземных концентраций загрязняющих веществ на городской территории; методики формирования программы проведения экологического мониторинга химического загрязнения атмосферного воздуха в рамках производственного экологического контроля; методики нейросетевого прогноза среднесуточных концентраций оксидов азота при неблагоприятных метеорологических условиях; вопросов идентификации и учета залповых выбросов загрязняющих веществ для обеспечения необходимого качества атмосферного воздуха; методики расчета концентраций углекислого газа с использованием нейросетевого моделирования имеют большую практическую значимость для эффективного проведения экологического мониторинга химического загрязнения атмосферного воздуха и обеспечения экологического благополучия территорий в целом.

Заместитель министра

О.В. Манидичева

## Приложение Г

Утверждаю  
И.о. Проректора по образовательной деятельности  
и молодежной политике  
КНИТУ-КАИ  
Хамматова В.В.  
« 26 » августа 2026 г.



## АКТ

о внедрении результатов диссертационной работы  
Нурмехамитовой Виолетты Алмазовны на тему:

**«СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА  
ХИМИЧЕСКОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА  
УРБОЭКОСИСТЕМЫ С ПРИМЕНЕНИЕМ ХЕМОМЕТРИКИ»  
в образовательный процесс КНИТУ-КАИ**

Настоящий акт подтверждает, что результаты диссертационной работы Нурмехамитовой В.А. внедрены в образовательный процесс КНИТУ-КАИ в части учебно-методического обеспечения дисциплин «Экологический мониторинг и производственный экологический контроль», «Управление экологической безопасностью территорий» для аудиторной и самостоятельной работы обучающихся по программам бакалавриата и магистратуры по направлению подготовки «Техносферная безопасность». Нурмехамитовой В.А. разработаны и используются в образовательном процессе следующие методики:

1. Методика оценки уровня загрязненности приземного слоя атмосферного воздуха и выделения факторов, приводящих к повышению приземных концентраций компонентов выбросов на территории урбоэкосистемы.
2. Методика формирования программы производственного экологического контроля качества атмосферного воздуха.
3. Методика нейросетевого прогноза среднесуточных концентраций оксидов азота при наиболее неблагоприятных метеорологических условиях.

4. Методика идентификации и учета залповых выбросов для снижения химического загрязнения атмосферного воздуха.

5. Методика оперативного прогноза концентраций диоксида азота на основе кластеризации данных совместно с применением искусственных нейронных сетей, при увеличении мощности эмиссий в атмосферный воздух.

6. Методика расчета концентраций парникового газа диоксида углерода с использованием нейросетевого каскадного моделирования.

Заведующая кафедрой ОХиЭ



Ю.А. Тунакова

Начальник Учебно-методического управления



О.В. Ильина

## Приложение Д

АКАДЕМИЯ НАУК  
РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАНТАТАРСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ  
ФӘННӘР АКАДЕМИЯСЕ

420111, Казань, ул. Баумана, 20

420111, Казань, Бауман ур., 20

Тел.(факс): (843) 292-02-72, e-mail: anrt@antat.ru, anrt@rambler.ru, www.antat.ru  
ОКПО 27889993, ОГРН 1021602836441, ИНН/КПП 1654008987/16550100131.08.2026 № 25-2923

На № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ АКТ

о внедрении результатов диссертационной работы  
В.А. Нурмехамитовой по теме «Совершенствование экологического  
мониторинга химического загрязнения атмосферного воздуха  
урбоэкосистемы с применением хеометрики»

Результаты, полученные при выполнении диссертационного исследования Виолетты Алмазовны Нурмехамитовой «Совершенствование экологического мониторинга химического загрязнения атмосферного воздуха урбоэкосистемы с применением хеометрики» использованы при выполнении государственных заданий на 2019-2026 гг. для государственного научного бюджетного учреждения «Академия наук Республики Татарстан» по теме: «Научно-методическое обеспечение исследования антропогенных факторов формирования качества атмосферного воздуха промышленных городов Республики Татарстан».

Подготовлены и направлены в органы исполнительной власти:

- Рекомендации по развитию территориальной системы наблюдений за загрязнением окружающей среды (направлены в Министерство экологии и природных ресурсов Республики Татарстан (далее – МЭПР РТ), исх. № 406/01 от 09.12.2019 г., вх. № 24386 от 09.12.2019 г.).
- Отчет об исследовании антропогенных факторов формирования качества атмосферного воздуха г. Нижнекамск (направлен в МЭПР РТ, исх. № 400/01 от 05.12.2019 г., вх. № 24152 от 05.12.2019 г.).
- Рекомендации по развитию системы сводных расчетов загрязнения атмосферного воздуха (направлены в МЭПР РТ, исх. № 393/01 от 03.12.2019 г., вх. № 23925 от 03.12.2019 г.).
- Рекомендации по организации снижения негативного воздействия на атмосферный воздух (направлены в МЭПР РТ, исх. № 408/01 от 10.12.2019 г., вх. № 24499 от 10.12.2019 г.).
- Отчет об исследовании антропогенных факторов формирования качества атмосферного воздуха г. Казань (направлен в Управление Роспотребнадзора по Республике Татарстан, исх. № 396/01 от 09.12.2020 г., вх. № 57192 от 09.12.2020 г.).
- Предложения по повышению эффективности работ по улучшению качества атмосферного воздуха в г. Казани в соответствии с «Дорожной

картой» по взаимодействию заинтересованных ведомств, научных организаций и предприятий для решения проблемы загрязнения атмосферного воздуха в северной зоне г. Казани (исх. МЭПР РТ от 27.12.2023 № 22484/06) подготовлены и направлены в МЭПР РТ (исх. 03/01 от 15.01.2024, вх. от 15.01.2024 № 799).

Предложения по реализации мероприятий, направленных на снижение загрязнения атмосферного воздуха выбросами от автотранспорта в г. Казани направлены в МЭПР РТ (исх. № 82/01 от 16.05.2024) в соответствии с запросом данного министерства (исх. № 6647/10 от 23.04.2024).

Заключение по материалам проекта Программы производственного экологического контроля по основной промышленной площадке ПАО «Казаньоргсинтез», подготовленное во исполнение п. 2.3 протокола расширенного заседания межведомственной рабочей группы по вопросам обеспечения качества атмосферного воздуха в г. Казани с участием членов Научно-технического совета МЭПР РТ и представителей ПАО «Казаньоргсинтез» от 13.03.2024 № 5806-АШ, направлено в МЭПР РТ (исх. 100/01 от 06.06.2024 и 119/01 от 01.07.2024; ответ МЭПР РТ от 09.07.2024 № 12434/06).

Предложения, направленные на повышение эффективности использования сводной базы данных параметров выбросов загрязняющих веществ для г. Казань для повышения качества атмосферного воздуха в северной зоне г. Казани, подготовленные в соответствии с обращением МЭПР РТ (исх. № 12434/06 от 09.07.2024 г.) направлены в адрес данного министерства (исх. 146/01 от 12.07.2024).

Результаты выполненного анализа данных, касающихся систематически фиксируемых автоматическими станциями контроля загрязнения атмосферы МЭПР РТ превышений допустимого содержания сероводорода в атмосферном воздухе северной зоны г. Казани обсужден с заинтересованными специалистами МЭПР РТ и переданы в отделы экологического мониторинга и экологического нормирования указанного министерства (e-mail: Elena.Zakirova@tatar.ru; Sergey.Bogatyrjov@tatar.ru, 12.05.2025).

Результаты работы использованы при выполнении государственных контрактов с МЭПР РТ №№ 19МЭ-14с, 19МЭ-15с от 03.06.2019г., №№ 20МЭ-4с, 20МЭ-5с от 14.02.2020 г.:

| Дата и номер государственного контракта | Наименование работ (по предмету контракта)                                                                                                                                                                                                   |
|-----------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ГК № 19МЭ-15с от 03.06.2019 г.          | «Ведение системы расчетного мониторинга за состоянием атмосферного воздуха для выявления источников загрязнения, деятельность которых является причиной повышенной загазованности атмосферного воздуха в городе Казани» (Заказчик – МЭПР РТ) |
| ГК № 19МЭ-14с                           | «Ведение системы расчетного мониторинга за состоянием                                                                                                                                                                                        |

|                                  |                                                                                                                                                                                                                                                   |
|----------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| от 03.06.2019 г.                 | атмосферного воздуха для выявления источников загрязнения, деятельность которых является причиной повышенной загазованности атмосферного воздуха в городе Нижнекамске» (Заказчик – МЭПР РТ)                                                       |
| ГК № 20МЭ-4с<br>от 14.02.2020 г. | «Ведение системы расчетного мониторинга за состоянием атмосферного воздуха для выявления источников загрязнения, деятельность которых является причиной повышенной загазованности атмосферного воздуха в городе Казани» (Заказчик – МЭПР РТ)      |
| ГК № 20МЭ-5с<br>от 14.02.2020 г. | «Ведение системы расчетного мониторинга за состоянием атмосферного воздуха для выявления источников загрязнения, деятельность которых является причиной повышенной загазованности атмосферного воздуха в городе Нижнекамске» (Заказчик – МЭПР РТ) |

Вице-президент  
Академии наук Республики Татарстан



Д.Р. Абзалилова