

Методология определения региональных пороговых концентраций для расчёта нормативов допустимого сброса жидких производственных отходов в поверхностные воды

© 2021. Ю. А. Тунакова¹, д. х. н., профессор, зав. кафедрой,
С. В. Новикова¹, д. т. н., профессор,

Е. В. Байбакова², доцент, В. С. Валиев³, с. н. с.,

¹Казанский национальный исследовательский
технический университет им. А. Н. Туполева (КАИ),
420126, Россия, г. Казань, ул. Четаева, д. 18,

²Казанский инновационный университет им. В. Г. Тимирязова (ИЭУП),
420111, Россия, г. Казань, ул. Московская, д. 42,

³Институт проблем экологии и недропользования
Академии наук Республики Татарстан,
420087, Россия, г. Казань, ул. Даурская, д. 28,
e-mail: juliaprof@mail.ru

Нормативы качества воды являются ключевым инструментом регулирования антропогенной нагрузки на водные объекты. Научно-обоснованным подходом для разработки региональных нормативов качества воды является использование современных математических методов анализа экспериментальных данных и информационных технологий. Нами разработана методология определения региональных пороговых нормативов допустимого сброса жидких производственных отходов для выделенных типов поверхностных вод. В представленной методологии использовано сочетание методов кластерного анализа и экспертной оценки, что позволяет повысить обоснованность полученных результатов. Типизация поверхностных вод проводилась для водных объектов территории Республики Татарстан на основании данных многолетних систематических наблюдений. Кластеризация осуществлялась по наборам всех определяемых гидрохимических показателей с помощью нейронных самоорганизующихся сетей Кохонена, реализованных в авторской модели нейросетевой фильтрации. В качестве экспертов для оценки однородности групп данных в каждом из выделенных кластеров выступали специалисты в соответствующей предметной области. Для каждой установленной экспертами неоднородной группы производилось разбиение на кластеры при помощи нейронной сети Кохонена до достижения требуемой однородности. На основе экспертного анализа были исключены из дальнейшей оценки гидрохимические показатели, которые имели равномерную изменчивость значений и не позволяли провести типизацию вод. По значениям остальных гидрохимических показателей выделены шесть типов вод. Определены пороговые значения гидрохимических показателей по кластерам, соответствующие верхнему порогу вариационного ряда значений. Полученные региональные пороговые концентрации для каждого типа вод предлагается использовать для расчёта нормативов допустимых сбросов при удалении жидких отходов в объекты водопользования, расположенные на участках Волжско-Камского бассейна.

Ключевые слова: жидкие производственные отходы, сброс, водные объекты, нейросетевые технологии, региональные пороговые концентрации, нормативы допустимых сбросов.

Methodology for determining regional thresholds for the calculation of standards for the permissible discharge of liquid industrial waste into surface waters

© 2021. Yu. A. Tunakova¹ ORCID: 0000-0002-8826-8639^{*}

S. V. Novikova¹ ORCID: 0000-0001-8207-1010^{*}

E. V. Baibakova² ORCID: 0000-0002-9281-0216^{*}

V. S. Valiev³ ORCID: 0000-0002-8848-5326^{*}

¹Kazan National Research Technical University
named after A. N. Tupolev – KAI,
18, Chetaeva St., Kazan, Russia, 420126,

²Kazan Innovative University named after V. G. Timiryasov (IEML),
42, Moskovskaya St., Kazan, Russia, 420111,

³Research Institute for Problems of Ecology and Mineral Wealth Use
of Tatarstan Academy of Sciences,
28, Dauruskaya St., Kazan, Russia, 420087,
e-mail: juliaprof@mail.ru

Water quality standards are a key tool for regulating anthropogenic pressure on water bodies. A scientifically-based approach to the development of regional water quality standards is the use of modern mathematical methods for the analysis of experimental data and information technologies. We have developed a methodology for determining regional threshold standards for permissible discharge of liquid industrial waste for selected types of surface waters. The presented methodology uses a symbiosis of cluster analysis and expert evaluation methods, which allows to increase the validity of the results obtained. The typification of surface waters was carried out for water bodies of the territory of the Republic of Tatarstan on the basis of long-term systematic observations. Clustering was carried out according to the sets of all determined hydrochemical indicators using Kohonen neural self-organizing networks implemented in the author's neural network filtering model. Experts in the relevant subject area acted as experts to assess the homogeneity of data groups in each of the selected clusters. Each heterogeneous group established by experts was divided into clusters using the Kohonen neural network until the required uniformity was achieved. Based on expert analysis, hydrochemical indicators, which had a uniform variability of values and did not allow water typing, were excluded from further evaluation. According to the values of other hydrochemical indicators, six types of waters are distinguished. Threshold values of hydrochemical indicators for clusters corresponding to the upper threshold of the variational series of values are determined. The obtained regional threshold concentrations for each type of water are proposed to be used to calculate the standards of permissible discharges during the disposal of liquid waste into water use facilities located in the Volga-Kama basin.

Keywords: liquid production waste, discharge, water bodies, neural network technologies, regional threshold concentrations, standards permissible discharges.

Жидкие отходы (ЖО), образованные в процессе производства и подлежащие сбросу в поверхностные водные объекты после очистки и разбавления, являются одним из основных источников загрязнения поверхностных вод. Проблема регулирования поступления ЖО в водные объекты является актуальнейшей задачей и осуществляется на основе системы нормирования, исходя из отнесения водных объектов к определённым группам, за счёт оценки способности к разбавлению ЖО. В свою очередь, эта способность определяется гидрологическими и гидрохимическими характеристиками водного объекта, которые учитываются при расчёте отечественных нормативов допустимых сбросов (НДС) в настоящее время лишь в виде оценки гидрологических критериев кратности разбавления и на основе предельно допустимых концентраций (ПДК) [1–4]. Вместе с этим в научных публикациях обосновывается учёт местных природно-климатических особенностей и разработка региональных пороговых концентраций, как альтернативы ПДК [5–6]. Региональные пороговые концентрации должны быть разработаны применительно к конкретному речному бассейну или природно-климатической зоне таким образом, чтобы водоохранные мероприятия в отношении поверхностных водных объектов, относящихся к одной и той же эколого-гидрологической системе (речной бассейн в

целом, регион) были скоординированными и экологически обоснованными [7].

Следует отметить, что зарубежные системы стандартов и нормативов качества вод начали использовать бассейновый подход для определения региональных нормативов качества значительно раньше отечественных. В частности, стандарты предельно допустимой антропогенной нагрузки на водные объекты, используемые в США (Total Maximum Daily Load – TDML), реализуют бассейновый подход с 1994 г. [8–9].

Система управления водными ресурсами Франции также строго структурирована по бассейновому принципу, и управление осуществляется специальными бассейновыми комитетами [10–11]. Вместе с признанием необходимости реализации региональных нормативов, важно отметить, что величина допустимых сбросов не может оставаться постоянной из года в год, а зависит от гидрологического режима водотоков и условий формирования природного гидрохимического режима [12–13].

Проблема выделения диапазонов региональных нормативов, удовлетворяющих колебаниям в состоянии водного объекта, по нашему мнению, решается с помощью фиксации относительно стабильных во времени и пространстве гидрохимических состояний с помощью кластерного анализа. Выделенные в разные кластеры образцы отражают разные

режимы функционирования водного объекта, к которым можно применить бассейновый подход, выделяя для них свои собственные региональные нормативы [14].

Нами предлагается принципиально новый подход к разработке региональных нормативов на основе сочетания кластерного анализа и экспертной оценки, что позволит, с одной стороны, повысить адекватность оценки со стороны специалистов предметной области, а с другой, даёт строгое математическое обоснование полученным в результате оценкам.

Целью работы являлось определение алгоритма расчёта нормативов сбросов жидких отходов и региональных нормативов качества – типовых пороговых концентраций.

Объекты и методы исследования

Согласно [1], значения показателей природного фона акваторий определяются на основании данных наблюдений. Пороговые значения показателей нами предлагается устанавливать в процессе кластеризации, что позволяет учесть региональную специфику и адекватно оценить водные объекты с выделением типов вод для последующей разработки нормативов. Для увеличения точности и адекватности интегральных оценок предлагается использовать методику многоуровневой нейросетевой фильтрации, описанную в работе [15]. В отличие от классической кластеризации, в данной методике решение о дальнейшей детализации (делении кластера на подкластеры) принимается экспертно. Производится многократное повторение процесса кластеризации выбранным алгоритмом для тех групп данных (кластеров), где детализация недостаточна, т. е. кластер не однороден с точки зрения экспертов.

Разработанная методика была опробована на наборе гидрохимических показателей поверхностных вод Республики Татарстан в 15 точках отбора проб, расположенных на различных участках Волжско-Камского бассейна (р. Волга, р. Кама, р. Свияга, р. Ашит, р. Казанка, р. Меша, р. Сулица) с ежемесячной дискретностью и фиксацией координат точек пробоотбора. Анализ проводили по гидрохимическим показателям, характеризующим качество поверхностных вод: синтетическим поверхностно-активным веществам (СПАВ); биохимическому потреблению кислорода за 5 суток (БПК₅); химическому потреблению кислорода (ХПК); минерализации; прозрачности; температуре; электропроводно-

сти; жёсткости; содержанию: взвешенных веществ; нефтепродуктов; Fe²⁺; Al³⁺; NH₄⁺; Pb²⁺; Ca²⁺; O₂ (раств.); Mg²⁺; Cu²⁺; Zn²⁺; Na⁺; K⁺; Ni²⁺; NO₃⁻; NO₂⁻; PO₄³⁻; SO₄²⁻; HCO₃⁻; Cl⁻; Mn (общий); P (общий); фенолу в течение трёх лет (2018–2020 гг.). Для определения нефтепродуктов использовали метод ИК-спектроскопии; содержания ионов металлов – атомно-абсорбционной спектроскопии; фенола – газожидкостной хроматографии; хлорид-, сульфат- и нитрат-ионов – ионной хроматографии. Для остальных показателей применяли соответствующие аттестованные методики анализа.

В качестве экспертов, оценивающих степень детализации разбиения на кластеры, выступали научные сотрудники лаборатории биогеохимии Института проблем экологии и недропользования Академии наук Республики Татарстан. На основе экспертного анализа на этом этапе был сделан вывод о незначительной временной и пространственной изменчивости таких показателей, как СПАВ; БПК₅; ХПК; прозрачность; температура; электропроводность; содержание Al³⁺; NH₄⁺; Pb²⁺; Cu²⁺; Zn²⁺; Ni²⁺; NO₃⁻; NO₂⁻; Mn (общий); P (общий); фенол, в связи с чем данные показатели были исключены из дальнейшего анализа. Для дальнейшего анализа были использованы следующие показатели: общая минерализация, содержание кислорода, HCO₃⁻; Ca²⁺; Mg²⁺; Na⁺ + K⁺; Fe²⁺; нефтепродукты; SO₄²⁻; PO₄³⁻; Cl⁻.

Вычисления были проведены с использованием программного пакета анализа данных Deductor Studio 4.3. Кластеризацию осуществляли с помощью нейронной самообучающейся сети Кохонена. Было выделено 4 кластера. По заключению экспертов, наборы данных в кластере № 1 обладают недостаточной степенью однородности. Было произведено разбиение кластера № 1 на три, и выделено 6 типов поверхностных вод, удовлетворяющих заданным экспертами условиям детализации процедуры кластеризации и охватывающих основную изменчивость гидрохимического состава вод Волжско-Камского бассейна.

В результате были сформированы соответствующие выборки гидрохимических показателей и проведена их статистическая обработка с расчётом средних значений и медиан, а также доверительных интервалов и квартильных размахов каждого показателя. Описательная статистика вариационных рядов данных позволила выявить диапазоны

значений, характеризующих тот или иной кластер показателей. Крайние значения диапазонов математического ожидания можно рассматривать как пороги (нормативы) показателей в данных конкретных условиях. Статистическую значимость различий оценивали с помощью непараметрического критерия Краскела-Уоллиса, с последующей парной оценкой по Манна-Уитни. Верхний порог соответствует верхнему квартилю (75%), нижний – нижнему квартилю (25%) вариационного ряда. Статистические расчёты проводили в соответствующих модулях программы Statistica.

Определены пороговые значения показателей – типовые пороговые концентрации (ТПК), характеризующие разные типы вод, соответствующие верхнему квартилю вариационного ряда значений. Для учёта гидрохимических особенностей установленных типов вод расчёты НДС предлагается осуществлять на основе регламентированной методики, по формуле:

$$\text{НДС} = q \cdot C_{\text{НДС}_i}, \quad (1)$$

где q – максимальный часовой расход сточных вод, м³/ч; $C_{\text{НДС}_i}$ – концентрация i -го вещества, которая может быть допущена в сточных водах, г/м³.

Величину $C_{\text{НДС}_i}$ предлагается определять следующим образом:

$$C_{\text{НДС}_i} = N \cdot (\text{ТПК}_i - C_{\text{СР}_i}) + C_{\text{СР}_i}, \quad (2)$$

где ТПК_i – пороговое значение показателя i -го вещества для установленного типа воды; $C_{\text{СР}_i}$ – средняя концентрация i -го вещества, полученная по данным наблюдений; N – кратность общего разбавления ЖО в водном объекте.

Результаты и обсуждение

В результате проведённого исследования выделены типы вод, отличающиеся по значениям гидрохимических показателей. Определены значения пороговых концентраций (ТПК) для вод каждого типа с целью последующего расчёта НДС.

Кластер 0. Тип воды 1. Гидрокарбонатная вода кальциево-магниевая высокой минерализации (не более 1095 мг/л), высокой жёсткости (не более 13,7 мг-экв./л), с высоким содержанием кислорода (не менее 8,5 мгО₂/л).

Кластер 1. Тип воды 2. Гидрокарбонатная кальциево-магниевая вода умеренной минерализации (не более 276,5 мг/л), средней жёсткости (не более 3,3 мг-экв./л), со средним содержанием кислорода (не менее 7,41 мгО₂/л).

Кластер 2. Тип воды 3. Гидрокарбонатная кальциево-магниевая вода средней минерализации (не более 640 мг/л), повышенной жёсткости (не более 7,93 мг-экв./л), с высоким содержанием кислорода (не менее 8,2 мгО₂/л).

Кластер 3. Тип воды 4. Гидрокарбонатная кальциево-магниевая вода повышенной жёсткости (не более 13,1 мг-экв./л), высокой минерализации (не более 960 мг/л), с высоким содержанием кислорода (не менее 7,9 мгО₂/л).

Кластер 4. Тип воды 5. Гидрокарбонатная кальциево-магниевая вода средней жёсткости (не более 11,3 мг-экв./л), умеренной минерализации (не более 850 мг/л), с высоким содержанием кислорода (не менее 9,7 мгО₂/л).

Кластер 5. Тип воды 6. Гидрокарбонатная кальциево-магниевая вода средней жёсткости (не более 8,38 мг-экв./л), умеренной минерализации (не более 670 мг/л), со средним содержанием кислорода (не менее 6,9 мгО₂/л).

Значения остальных оцениваемых показателей по выделенным типам вод приведены в таблице.

Таблица

Пороговые концентрации гидрохимических показателей в разных типах природных вод

Тип природных вод Type of natural waters	Типовые пороговые концентрации, мг/л Typical threshold concentrations, mg/L								
	HCO ₃ ⁻	Ca ²⁺	Mg ²⁺	Na ⁺ + K ⁺	Fe ²⁺	нефте-продукты petroleum products	SO ₄ ²⁻	PO ₄ ³⁻	Cl ⁻
1	365	223	44,0	58	0,082	0,078	391	0,247	21,3
2	127	48	10,6	16	0,139	0,025	66,4	0,259	26,1
3	365	117	26,6	25	0,077	0,050	141	0,420	15,7
4	315	199	35,2	30	0,094	0,040	371	0,390	18,5
5	342	164	36,6	25	0,079	0,040	301	0,284	18,0
6	300	117	23,6	25	0,143	0,047	173	0,428	19,7

Предлагаемые подходы можно использовать для разработки нормативов качества для различных водных объектов на региональном уровне. Система регионального экологического нормирования природных вод предназначена для регулирования антропогенной нагрузки и сохранения условия для самовосстановления нарушенных водных экосистем.

Выделенные в результате кластеризации 6 типов поверхностных вод охватывают основную изменчивость гидрохимического состава вод Волжско-Камского бассейна. К одному и тому же типу вод (кластеру) могут относиться как рядом расположенные створы одного и того же водного объекта, так и участки разных водных объектов, имеющих схожие гидрохимические режимы. В то же время, на одном и том же водном объекте, в частности, на водотоках, могут отмечаться участки с разными типами вод. Так, многие верховья малых рек относятся к 1 типу, а их устья – к 3 типу, воды водных объектов Предволжья чаще всего относятся к 5 и 6 типу, а воды рек, расположенных в Камском бассейне, соответствуют 2 и 4 типу и т. д. Таким образом, представленная типизация обобщает гидрохимические особенности рассматриваемых участков, а то обстоятельство, что их пространственные и физико-географические условия расположения часто оказываются схожими для одного типа вод лишь подтверждают эффективность предлагаемого подхода.

Заключение

Качество природных вод в участках Волжско-Камского бассейна характеризуется значительной пространственной неоднородностью и природными особенностями формирования состава вод, что необходимо учитывать при нормировании и регулировании антропогенного воздействия на водные объекты. В России в настоящее время при обосновании нормативов допустимых сбросов вредных веществ используются одинаковые для всей территории страны федеральные ПДК, не учитывающие природные особенности водных объектов. Нами обоснован подход для нормирования сбросов ЖО для различных типов вод, отличающихся по значениям гидрохимических показателей водных объектов, с апробацией на конкретных участках Волжско-Камского бассейна. Использование бассейновых принципов и нейросетевых технологий с экспертной оценкой детализации

процедуры кластеризации позволяет математически обосновать результаты типизации и нормирования. Выделение типов вод необходимо для нормирования компонентов, концентрация которых в природных водах в большей степени обусловлена природными и в меньшей степени – антропогенными условиями. Типовые пороговые концентрации должны быть менее жесткими, чем федеральные нормативы ПДК. А разрабатываемые на их основе НДС должны способствовать увеличению адекватности требований к очистке ЖО.

References

1. Methodological guidelines for the development of standards for permissible impact on water bodies. Are approved by the order of the Ministry of Natural Resources and Environmental Protection of the Russian Federation of 12.12.2007 No. 328 (are registered by the Ministry of Justice of the Russian Federation of 23.01.2008 No. 10974) (in Russian).
2. Nosal A.P. Geoecological problems of water quality management and their solution on the basis of the system of regional rationing of impact on water bodies: Dissertation for the degree of Doctor of Geographical Sciences. Yekaterinburg, 2004. 282 p. (in Russian).
3. Nikanorov A.M., Bryzgalov V.A., Chernogaev G.M. Anthropogenic-altered natural background and its formation in freshwater ecosystems of Russia // *Meteorology and Hydrology*. 2007. No. 11. P. 62–79 (in Russian). doi: 10.3103/S1068373907110064
4. Issues of environmental rationing and development of a system for assessing the state of reservoirs / Eds. D.S. Pavlov, G.S. Rosenberg, M.I. Shatunovsky // *Materials of the Joint Plenum of the Scientific Council of the Department of Hydrobiology and Ichthyology of the Russian Academy of Sciences, the Hydrobiological Society of the Russian Academy of Sciences and the Interdepartmental Ichthyological Commission*. Moskva: Partnership of scientific publications of KMK, 2011. 196 p. (in Russian).
5. Khosrovyants I.L. Scientific basis of instrumentation of diagnostic and prognostic calculations of water quality in water bodies. Moskva: ZAO PO Sovintervod, 2006. P. 46–49 (in Russian).
6. Seleznev V.A., Bepalova K.V. Environmental criteria for rationing the discharge of pollutants into water bodies // *Bulletin of the Volga University named after V.N. Tatishchev*. 2015. No. 1 (23). P. 130–139 (in Russian).
7. Nikanorov A.M., Chernogaeva G.M., Belyaev S.D. Fundamental and applied problems of surface water quality // *VII All-russian Hydrological Congress: theses of plenary reports*. Sankt-Petersburg: Publication of the State Hidrological Institute, 2013. P. 43–53 (in Russian).

8. Water Quality Standards Handbook, EPA [Internet resource] <https://www.epa.gov/wqs-tech/water-quality-standards-handbook/> (Accessed: 14.05.2021).
9. Thissen R.M., Thome M.C., Maul P.R., Prohl G., Wheeler H.S. Modelling radionuclide distribution and transport in the environment // *Environmental Pollution*. 1999. No. 100. P. 151–177.
10. Karadashina, L.F., Khokhlyavin S.A., Sursyakov V.N. Experience of water resources management in the European Union and its significance for Russia Text // *Russian Water Industry: problems, technologies, management*. 2002. V. 4. No. 5. P. 406–413 (in Russian).
11. Directive No. 2000/60/Yes of 23 October 2000 of the European Parliament and the Council of the European Union establishing the framework for Community action on water policy [Internet resource] <http://europa.eu.int/smartapi/cgi/> (Accessed: 14.05.2021).
12. Chernogaeva G.M., Kuzmich V.N. The problem of rationing the flow of chemicals from the catchment area // *Meteorology and Hydrology*. 2003. No. 3. P. 75–86 (in Russian).
13. Stokov A.A. Features of water quality rationing in the development of standards for permissible impact on water bodies // *Bulletin RUDN. Series Ecology and Life Safety*. 2014. No. 3. P. 105–109 (in Russian).
14. Tunakova Y.A., Novikova S.V., Ivanov D.V., Shagidullin A.R., Valiev V.S., Morais A.J. Approaches for establishing threshold concentrations of priority pollutants in urban ecosystem components // *Theoretical and Applied Ecology*. 2020. No. 3. P. 23–28 (in Russian). doi: 10.25750/1995-4301-2020-3-023-028 2020
15. Novikova S.V., Tunakova Yu.A., Shagidullin A.R., Kremlin E.S., Valiev V.S., Gabdrakhmanova G.N., Kuznetsova O.N. Use of neural network technologies for zoning the territory on the example of Kazan // *Bulletin of the Technological University*. 2019. V. 22. No. 5. P. 128–131 (in Russian).