

На правах рукописи

Лисовенко Анна Владимировна

**КОМПЛЕКСНАЯ ОЦЕНКА КАЧЕСТВА
СТОЧНЫХ ВОД ПО ПОКАЗАТЕЛЯМ
ТОКСИЧНОСТИ И ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА
В СИСТЕМЕ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА
НА ПРИМЕРЕ ПРЕДПРИЯТИЙ
МАШИНОСТРОИТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА**

Специальность 03.02.08 - экология

**Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата биологических наук**

Нижний Новгород – 2011

Работа выполнена на кафедре экологии государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»

Научный руководитель: доктор биологических наук,
профессор
Гелашвили Давид Бежанович

Официальные оппоненты: доктор биологических наук,
профессор
Постнов Иван Евстафьевич
кандидат биологических наук
Томилина Ирина Ивановна


Ведущая организация: Институт экологии Волжского бассейна РАН

Защита состоится _____ 2011 года в _____ часов на заседании диссертационного совета Д 212.166.12 при Нижегородском государственном университете им. Н.И. Лобачевского по адресу: 603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, д.23, корп.1, биологический факультет
e-mail:ecology@bio.unn.ru тел.(831)462-30-85

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Нижегородского государственного университета им. Н. И.Лобачевского.

Автореферат разослан _____ 2011г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат биологических наук

 Зазнобина Н.И.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Важность разностороннего контроля и оценки качества промышленных сточных вод диктуется необходимостью установления их влияния на экосистемы водоемов. В большинстве случаев такой контроль проводится по перечням химических показателей сточных вод, определяемых исходя из технологических процессов, в результате которых образуются сточные воды (Жмур, 2003). Однако если возвратные воды имеют многокомпонентный состав, одного химического контроля недостаточно для оценки их опасности для биологических организмов. В этом случае возникает необходимость токсикологического контроля с целью оценки комбинированного действия загрязняющих веществ сточных вод на водные экосистемы (Крайнюкова, 1988; Жмур, 1997; Филенко, 2008; Hermers et al., 1984; Van Loon, Hermens, 1995). Несмотря на то, что токсичность возвратных вод определяется их компонентным составом, выявление зависимостей между степенью токсичности сточных вод и концентрациями загрязняющих веществ в них представляется нетривиальной статистической задачей и представляет особую сложность для сточных вод многокомпонентного состава. Установление таких связей требует применения мощных инструментов многомерного статистического анализа, например, детерминационного. В свою очередь, полученные результаты имеют прогностическое значение, дают возможность разрабатывать рекомендации по нормированию сброса загрязняющих веществ и принимать управленческие решения, направленные на сокращение вредного антропогенного влияния на водные экосистемы.

Цель работы: разработка и верификация системы комплексной оценки качества сточных вод по показателям токсичности и химического состава с применением обобщенной функции желательности и методов математической статистики на примере предприятий машиностроительного комплекса.

Задачи исследования:

1. Разработать и обосновать алгоритм применения обобщенной функции желательности для сжатия информации в процедуре оценки качества сточных вод по их химическому составу.

2. Разработать и обосновать алгоритм применения обобщенной функции желательности для сжатия информации в процедуре оценки качества сточных вод по их токсичности.

3. Верифицировать алгоритмы применения обобщенной функции желательности для оценки качества сточных вод по их химическому составу и токсичности на примере предприятий машиностроительного комплекса.

4. Методами корреляционного и регрессионного анализа выявить приоритетные загрязняющие вещества сточных вод и установить зависимость параметров их токсичности от химического состава.

5. Дать прогноз токсичности сточных вод по содержанию в них загрязняющих веществ методом дискриминантного анализа с пошаговой редуccionией переменных.

6. Обосновать токсикологически допустимые уровни содержания загрязняющих веществ в сточных водах методом детерминационного анализа.

Научная новизна работы. Впервые для целей экодиагностики сточных вод разработаны и обоснованы алгоритмы применения обобщенной функции желательности для расчета интегральных показателей качества сточных вод по их химическому составу и токсичности, позволяющие сжимать информацию и оперировать с большими массивами данных. Показана возможность прогнозирования токсичности сточных вод по содержанию в них загрязняющих веществ с помощью методов многомерного статистического анализа. Впервые предложены и определены токсикологически допустимые уровни содержания загрязняющих веществ в сточных водах методом детерминационного анализа.

На защиту выносятся следующие положения.

1. Алгоритмы расчета показателей комплексной оценки химической опасности и токсичности сточных вод, представляющие собой адаптацию обобщенной функции желательности для целей сжатия информации в процедуре экодиагностики сточных вод, которые удовлетворяют требованиям адекватности, массовости, результативности и детерминированности.

2. Процедура ранжирования выпусков сточных вод по показателям комплексной оценки на основе обобщенной функции желательности, позволяющая в едином масштабе получать сопоставимые оценки качества сточных вод во временной и пространствен-

ной динамике, и оптимизировать природоохранные мероприятия.

3. Процедура прогнозирования токсичности сточных вод на основе показателя токсикологически допустимого уровня содержания загрязняющих веществ.

Практическая значимость работы. Разработанные методы интегральной оценки качества сточных вод были применены при проведении экологического мониторинга на предприятиях машиностроительного комплекса г. Саров (РФЯЦ-ВНИИЭФ и ЭМЗ «Авангард»). Выявлены приоритетные загрязняющие вещества, проведено ранжирование выпусков по качеству отводимых вод, оценена динамика качества сточных вод, сбрасываемых из выпусков предприятия. Установлена взаимосвязь токсичности вод и их компонентного состава, и даны рекомендации по нормированию содержания загрязняющих веществ в сточных водах с учетом их токсикологической значимости. Материалы диссертации используются в учебном процессе в Нижегородском государственном университете им Н.И. Лобачевского (Национальном исследовательском университете).

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 6 глав, заключения, выводов и списка литературы. Основной текст изложен на 136 страницах, включая 19 таблиц, 12 рисунков. Список литературы включает 206 наименований, в т.ч. 37 иностранных.

Личный вклад автора. Автор принимала непосредственное участие в разработке алгоритмов расчета показателей комплексной оценки химической опасности и токсичности сточных вод. Осуществляла пробоотбор, биотестирование сточных вод, статистический анализ и обработку всей совокупности экспериментальных данных.

Апробация работы и публикации. Результаты работы доложены на научно-практических конференциях и семинарах: «Экологическая и промышленная безопасность» (III и VII сессии молодежной школы-семинара, Саров, 2003 и 2008); «Высокоинтенсивные физические факторы в медицине, биологии, сельском хозяйстве и экологии» (Международный семинар, Саров, 2004); «Современные проблемы водной токсикологии» (Международная конференция, Борок, 2005); XI и XIII Нижегородских сессиях молодых ученых. Технические науки (Татинец, 2006 и 2008); «Новые технологии водного транспорта» (Всероссийская молодежная на-

учно-техническая конференция, Н.Новгород, 2007); III Всероссийской конференции по водной токсикологии, посвященной памяти Б.А Флерова «Антропогенное влияние на водные организмы и экосистемы», конференции по гидроэкологии «Критерии оценки качества вод и методы нормирования антропогенных нагрузок» (Борок, 2008). По материалам диссертации опубликовано 12 научных работ, из них 2 – в журналах, рекомендованных ВАК.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Глава 1. Обзор литературы. Современные представления о сточных водах как экологическом факторе негативного антропогенного воздействия на окружающую среду

В главе дан критический анализ данных литературы, посвященных рассмотрению воды как природного ресурса. Анализируется антропогенное загрязнение гидросферы, в частности, виды негативного антропогенного воздействия на водоемы: загрязнение водных объектов сточными водами, отводимыми из точечных и рассредоточенных источников, а также вторичное загрязнение водоемов. Приведены характеристики состава и свойств сточных вод на предприятии, обсуждаются вопросы нормирования качества природных и сточных вод. Описаны принципы и процедуры контроля качества сточных вод: гидрохимический анализ и биологические методы исследования вод, в частности, биотестирование как один из основных элементов экологического контроля. Приводится теоретическое обоснование метода применения функции желательности, описываются некоторые аспекты использования детерминационного анализа в экологических исследованиях.

Глава 2. Материал и методы исследований

2.1. Материалы исследований

В течение 2003-2008 гг. проведен мониторинг сточных вод Российского Федерального Ядерного Центра – Всероссийского НИИ Экспериментальной Физики (РФЯЦ-ВНИИЭФ) и входящего в его структуру ЭМЗ «Авангард». Ежемесячно обследовались 12 выпусков сточных вод по 20 показателям химического состава и токсичности на 2 тест-объектах.

Общий годовой объем сброса сточных вод предприятий – 2530,1 тыс. м³. Из них 2439,3 тыс. м³ сбрасываются без очистки (96,4% от общего количества), остальные – недостаточно очищен-

ными. Сброс загрязняющих веществ со сточными водами осуществляется на основании нормативов допустимого сброса (НДС). Для каждого выпуска разработан свой перечень контролируемых показателей загрязняющих веществ, поступающих со сточными водами в природные водные объекты, и утвержден в соответствующем порядке. Перечень нормируемых показателей определяли на основании:

- анализа используемых технологических процессов, в результате которых образуются сточные воды;
- рассмотрения инвентаризации водопотребляющего оборудования;
- оценки результатов аналитического контроля сточных вод выпусков за многолетний период наблюдений.

2.2. Методы биологического тестирования

Тест на инфузориях *Paramecium caudatum* Ehrenberg. Исследования токсичности сточных вод проводились с применением методики определения токсичности воды по хемотаксической реакции инфузорий (ПНД Ф Т 14.1:2:3:4.2-98). В качестве тест-организма использовали инфузорию-туфельку *Paramecium caudatum* Ehrenberg. Измерения проводили при помощи прибора БИОТЕСТЕР-2. Индекс токсичности рассчитывали по формуле:

$$T = (I_{\text{ср.контр.}} - I_{\text{ср.опыт}}) / I_{\text{ср.контр.}}, \quad (1)$$

где $I_{\text{ср.контр.}}$ и $I_{\text{ср.опыт}}$ – средние показания прибора для контрольных и исследуемых проб соответственно.

Тест на ракообразных *Ceriodaphnia affinis* Lillijeborg. Для определения хронической и острой токсичности сточных вод применяли тесты по смертности и изменению плодовитости цериодафний (ФР.1.39.2007.03221). В качестве тест - организма в этом методе применяли цериодафию *Ceriodaphnia affinis* Lillijeborg (*Crustacea, Cladocera*).

Расчет безвредной кратности разбавления (БКР). На основании полученных экспериментальных данных в тесте на цериодафниях устанавливали безвредную кратность разбавления (БКР) исследуемой воды, при которой острые реакции организмов в опыте не превышают таковые в контроле (для острой токсичности) и плодовитость организмов в опыте статистически значимо не отличается от плодовитости контрольной группы (для хронической токсичности).

БКР по тесту на инфузориях был рассчитан на основании следующих критериев.

1. В случае, когда значение индекса токсичности T , полученного в опыте, лежало в пределах от 0 до 0,4 (по методике – нетоксичная вода), БКР принималось равным 1, т.е. разведение пробы не требуется.

2. Если значение индекса токсичности T находилось в диапазоне от 0,4 до 0,7 (по методике – мало токсичная вода), но в опыте не требовалось разбавление нативной пробы, то значение БКР рассчитывалось по уравнению: $БКР = T/0,4$, т.е. какое требуется разведение нативной пробы, чтобы индекс токсичности T был равен 0,4 (максимальное значение T для нетоксичной воды).

3. В случае, когда анализ выполнялся с приготовлением разбавления, т.е. индекс T для нативной пробы был больше 0,7, для расчета БКР использован пробит-анализ, аналогично тому, как рассчитывается $БКР_{10-48}$ для теста на цериодафниях по ФР.1.39.2007.03221. Значения пробитов по пробитной сетке находили, подставляя значения «невыхода» инфузорий в пробы в процентах. Процент «невыхода» инфузорий в исследуемую среду показывает долю организмов, которые «расценили» предлагаемую среду как токсичную и, избегая ее, остались в нижней части кюветы. Рассчитывался данный показатель по формуле:

$$x = 100 - I_{\text{ср.опыт}} * 100\% / I_{\text{ср.контр}}, \quad (2)$$

где $I_{\text{ср.контр}}$ и $I_{\text{ср.опыт}}$ – средние показания прибора для контрольных и исследуемых проб соответственно. Дальнейшие расчеты велись, как предложено в ФР.1.39.2007.03221.

В работе принята классификация сточных вод по степени токсичности на 5 категорий: 1) нетоксичная (не требующая разбавления); 2) малотоксичная (требуемая кратность разбавления 1,1-16 раз); 3) среднетоксичная (кратность разбавления 16 – 50 раз); 4) высокотоксичная (кратность разбавления 50 – 99 раз) и 5) гипертоксичная (требуемая кратность разбавления свыше 99 раз) (Инструкция..., 1998).

2.3. Статистические методы анализа

Статистическая обработка экспериментального материала проводилась с применением корреляционного, регрессионного и дискриминантного анализов с помощью пакета STATISTICA 6.0 (StatSoft, Inc., 2001) и детерминационного анализа (пакет программ «ДА система» (версия 4.0) фирмы «Контекст»). Для получения интегральных характеристик химического состава и токсичности сточных вод применяли обобщенную функцию желательности.

Глава 3. Алгоритмы применения функции желательности для комплексной оценки качества сточных вод

Комплексная оценка качества сточных вод предприятия предполагает разработку метода расчета интегральных показателей качества вод, которые могут стать эффективным инструментом для решения водоохраных задач. Нами для комплексной оценки качества сточных вод по их химическому составу и токсичности предложены алгоритмы, основанные на обобщенной функции желательности (ОФЖ).

3.1. Алгоритм применения функции желательности для оценки качества сточных вод по их химическому составу

Обобщенную функцию желательности мы предлагаем записать в следующем виде:

$$D = \sqrt[k]{\left(\prod_{i=1}^n (d_i^{\alpha_i})^{\beta_i} \right)} = \sqrt[k]{d_1^{\alpha_1 \beta_1} \cdot d_2^{\alpha_2 \beta_2} \cdot d_3^{\alpha_3 \beta_3} \dots d_n^{\alpha_n \beta_n}}, \quad (3)$$

где d_i - частная функция желательности; n - число показателей;

$k = \sum_{i=1}^n \alpha_i \beta_i$; α_i и β_i - весовые коэффициенты. Весовые коэффициенты могут быть интерпретированы следующим образом: α_i - коэффициент, учитывающий класс опасности i -го загрязняющего вещества; β_i - коэффициент, учитывающий превышение среднего измеренного значения показателя над нормативом.

Напомним, что обобщенная функция желательности есть средняя геометрическая частных функций желательности (d_i) и, если хотя бы одна из d_i равна нулю, то и $D=0$. Такой случай возможен при использовании линейной нормировки по «минимаксу» для эмпирического ряда переменных с фиксированными значениями X_{min} и X_{max} (Воробейчик и др., 1984). Чтобы избежать «зануления» ОФЖ, нами был предложен для расчета частных функций желательности алгоритм, основанный на свертке функций (Гелашвили и др., 2009).

Для рассматриваемого случая (оценка качества сточных вод по химическому составу) расчет частной функции желательности предлагается производить по формуле:

$$d_i = \frac{2(x_i \cdot x_{норм})}{x_i^2 + x_{норм}^2}, \quad (4)$$

где x_i – среднее значение концентраций i -го загрязняющего вещества за исследуемый период; $x_{\text{норм}}$ – концентрация вещества, по которой производится нормировка.

В качестве $x_{\text{норм}}$ используется значение допустимой концентрации загрязняющего вещества, согласованной в том же НДС (до 2007 г. – ПДС) для данного выпуска. В случае отсутствия норматива на содержание какого-либо из анализируемых компонентов в том же НДС, в качестве $x_{\text{норм}}$ предлагаем принимать значение предельно допустимой концентрации для водоемов рыбохозяйственного значения (ПДК_{рыбхоз}) для данного вещества, т.к. ПДК_{рыбхоз} являются наиболее жесткими из установленных ПДК. Нормировка на допустимое значение, т.е. на значение, являющееся государственно установленным нормативом, позволяет делать оценку вод разных выпусков, отличающихся по содержанию в них загрязняющих веществ, адекватной. Несмотря на то, что для каждого выпуска эти нормативы различны, они являются, по сути, «нормативной точкой отсчета» для каждого конкретного выпуска. НДС является согласованным нормативом, учитывающим специфику производства, от которого поступают сточные воды, и позволяет, таким образом, учесть нагрузку сточными водами на водный объект.

В случаях, когда концентрация вещества не превышает установленного норматива, значение частной функции желательности равняется единице, в случае превышения – снижается в соответствии со степенью превышения. Таким образом, рассчитанные значения функции желательности являются «экологически обоснованными», т.е. качество вод оценивается на основе его соответствия установленным требованиям по каждому компоненту.

Расчет ОФЖ производится по всем показателям (ингредиентам), характеризующим качество сточных вод, для которых предварительно были рассчитаны частные функции желательности. Введение в формулу (3) весового коэффициента α позволяет учитывать степень опасности загрязняющего вещества, сбрасываемого со сточными водами. Степень опасности вещества определяется его классом опасности, указанным в «Перечне...» (1999 г.). Коэффициент α является величиной, обратной значению класса опасности вещества (табл.1).

Для ряда показателей не установлены значения класса опасности, в частности, для взвешенных веществ, рН, БПК₅, ХПК. Для них коэффициент α устанавливается следующим образом: в

случае, когда значение средней измеренной концентрации не превышает допустимого значения, принимается $\alpha=0,25$. Если среднее измеренное значение превышает допустимое, принимается $\alpha=1$.

Таблица 1

Значения коэффициента α для веществ 1-4 классов опасности

Класс опасности загрязняющего вещества	Весовой коэффициент, α
1	1
2	0,5
3	0,33
4	0,25

Введение коэффициента α в формулу (3) в качестве показателя степени частной функции желательности d_i изменяет его значение таким образом, что чем больше значение коэффициента α , тем меньше значение частной функции желательности, следовательно, тем менее желателен сброс данного загрязняющего вещества. Таким образом, чем ниже класс опасности вещества, тем меньше рассчитанное для него значение функции желательности, тем больший вклад оно вносит в снижение значения ОФЖ.

Введение в формулу (3) весового коэффициента β позволяет учесть уровень превышения содержания данного компонента над допустимым значением. Весовой коэффициент β представляет собой отношение средней измеренной концентрации вещества к допустимой:

$$\beta_i = x_i / x_{\text{доп } i}, \quad (5)$$

где x_i – среднее измеренное значение i -го показателя;

$x_{\text{доп } i}$ – допустимое значение i -го показателя.

За $x_{\text{доп}}$ принимается значение концентрации вещества, согласованное в том НДС в качестве допустимой концентрации. Для веществ, не учтенных при согласовании НДС, за $x_{\text{доп}}$ принимается ПДК_{рыбхоз}.

Таким образом, чем больше превышение содержания компонента над нормативом, тем больше значение коэффициента β . Введение коэффициента β в формулу (3) в качестве показателя степени частной функции желательности d_i влияет на нее таким образом, что при его повышении, значение частной функции желатель-

ности снижается, и, следовательно, вносится больший вклад в снижение значения ОФЖ. Кроме того, наличие весового коэффициента β в формуле функции желательности делает картину более «выпуклой». Коэффициент β позволяет отразить в результатах расчета залповые сбросы веществ, поскольку резкое увеличение концентрации ингредиента провоцирует уменьшение значения функции желательности. Совместное присутствие в формуле (3) коэффициентов α и β адекватно отражает наличие залповых сбросов особо опасных компонентов, например, катионов тяжелых металлов, при этом значение ОФЖ может упасть почти до нуля.

3.2 Алгоритм применения функции желательности для оценки токсичности сточных вод

Интегральную оценку токсических свойств сточных вод с помощью обобщенной функции желательности предлагается производить по формуле:

$$D = \sqrt[k]{\prod_{i=1}^n d_i^{\gamma_i}} = \sqrt[k]{d_1^{\gamma_1} \cdot d_2^{\gamma_2} \cdot d_3^{\gamma_3} \dots d_n^{\gamma_n}}, \quad (6)$$

где d_i - частная функция желательности; n – число показателей;

$$k = \sum_{i=1}^n \gamma_i \quad ; \quad \gamma_i - \text{весовой коэффициент, учитывающий категорию токсичности сточных вод и позволяющий расширить динамический диапазон рассчитываемого показателя. Рассмотрим подробнее аргументацию предлагаемого алгоритма.}$$

В этом случае расчет частной функции желательности также производится по формуле свертки функций с нормировкой на минимальное значение натурального показателя (т.к. желательное снижение значения БКР):

$$d_i = \frac{2(x_i \cdot x_{\min})}{x_i^2 + x_{\min}^2}, \quad (7)$$

где x_i – текущее значение БКР пробы вод; x_{\min} – нормативное минимальное значение БКР.

Поскольку в соответствии с нормативными требованиями $\text{БКР}_{\min} = 1$ (т.е. исследуемая сточная вода не требует разведения), то формула расчета частной функции желательности приобретает следующий вид:

$$d_i = \frac{2x_i}{x_i^2 + 1} \quad (8)$$

Введение в формулу (6) весового коэффициента γ_i позволяет расширить динамический диапазон ОФЖ, что дает возможность сравнивать между собой интегральные показатели качества вод по химическому составу и токсичности в сопоставимом масштабе. Численные значения коэффициента γ_i соответствуют принятым категориям токсичности сточных вод (Инструкция..., 1998). По степени токсичности сточные воды классифицируются на 5 категорий – 1) нетоксичная (не требующая разбавления); 2) малотоксичная (требуемая кратность разбавления 1,1-16 раз); 3) среднетоксичная (кратность разбавления 16 – 50 раз); 4) высокотоксичная (кратность разбавления 50 – 99 раз) и 5) гипертоксичная (требуемая кратность разбавления свыше 99 раз). Значения весового коэффициента γ_i , соответствующие указанным категориям токсичности, приведены в табл. 2.

Таблица 2

Значения коэффициента γ_i для сточных вод разных категорий токсичности

Категория токсичности сточных вод	Весовой коэффициент, γ_i
Нетоксичные	1
Малотоксичные	2
Среднетоксичные	3
Высокотоксичные	4
Гипертоксичные	5

Очевидно, что с ростом токсичности сточных вод, сопровождающейся увеличением значения весового коэффициента γ_i , величина соответствующей частной функции желательности будет уменьшаться, что приведет в итоге и к снижению величины ОФЖ.

3.3 Квалификационная оценка качества сточных вод

Квалификационная оценка качества сточных вод, основанная на значениях ОФЖ, заданной на интервале [0;1], может быть произведена по категориям качества, диапазоны которых, приве-

денные в табл. 3, выбраны с использованием функции желательности Харрингтона (Адлер и др., 1976).

Таблица 3

Категории качества сточных вод по значениям ОФЖ

Качество сточных вод	Обобщенная функция желательности
Очень хорошее	1.00– 0.80
Хорошее	0.80 – 0.63
Удовлетворительное	0.63 – 0.37
Плохое	0.37 – 0.20
Очень плохое	0.20 – 0.00

Глава 4. Комплексная оценка качества сточных вод по показателям химического состава с применением функции желательности

Описанная в главе 3 процедура расчета функции желательности, была применена для комплексной оценки качества сточных вод, сбрасываемых из выпусков РФЯЦ - ВНИИЭФ и ЭМЗ «Авангард», по результатам химического анализа. Проведено сжатие большого массива информации о химическом составе сточных вод 12 выпусков предприятий по среднегодовым значениям 20 показателей за шестилетний период. Первоначальный объем данных по протоколам анализа составил более 17 тыс. результатов измерений. На основании рассчитанных частных функций желательности с весовыми коэффициентами были получены значения комплексных показателей качества (ОФЖ) для каждого выпуска РФЯЦ-ВНИИЭФ и ЭМЗ «Авангард» за весь период исследований. Рассмотрим полученные результаты на примере сточных вод РФЯЦ-ВНИИЭФ. Как следует из данных приведенных в табл. 4, качество сточных вод выпусков РФЯЦ-ВНИИЭФ, характеризуемых ОФЖ, различается по годам исследований. Наибольшие колебания наблюдаются для выпусков 3, 5 и 11, причем в 2008 г. имеет место тенденция к улучшению. Относительно стабильным низким качеством сточных вод характеризуются выпуски 2, 6, 7 и 8, причем для вод выпуска 6 наблюдается тенденция к ухудшению. Полученные комплексные оценки качества сточных вод на основе ОФЖ позволили провести их ранжирование с целью установления наиболее неблагоприятных выпусков, поиска причин сложившейся ситуации и разработки мероприятий, направленных на ее устранение. На

рис. 1 представлено распределение убывающих значений обобщенного показателя качества сточных вод (вектор-строка) для выпусков РФЯЦ-ВНИИЭФ по данным 2003-2008 гг. Не меняя вектор-строку, т.е., оставляя позицию, присвоенную выпуску в 2003 г., неизменной в последующие годы, можно получить наглядное отображение динамики качества сточных вод на предприятии за анализируемый период.

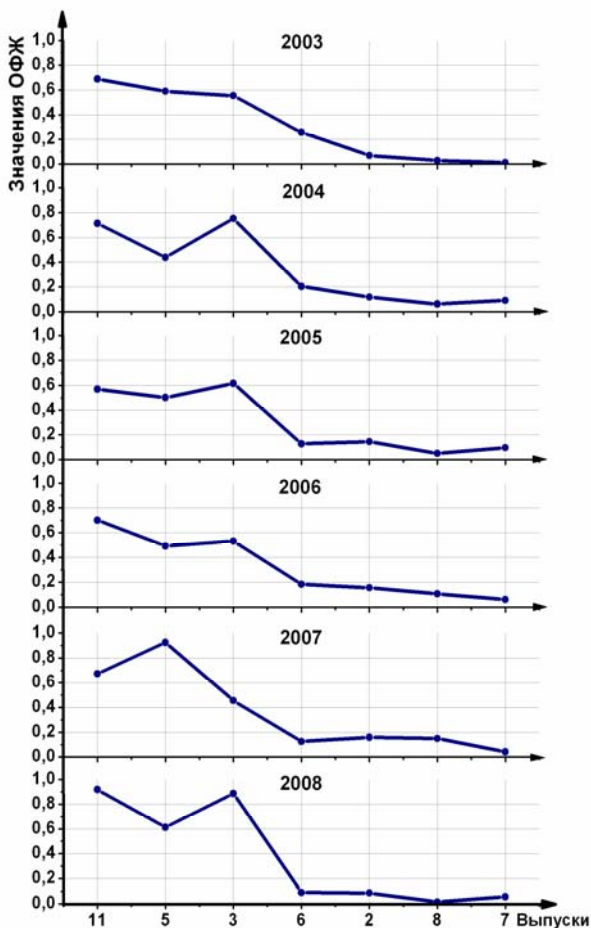


Рис. 1. Ранжирование выпусков РФЯЦ-ВНИИЭФ по обобщенному показателю качества сточных вод.

Таблица 4

Динамика комплексного показателя качества (ОФЖ) сточных вод по химическому составу для выпусков РФЯЦ-ВНИИЭФ в 2003-2008 гг.

Выпуски	Период исследований											
	2003		2004		2005		2006		2007		2008	
	Значение ОФЖ	Качество сточных вод	Значение ОФЖ	Качество сточных вод	Значение ОФЖ	Качество сточных вод	Значение ОФЖ	Качество сточных вод	Значение ОФЖ	Качество сточных вод	Значение ОФЖ	Качество сточных вод
2	0,070	Очень плохое	0,118	Очень плохое	0,145	Очень плохое	0,156	Очень плохое	0,159	Очень плохое	0,087	Очень плохое
3	0,555	Удовлетворительное	0,753	Хорошее	0,617	Удовлетворительное	0,531	Удовлетворительное	0,455	Удовлетворительное	0,886	Очень хорошее
5	0,590	Удовлетворительное	0,439	Удовлетворительное	0,503	Удовлетворительное	0,492	Удовлетворительное	0,925	Очень хорошее	0,612	Удовлетворительное
6	0,258	Плохое	0,203	Плохое	0,128	Очень плохое	0,416	Удовлетворительное	0,218	Плохое	0,206	Плохое
7	0,013	Очень плохое	0,090	Очень плохое	0,096	Очень плохое	0,061	Очень плохое	0,042	Очень плохое	0,056	Очень плохое
8	0,029	Очень плохое	0,062	Очень плохое	0,051	Очень плохое	0,108	Очень плохое	0,149	Очень плохое	0,014	Очень плохое
11	0,690	Хорошее	0,714	Хорошее	0,570	Удовлетворительное	0,701	Хорошее	0,673	Хорошее	0,919	Очень хорошее

Таким образом, актуализированные данные химического мониторинга сточных вод, отводимых через выпуски РФЯЦ-ВНИИЭФ и ЭМЗ «Авангард» за 2003-2008 гг., послужили основой для расчетов частных функций желательности для отдельных химических показателей по каждому выпуску с учетом класса опасности и превышения содержания над допустимым уровнем. Это дало возможность обосновать для каждого выпуска приоритетные загрязняющие вещества, оказывающие наибольшее влияние на качество сточных вод. Ретроспективный анализ динамики качества сточных вод позволил определить как временные параметры изменения качества сточных вод, так и выявить причины их обусловившие. Анализ этих причин, в свою очередь, позволяет найти «узкие места» в технологических процессах и дает возможность их устранения. Подчеркнем, что предложенная процедура ранжирования выпусков сточных вод по ОФЖ дает возможность в едином масштабе получать сопоставимые оценки качества сточных вод и оптимизировать водоохранные мероприятия.

Глава 5. Комплексная оценка качества сточных вод по показателям токсичности с применением функции желательности

В ходе работы было проанализировано 443 пробы сточных вод на токсичность с использованием инфузорий *P. caudatum* и 198 проб с использованием цериодафний *C. affinis* в качестве тест-организмов. Полученные комплексные оценки качества сточных вод (ОФЖ) по токсичности для выпусков РФЯЦ-ВНИИЭФ (табл.5), позволили провести их ранжирование с целью установления наиболее неблагоприятных выпусков, поиска причин сложившейся ситуации и разработки мероприятий, направленных на ее устранение.

Совпадение квалификационных характеристик качества сточных вод разных выпусков, полученных на основе биотестирования на инфузориях и цериодафниях, наблюдалось лишь для некоторых выпусков (табл. 5). Таким образом, применение предложенного комплексного показателя качества сточных вод (ОФЖ) не противоречит экотоксикологической парадигме биотестирования, согласно которой для гарантированного выявления присутствия в водном объекте токсического агента неизвестного химического состава должен использоваться набор тест-организмов, представляющих различные группы водного сообщества, – «батарея био-

тестов» (Филенко, 1989). Аналогичные результаты получены по сточным водам ЭМЗ «Авангард».

Таблица 5

Комплексные показатели качества (ОФЖ) сточных вод РФЯЦ-ВНИИЭФ по результатам биотестирования на инфузориях и цериодафниях

Номер выпуска	Биотестирование на Инфузориях (2003-2008 гг.)		Биотестирование на Цериодафниях (2005-2008 гг.)	
	Значение ОФЖ	Качество сточных вод	Значение ОФЖ	Качество сточных вод
5	0,886	Очень хорошее	0,556	Удовлетворительное
3	0,848	Очень хорошее	0,981	Очень хорошее
11	0,755	Хорошее	0,971	Очень хорошее
2	0,709	Хорошее	0,934	Очень хорошее
6	0,697	Удовлетворительное	0,599	Удовлетворительное
7	0,317	Плохое	0,078	Очень плохое
8	0,287	Плохое	0,152	Очень плохое

Таким образом, предложенные алгоритмы расчета показателей комплексной оценки химической опасности и токсичности сточных вод, представляющие собой адаптацию обобщенной функции желательности для целей сжатия информации в процедуре экодиагностики сточных вод, удовлетворяют требованиям адекватности, массовости, результативности и детерминированности.

Глава 6. Анализ зависимостей между показателями химического состава и параметрами токсичности сточных вод

Корреляционный анализ. Проанализированы результаты анализов токсичности и химического состава около 450 проб сточных вод из 12 выпусков, отобранных в течение 2003-2008 гг. В ходе исследований определена корреляционная связь между БКР и концентрацией химических веществ, растворенных в анализированных сточных водах. Все три используемых ранговых коэффициента корреляции (Спирмена, Кендалла и гамма-критерий) продемонстрировали весьма близкие результаты оценки значимости нулевой гипотезы, что свидетельствует о надежности полученных выводов. В целом на двух биотестах, статистически значимая корреляционная связь ($p < 0,05$), отмечена для веществ-органогенов (азот аммонийный, азот нитритов, азот нитратов); суммарных по-

казателей (взвешенные вещества, сухой остаток, БПК₅, ХПК), показателей солесодержания (сухой остаток, хлориды, сульфаты) и АПАВ. Отметим, что цериодафниевый тест имеет более высокую чувствительность и позволяет дать однозначную трактовку результатов, по сравнению с биотестом, основанном на хемотаксической реакции инфузорий. Так, кроме этих групп показателей по тесту на цериодафниях обнаружена связь токсичности с содержанием катионов металлов, в частности, железа и марганца.

Итак, выявлены приоритетные загрязняющие вещества, наибольшим образом влияющие на проявление токсичности сточных вод, что позволило перейти к следующему этапу – регрессионному анализу.

Регрессионный анализ. Для определения зависимости токсичности сточных вод (БКР) от концентраций загрязняющих веществ в них был проведен регрессионный анализ на основе кусочно-линейной регрессии. Для данных по биотестированию на *P. caudatum* получены уравнения с точкой разрыва на уровне 8,96 БКР: первому уравнению соответствует диапазон от 1,0 до 8,96 БКР, второму - от 8,96 БКР и выше.

$$\text{БКР} = 4,3828 - 0,0008C_{\text{сух.остат.}} + 4,8524C_{\text{АПАВ}} + 0,0353C_{\text{азот.аммон.}} - 0,0003C_{\text{сульфаты}}$$

$$\text{БКР} = -4,4715 + 0,0803C_{\text{сух.остат.}} - 62,0112C_{\text{АПАВ}} + 2,1909C_{\text{азот.аммон.}} - 0,0021C_{\text{сульфаты}}$$

По результатам регрессионного анализа для данных биотестирования по тесту на *S. affinis* получены уравнения зависимости с точкой разрыва на уровне 24,92 БКР: первому уравнению соответствует диапазон от 1,0 до 24,92 БКР, второму - от 24,92 БКР и выше.

$$\text{БКР} = 6,3615 - 0,0021C_{\text{сух.остат.}} + 0,0494C_{\text{ХПК}} + 0,0367C_{\text{азот.аммон.}} + 0,0049C_{\text{сульфаты}}$$

$$\text{БКР} = -49,3854 - 0,0990C_{\text{сух.остат.}} + 0,4973C_{\text{ХПК}} + 7,6973C_{\text{азот.аммон.}} + 3,9235C_{\text{сульфаты}}$$

Полученные уравнения статистически значимо ($p < 0,05$) характеризуют полученные зависимости.

Следует подчеркнуть, что результаты регрессионного анализа данных, полученных на двух тест-организмах, в целом, согласуются. Для *P. caudatum* и для *S. affinis* значимыми факторами в проявлении токсичности сточных вод являются аммонийный азот, сухой остаток и сульфаты.

Дискриминантный анализ. Применение дискриминантного анализа с пошаговой редукцией переменных, т.е. удаления из об-

шего массива данных тех, которые не влияют на токсичность (имеют наименьшие различия), удалось выявить показатели статистически значимо ($p < 0,05$), характеризующие токсичность вод. Для инфузорий это сухой остаток, АПАВ, аммонийный азот и сульфаты. Для цеериодафний таковыми являются сухой остаток, ХПК, аммонийный азот и сульфаты. Общая вероятность достоверного прогноза составила 81,4% для инфузорий и 82,3% для цеериодафний.

Таким образом, дискриминантный анализ позволил получить качественную характеристику отнесения вод к токсичной или не токсичной группе на основании параметров химического состава вод. Результаты дискриминантного анализа согласуются с результатами регрессионного и корреляционного анализа: полученные на их основе сведения о наиболее важных в формировании токсических свойств показателях вод идентичны.

Детерминационный анализ. Токсикологически допустимые уровни (ТДУ) содержания загрязняющих веществ представляют собой диапазоны концентраций веществ, содержащихся в сточных водах, в которых они не оказывают токсического действия на гидробионтов. Это понятие аналогично терминам «экологически допустимые уровни (нормативы)» (Замолодчиков и др., 1992; Левич, Терехин, 1997; Булгаков, Левич, Максимов, 2003; Левич, 2008), однако последние определяют требования к водам водных объектов, тогда как ТДУ нормируют содержание токсикантов в возвратных водах. В тесте на инфузориях условиями статистической значимости соответствовали полученные значения полноты и точности для следующих показателей: взвешенные вещества, АПАВ, сухой остаток, БПК₅, азот аммонийный, азот нитритов и азот нитратов. Таким образом, впервые полученные значения ТДУ для этих веществ, являются инструментом в корректировке экологических нормативов для сточных вод.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подводя итог проведенным исследованиям можно заключить, что предлагаемые алгоритмы применения ОФЖ для комплексной оценки качества сточных вод как многокомпонентных систем позволяют сжимать объем исходной информации, оперировать с большими массивами данных, а также удовлетворяют требованиям адекватности, массовости, результативности и детерминированности. Введение весовых коэффициентов при расчете ОФЖ повыси-

ло степень дискриминации сравниваемых проб сточных вод, как по их химическому составу, так и токсичности. Применение ОФЖ дало возможность сравнивать качество возвратных вод в едином масштабе квалификационных оценок. При помощи предложенных алгоритмов проведена экодиагностика сточных вод, сбрасываемых из выпусков предприятий, позволившая ранжировать выпуски по качеству отводимых вод, определить приоритетные загрязняющие вещества в сточных водах каждого выпуска, а также оценить динамику качества возвратных вод в течение многолетнего периода. Выявлены причины, обусловившие временные параметры качества сточных вод, что дало возможность оптимизировать водоохранные мероприятия.

Методами многомерного статистического анализа выявлена связь между токсичностью и компонентным составом сточных вод, установлены вещества, наибольшим образом влияющие на проявление токсичности, получены функции классификации, позволяющие прогнозировать токсичность вод по химическому составу. Впервые определены токсикологически допустимые уровни содержания ряда загрязняющих веществ в сточных водах, что дало возможность экологически обоснованно нормировать содержание этих веществ в отводимых водах с учетом их влияния на экосистемы водоемов.

ВЫВОДЫ

1. Обосновано и верифицировано применение весовых коэффициентов частных функций желательности: α_i – для учета класса опасности загрязняющего вещества; β_i – для учета превышения среднего измеренного значения показателя над нормативом и γ_i – для учета категории токсичности сточных вод, которые оптимизируют применение обобщенной функции желательности для целей экодиагностики сточных вод.

2. Методами корреляционного и регрессионного анализа установлены приоритетные загрязняющие вещества (показатели) в сточных водах, влияющие на их токсичность: суммарные показатели (взвешенные вещества, сухой остаток, ХПК, БПК₅), вещества-органогены (азот аммонийный, азот нитритов, азот нитратов, фосфаты), показатели солесодержания (сухой остаток, хлориды, сульфаты, фосфаты) и АПАВ.

3. Установлено, что к действию тяжелых металлов (железо и марганец) цериодафнии *C. affinis* в биотесте по выживаемости более чувствительны, чем инфузории *P. caudatum* в биотесте по хемотаксической реакции.

4. Методом дискриминантного анализа с пошаговой редукцией переменных получена качественная характеристика отнесения сточных вод к токсичной или не токсичной группе на основании параметров химического состава: для инфузорий – сухой остаток, АПАВ, аммонийный азот и сульфаты; для цериодафний – сухой остаток, ХПК, аммонийный азот и сульфаты. Общая вероятность достоверного прогноза составила 81,4% для инфузорий и 82,3% для цериодафний.

5. Методом детерминационного анализа обоснованы токсикологически допустимые уровни содержания загрязняющих веществ в сточных водах, ограничивающие диапазоны экологически безопасных концентраций, для следующих показателей: взвешенные вещества, АПАВ, сухой остаток, БПК₅, азот аммонийный, азот нитритов и азот нитратов, что является основой ужесточения нормативов содержания этих веществ в сточных водах перед их сбросом в природные водные объекты.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Работы, опубликованные в изданиях, определенных ВАК:

1. Гелашвили, Д.Б. Применение обобщенной функции желательности для оценки экологической обстановки на объектах разного масштаба: город, регион / Д.Б. Гелашвили, **А.В. Лисовенко**, Н.И. Зазнобина, А.А. Королев // Проблемы региональной экологии, 2009, № 2., С.83-88.
2. Гелашвили, Д.Б. Применение интегральных показателей на основе функции желательности для комплексной оценки качества сточных вод / Д.Б. Гелашвили, **А.В. Лисовенко**, М.Е. Безруков // Поволж. эколог. журн. 2010. №4. С.343-351.

Статьи, тезисы и материалы докладов региональных, всероссийских и международных конференций и семинаров:

3. **Лисовенко, А.В.** Исследования сточных вод с использованием методики определения токсичности воды по хемотаксической реакции инфузорий *Paramecium Caudatum* / **А.В. Лисовенко** // III сессия молодежной школы-семинара «Экологическая и промышленная безопасность», Тез.докл., Саров, 2003, С.13-14.

4. Ульяхина, Н.А. Взаимосвязь токсичности вод и их химического состава по хемотаксической реакции инфузорий / Н.А. Ульяхина, М.Е. Безруков, **А.В. Лисовенко** // Международный семинар «Высокоинтенсивные физические факторы в медицине, биологии, сельском хозяйстве и экологии», Саратов, 2004. С.349-354
5. **Лисовенко, А.В.** Оценка токсичности производственных сточных вод, сбрасываемых через выпуски РФЯЦ-ВНИИЭФ / **А.В. Лисовенко**, Н.А. Ульяхина // Международная конференция «Современные проблемы водной токсикологии», Тез.докл., Борок, 2005, С.85.
6. Ульяхина, Н.А. Взаимосвязь токсичности производственных сточных вод и их химического состава / Н.А. Ульяхина, **А.В. Лисовенко** // Международная конференция «Современные проблемы водной токсикологии», Тез.докл., Борок, 2005, С.149.
7. Лисовенко, А.В. Изучение взаимосвязи токсичности сточных вод и их химического состава / **А.В. Лисовенко**, Н.А. Ульяхина // XI Нижегородская сессия молодых ученых. Технические науки, Мат-лы докладов, Н.Новгород, 2006, С.79-80.
8. Ульяхина, Н.А. Исследования токсичности природных вод в створах выпусков сточных вод / Н.А., Ульяхина, **А.В. Лисовенко** // XI Нижегородская сессия молодых ученых. Технические науки, Мат-лы докладов, Н.Новгород, 2006, С.80-81.
9. **Лисовенко, А.В.** Анализ качества сточных вод с применением функции желательности на примере РФЯЦ-ВНИИЭФ / **А.В. Лисовенко**, Н.А. Ульяхина, О.П. Кузнецов, Д.Б. Гелашвили // Всероссийская молодежная научно-техническая конференция «Новые технологии водного транспорта», Мат-лы конф. Н.Новгород, 2007, С.35-37.
10. **Лисовенко, А.В.** Комплексная оценка качества сточных вод предприятия на основе химических и токсикологических показателей / **А.В. Лисовенко** // XIII Нижегородская сессия молодых ученых. Технические науки, Мат-лы докладов, Н.Новгород, 2008, С.96-97.
11. **Лисовенко, А.В.** Анализ связи токсичности сточных вод и содержания в них загрязняющих веществ статистическими методами / А.В. Лисовенко, **Н.А. Ульяхина** // VII сессия молодежной школы-семинара «Экологическая и промышленная безопасность», Мат-лы конф., Саратов, 2008. – С.142-148.
12. **Лисовенко, А.В.** Комплексная оценка сточных вод сложного состава / **А.В. Лисовенко** // III Всероссийская конференция по водной токсикологии, посвященная памяти Б.А. Флерова «Антропогенное влияние на водные организмы и экосистемы», конференция по гидрoэкологии «Критерии оценки качества вод и методы нормирования антропогенных нагрузок» и школа-семинар «Современные методы исследования и оценки качества вод, состояния водных организмов и экосистем в условиях антропогенной нагрузки», мат-лы конф., ч.3, Борок, 2008, С.63-68.

Формат 60x84 1/16. Гарнитура «Times New Roman».
Усл. Печ. Л. 1.
Тираж 100 экз.
Заказ 3131.

Типография: «ООО Саровская городская типография»
607185, Нижегородская область, г.Саров, ул.Зернова,24а,
тел.: (83130) 6-26-46, (83130) 7-63-91